Modélisations photochimiques saisonnières des stratosphères de Jupiter et Saturne

Vincent Hue

▶ **To cite this version:**

Vincent Hue. Modélisations photochimiques saisonnières des stratosphères de Jupiter et Saturne. Astrophysique [astro-ph]. Université de Bordeaux, 2015. Français. NNT : 2015BORD0155 . tel-01226888

HAL Id: tel-01226888

https://theses.hal.science/tel-01226888

Submitted on 10 Nov 2015

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.

université de BORDEAUX

THÈSE PRÉSENTÉE
POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR DE
L'UNIVERSITÉ DE BORDEAUX

École Doctorale des Sciences Physiques et de l'Ingénieur

Discipline : ASTROPHYSIQUE

Par
Vincent Hue

Modélisations photochimiques saisonnières des stratosphères de Jupiter et Saturne

Soutenue le 24 Septembre 2015

Devant le jury composé de :

T. Fouchet	Professeur, Université Paris VI, LESIA	Rapporteur
E. Lellouch	Astronome, LESIA	Rapporteur
M. Dobrijevic	Maître de conférences, Université de Bordeaux, LAB	Directeur de thèse
T. Greathouse	Senior Research Scientist, Southwest Research Institute	Examinateur
J.-C. Loison	Directeur de recherche, Université de Bordeaux, ISM	Président
A. Spiga	Maître de conférence, Université Paris VI, LMD	Examinateur
F. Hersant	Chargé de recherche, Université de Bordeaux, LAB	Invité
T. Cavalié	Chargé de recherche, LESIA	Invité

Thèse préparée à l'Observatoire Aquitain des Sciences de l'Univers
Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux
(OASU, UMR 5804-LAB)

Titre : Modélisations photochimiques saisonnières des stratosphères de Jupiter et Saturne.

Résumé :

L'un des objectifs de cette thèse est d'interpréter les observations des principaux hydrocarbures (C_2H_2 et C_2H_6) effectuées par Cassini (NASA/ESA) sur Jupiter et Saturne. Les modèles photochimiques à une dimension sont insuffisants pour interpréter ces observations spatialement résolues. J'ai développé le premier modèle photochimique saisonnier à deux dimensions (altitude-latitude) des planètes géantes qui calcule leur composition chimique.

En l'absence de transport méridional, la composition chimique de Saturne suit les variations d'ensoleillement. Les abondances de C_2H_2 et C_2H_6 mesurées par Cassini (Guerlet et al., 2009) sont reproduites jusqu'aux latitudes moyennes, à des pressions supérieures à 0,1 mbar. Les écarts notés dans l'hémisphère sud suggèrent la présence de dynamique ou d'une chimie entre les ions et les espèces neutres. J'ai couplé, pour la première fois, mon modèle photochimique avec le modèle radiatif de Greathouse et al. (2008). Nous prédisons un décalage du pic saisonnier de température, par rapport aux précédents modèles, d'une demi-saison à haute altitude et aux hautes latitudes.

Jupiter présente de faibles variations saisonnières de composition chimique, uniquement contrôlées par son excentricité. Les distributions méridionales observées de C_2H_2 et C_2H_6 présentent des tendances opposées (Nixon et al., 2010). Mon modèle est en accord avec les observations de C_2H_6 lorsque j'invoque une combinaison de diffusion méridionale et de circulation stratosphérique, tout en provoquant un plus grand désaccord avec les observations de C_2H_2. La chimie ionique pourrait principalement affecter C_2H_2 et jouer un rôle important dans l'atmosphère de Jupiter.

Mots-clés :

Planètes géantes ; Photochimie ; Stratosphère ; Simulations ; Jupiter ; Saturne ; Composition Chimique ; Effets Saisonniers ; Simulations Numériques ; Transfert Radiatif ; Structure Thermique ; Modèle Photochimique ; Modèle Radiatif ; Dynamique Atmosphérique ; Cassini-Huygens ; Réseau Chimique ; Réseau Chimique Réduit ; Couplage Température-Chimie ; Evolution

Title : Seasonal photochemical modeling of Jupiter and Saturn's stratosphere.

Abstract :

One of the goals of this thesis is to interpret the observations of the main hydrocarbons (C_2H_2 and C_2H_6) from Cassini (NASA/ESA) on Jupiter and Saturn. The one-dimensional photochemical models are insufficient to explain these spatially resolved observations. I have developed the first two-dimensional (altitude-latitude) seasonal photochemical model for the giant planets, which predicts their chemical composition.

Without meridional transport, Saturn's chemical composition follows the insolation variations. The C_2H_2 and C_2H_6 abundances measured by Cassini (Guerlet et al., 2009) are reproduced from the equator up to mid-latitudes, at pressures higher than 0.1 mbar. At higher latitudes, the disagreements suggest either a stratospheric circulation cell or the signature of ion-neutral chemistry. For the first time, I have coupled our seasonal photochemical model with the seasonal radiative model of Greathouse et al. (2008). I predict that the seasonal temperature peak is shifted half a season earlier, with respect to previous models, at high latitudes in the higher stratosphere.

Jupiter shows weak seasonal variations of chemical composition, only controlled by its orbital eccentricity. The observed meridional distributions of C_2H_2 and C_2H_6 show opposition trends (Nixon et al., 2010). C_2H_6 observed distribution is reproduced when I suppose a combination of meridional diffusion and stratospheric circulation, while causing at the same time a stronger agreement with the C_2H_2 observations. Accounting for the ion-neutral chemistry might preferentially affect C_2H_2 and potentially play a key role on hydrocarbon abundances in Jupiter's stratosphere.

Keywords :

Giant Planets ; Photochemistry ; Stratosphere ; Numerical Modeling ; Jupiter ; Saturn ; Chemical Composition ; Seasonal Effects ; Radiative Transfer ; Thermal Structure ; Photochemical Model ; 2D-model ; Radiative Model ; Atmospheric Dynamics ; Cassini-Huygens ; Chemical Network ; Reduced Chemical Network ; Temperature-Chemistry feedback ; Evolution

Unité de recherche :

Université de Bordeaux, Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, CNRS, UMR 5804, F-33270 Floirac, France

Remerciements

Tout d'abord je tenais à remercier mon incroyable famille pour m'avoir soutenu dans tous les instants. Ils furent nombreux et parfois difficiles. Sans vous, je n'aurai pu franchir les épreuves jalonnées sur mon chemin tout au long de ces 13 dernières années (depuis le brevet, en fait).

Je tiens à adresser mes plus sincères remerciements à mes 3 fantastiques directeurs de thèse. Très présents et complémentaires, je n'aurai pu rêver d'un meilleur encadrement. Ils ont toujours été prêt à prendre du temps pour moi, même en Skype à l'autre bout du monde pour m'écouter borborygmer une présentation d'un quelconque colloque. Michel, en plus d'être un enseignant exemplaire qui m'a donné le goût de la science et l'envie d'apprendre, tu as su m'encourager et me stimuler quand il le fallait. Franck, j'espère être rentré dans le top 5 de tes minions. Jamais à court d'astuces pour résoudre un problème, surtout si celui-ci implique transformées, limiteurs de flux et autres schémas numériques d'ordre variable. Tu as su me remonter le moral en me donnant à manger ton pain spiritique quotidien sur les fondements de la turbulence ou encore en me montrant comment gérer efficacement mes outputs moisis. Thibault, je ne sais pas vraiment par où commencer tellement j'ai appris de choses. Professionnellement, c'est génial de pouvoir bosser avec toi ; toujours disponible pour prendre du temps afin de répondre à mes questions, écrire un proposal d'observation, m'ouvrir à des collaborations. J'ai aussi beaucoup appris de toi sur le plan personnel et humain, entre comment réaliser un casse-croute andalou à 5 heures du matin ou comment improviser deux heures d'animation lors d'une soirée d'observation alors que le temps est merdique. Merci de te soucier de ma santé lors des weekend ski, en invitant tes amis pour amortir ma chute... Merci pour m'avoir partagé tes coups de coeur musicaux.

Je tenais particulièrement à remercier Franck (l'autre) qui, en plus de m'introduire à ce domaine de recherche, a servi de mentor le long de ma thèse. Je ne vois d'ailleurs pas mieux que de le citer pour le remercier, car appréciant, comme beaucoup à l'observatoire, les discussions avec Franck, on en sort néanmoins avec l'impression d'être ignorant en physique théorique, rugby, culture cinématographique, sport en tous genres (mais surtout rugby),... Je me dois aussi de remercier Jean Brillet pour ses nombreux conseils, programmes informatiques et nombreuses astuces. Comme beaucoup, j'ai énormément apprécié travailler avec lui et apprendre de lui. Merci à Françoise, Sean, Aurélie, Arnaud, Willy et Sylvia avec qui je n'ai pas travaillé mais dont la bonne humeur et l'humour donne au LAB un parfum agréable.

Merci à Tommy pour avoir accepté de m'accueillir dans le bunker du SwRI. Ce fut vraiment agréable de bosser avec toi. Merci au garde n°23 du SwRI de ne pas m'avoir tiré dessus à vue lorsque je finissais de travailler 10 secondes après la fermeture du portail (j'ai

failli y passer ce jour-là). Merci à Roth, Cesare, Alexis, Shrey, David et Debra pour leur accueil.

Merci à Michel Dobrijevic (encore lui !), Jean Brillet, Bertrand Dauphole, Emmanuel d'Humières, Philippe Tamarat et Hamid Kellay pour leur énorme implication dans l'enseignement à l'université de Bordeaux.

Je remercie l'équipe de choc du service de gestion, avec Cécile, Annick et Odile qui ont l'insurmontable tâche de ficeler les missions des chercheurs et doctorants en leur expliquant gentiment que "non, ce n'est pas bien de travailler à l'autre bout du monde sans ordre de mission". Merci pour votre patience à toute épreuve et votre infinie gentillesse.

Je tiens particulièrement à remercier l'équipe de l'UTL avec Willy, Thibault, Florent et Sarah. Grâce à vous, j'ai passé des soirées d'observation aussi passionnantes que ludiques. J'y ai appris beaucoup de choses, pas toutes forcément très utiles. Je remercie notre sponsor officiel McDonald de nous avoir fourni moulte pitance après de froides soirées d'hiver.

Merci à Christine d'avoir accepté de marrainer ma thèse, en me marinant régulièrement dans son bureau. Je tenais à remercier les personnes à l'intérieur de ma sphère de Hill. Merci à Thierry pour avoir tenté d'empoisonner ma souris. Merci à Fabrice pour ses techniques de relaxation verbales fort utiles. Merci à Alain pour son éternel optimisme. Merci à Sylvain pour ses discussions sur la formation des étoiles massives et la planche à voile. Merci à Muriel pour avoir su garder un cadre de travail calme et propice à la recherche. Merci à Didier pour ses cours de management organisationnel ainsi que pour ses bandes magnétiques, j'en prendrai grand soin. Merci à la brigade d'intervention MAC du service informatique. Merci d'avoir tout mis en œuvre pour me permettre de travailler

Je remercie l'équipe de doctorant et post-doc du LAB avec Émeline, Audrey, Christophe, Romuald, Olivia, Ugo, Jessica, Maxime, Dhiaa, Laura, Alizée, Marcelino, André, Ana. Merci à Émeline pour son optimisme à toute épreuve, pour avoir contribué à l'ambiance entre les doctorants en organisant des sorties et soirées régulières. Merci à elle pour avoir revisité l'intégrale des sonates de Chopin en sifflement de plombier, un grand moment. Merci à Audrey pour ses conseils en intégrale triple et gestion des effectifs du Stade Toulousain(g). Merci à Christophe pour ses abondants conseils en couture, tricot et tapisserie. Merci pour ses inestimables conseils informatiques depuis bien longtemps, avant même d'avoir commencé ma thèse. Merci à Romuald pour ses conseils de vieux routier, sa disponibilité et sa gentillesse. Merci à Olivia pour ses nombreux conseils en photochimie et gâteau au chocolat. Merci à Hincelin-sensei pour m'avoir suggérer de pratiquer le Kiba-dachi en regardant des films. Merci à Maxime pour ses cours de tuning sur Renault 5.

Merci à l'équipe du Badminton du jeudi soir ; Éric, Laurent, Mol, Romuald et François. Le très haut niveau sportif qui y fut pratiqué ainsi que la qualité des troisièmes mi-temps ont contribué à maintenir cette activité hebdomadaire.

Je remercie chaleureusement la formation musicale du LAB comprenant le bluesman Texan Philip Paillou, aka P.P. King, la talentueuse Cécile, et Sylvia, la prometteuse bat-

teuse médocaine. Merci pour ces quelques bons moments passés à revisiter quelques uns de mes morceaux de blues préférés. Merci pour avoir supporté mes nombreuses slides à la basse, cependant très funky. Merci aux Combo-Coaster, un sympathique groupe de blues local, pour avoir m'avoir permis de m'évader musicalement.

Merci à tous mes potes en dehors du LAB, j'ai de la chance de vous avoir. Merci à François, Matt, Nono, Mouli, Julie(s), Yoann, Mathias, Sabine, Raph, Auré, GG, Adèle, Boulouch, Minh, Xavier, Jigé, Marion, Suzie, Julien(s), Antoine(s), Guitou. Merci à Tracky et Sylvie. Merci aux nombreux colocs permanents ou de passage ; Pierre, Laurène, Valoche & Valoche, Fred, Aurélie, Ana, Maggie et bien sûr Zoé.

Un immense merci à Michelle de m'avoir fourni un cadre propice à la rédaction de ma thèse.

Afin de s'assurer qu'ils liront tous ces remerciements avant d'arriver à la partie les concernant, je tenais à particulièrement remercier Sarah et Mohamad (aka MAD, the dictator, Miguel-Angel Dominguez (de la Vega, el bailarin de salsa), et bientôt Michel Alain Dubois). Merci à MAD pour ses conseils avisés sur l'optimisation de l'espace d'une chambre d'hôtel, pour m'avoir enseigné les techniques ancestrales Libanaises de récupération d'autocollant NASA aux conférences et pour m'avoir introduit à un nouveau type révolutionnaire de régime Libanais, sans fruits ni légumes. Merci pour m'avoir montré qu'il suffisait d'un seul Libanais pour contrebalancer les efforts écologiques effectués par l'ensemble des Français. Merci à Sarah pour avoir accepté de m'accueillir dans ce bureau et de m'avoir supporté durant 2 ans. C'était agréable de partager le bureau avec toi, à tel point que l'on peut compter sur les doigts de la main le nombre de jours passés ensemble dans le bureau durant notre dernière année de thèse. Merci pour nos échanges qui m'ont très souvent remis en question et fait avancer autant personnellement que professionnellement. Merci d'avoir respecté l'article 3.2 du roommate agreement en rapportant régulièrement des stocks de bouffe que je m'ingéniais à torpiller dès que tu avais le dos tourné. Un grand merci à vous deux !

Table des matières

Introduction **1**

1 Un nouveau modèle photochimique pour les planètes géantes **9**
1.1 Introduction . . . 10
1.2 Équation de continuité à 2D dans les atmosphères planétaires . . . 10
1.2.1 Chimie atmosphérique . . . 10
1.2.2 Transport vertical . . . 15
1.2.3 Transport latitudinal . . . 19
1.2.4 Équation de continuité complète . . . 20
1.3 Description du modèle 2D . . . 20
1.3.1 Discrétisation de la divergence . . . 20
1.3.2 Schéma de discrétisation . . . 23
1.4 Résolution de l'équation de continuité . . . 28
1.4.1 Méthode de résolution : schémas explicites et implicites . . . 28
1.4.2 Écriture du Jacobien . . . 31
1.4.3 Conditions aux limites inférieures . . . 32
1.4.4 Conditions aux limites supérieures . . . 33
1.4.5 Discrétisation de l'atmosphère en altitude et latitude . . . 34
1.5 Transfert radiatif . . . 37
1.5.1 Généralités . . . 38
1.5.2 Interaction rayonnement - matière . . . 39
1.5.3 Calcul du flux actinique . . . 44
1.5.4 Comparaison des modèles de transfert radiatif . . . 53
1.6 Implémentation de la dimension saisonnière . . . 57
1.6.1 Éléments orbitaux . . . 57
1.6.2 Forçage saisonnier . . . 62
1.7 Réseau chimique . . . 63
1.7.1 Chimie des neutres dans les atmosphères planétaires : méthodologie 64
1.7.2 Réduction du réseau chimique . . . 66

2 Effets saisonniers sur Saturne **69**
2.1 Introduction . . . 70
2.2 Modélisation saisonnière de la photochimie de Saturne . . . 72
2.2.1 Variation des paramètres orbitaux . . . 72
2.2.2 Variation saisonnière du flux actinique . . . 74
2.2.3 Champ thermique . . . 77
2.3 Résultats . . . 85
2.3.1 Modélisation photochimique saisonnière : champ thermique uniforme 85

2.3.2 Impact de l'occultation des anneaux sur la photochimie 87
2.3.3 Effet de l'évolution saisonnière de la température sur la photochimie 93
2.3.4 Comparaison avec les observations Cassini/CIRS 99
2.4 Discussion 105
2.4.1 Coefficient de diffusion turbulente 106
2.4.2 Circulation stratosphérique dans Saturne 107
2.4.3 Diffusion latitudinale 108
2.4.4 Chimie ion-neutre 109
2.5 Conclusion / ouverture 109
2.5.1 Variations saisonnières de C_2H_6 et C_2H_2 110
2.5.2 Prise en compte du champ thermique saisonnier 110
2.5.3 Comparaison avec les observations Cassini/CIRS 111
2.5.4 Implication pour les modèles radiatifs 111

3 Couplage chimie-structure thermique sur Saturne 113
3.1 Introduction 114
3.1.1 Structure thermique des planètes géantes 114
3.1.2 Régulation thermique stratosphérique 115
3.1.3 Abondances des régulateurs thermiques stratosphériques 116
3.2 Couplage des modèles photochimiques et radiatifs saisonniers 117
3.2.1 Modèle photochimique 117
3.2.2 Modèle radiatif 118
3.2.3 Couplage des modèles photochimique et radiatif 124
3.3 Rétroaction chimie-structure thermique 125
3.3.1 Effet du couplage à 10^{-2} mbar 127
3.3.2 Effet du couplage à 1 mbar 130
3.4 Comparaison avec les observations de Cassini/CIRS 133
3.4.1 Observations au nadir 134
3.4.2 Observations au limbe 137
3.4.3 Discussions 139
3.5 Conclusion 140

4 Photochimie et transport dans la stratosphère de Jupiter 143
4.1 Introduction 144
4.1.1 Considérations générales 144
4.1.2 Observations infrarouges de Jupiter 145
4.1.3 Mélange stratosphérique 146
4.2 Effets saisonniers sur Jupiter 148
4.2.1 Caractéristiques du modèle 148
4.2.2 Approximations 153
4.2.3 Modélisation saisonnière de sa photochimie 156
4.2.4 Comparaison des variabilités saisonnières de Jupiter et Saturne . . . 160
4.2.5 Comparaison avec les observations de Cassini/CIRS 164

4.3 Phénomènes de mélange dans l'atmosphère de Jupiter . . . 166
4.3.1 Revue des connaissances actuelles . . . 167
4.3.2 Diffusion latitudinale . . . 168
4.3.3 Discussions . . . 172
4.4 Conclusion . . . 175

5 Perspectives et travaux futurs 177
5.1 Jupiter . . . 178
5.1.1 Introduction . . . 178
5.1.2 Définition de la carte des vents . . . 179
5.1.3 Circulation stratosphérique jovienne . . . 181
5.1.4 Discussion . . . 186
5.2 Saturne . . . 188

Annexes 193

A Stabilité numérique de la diffusion moléculaire 195
A.1 Diffusion moléculaire et advection . . . 195
A.2 Instabilités numériques . . . 196
A.3 Comparaison des schémas d'interpolation centrée et *upwind* d'ordre 1 et 2 198
A.3.1 Diffusion moléculaire pure . . . 199
A.3.2 Diffusions moléculaire et turbulente . . . 200
A.4 Influence du schéma d'interpolation sur le modèle photochimique . . . 201

B Fonction de Green d'un problème d'advection-diffusion 205

C Correction pour les couches sphériques 207

D Liste des publications 209
D.1 Hue et al. (2015a) . . . 209
D.2 Hue et al. (2015b) . . . 232

Bibliographie 249

Introduction

L'atmosphère

L'atmosphère est l'enveloppe gazeuse externe d'une planète. Elle est la zone de transition entre le milieu interplanétaire et les couches internes de la planète. Ces dernières sont constituées de roches avec une surface solide, dans le cas des planètes telluriques, ou principalement de gaz dense et chaud, dans le cas des planètes géantes. L'extension radiale de cette enveloppe est donnée par les caractéristiques de la planète, à savoir son champ de gravité, sa température, et sa composition chimique.

Les conditions physiques qui règnent dans le milieu interplanétaire et les couches internes des planètes sont très différentes. Les conditions aux limites qui s'exercent donc à l'interface supérieure et inférieure de l'atmosphère font de cette dernière une zone complexe qui possède des régions bien distinctes. Nous nous intéresserons ici particulièrement aux planètes géantes. Parmi les régions atmosphériques, la haute troposphère ainsi que la stratosphère des planètes géantes sont particulièrement intéressantes car aisément observables. La structure thermique de ces régions présente des similarités fortes d'une planète à l'autre, et la forme générale du profil vertical de température peut être schématisée comme sur la figure 1. Les similitudes entre les structures thermiques des planètes géantes résultent d'un équilibre entre les sources et les puits d'énergie radiative (Gautier and Owen, 1989).

L'origine du mot troposphère provient du grec *tropo*, qui implique un changement, un retournement. Cette région de l'atmosphère est opaque au rayonnement thermique provenant des couches internes, et la convection contrôle le mouvement des cellules d'air. Elle est caractérisée par une diminution croissante de la température avec l'altitude et se voit dominée par des phénomènes de mélange turbulent efficaces permettant d'en homogénéiser la composition. C'est la région purement convective de l'atmosphère.

Alors que la haute troposphère est chauffée à sa base par le rayonnement thermique de la planète, la stratosphère, moins dense, est chauffée par les rayonnements extérieurs qui la traversent. L'absorption de ces rayonnements par les espèces chimiques qui la composent est la cause de ce chauffage. La stratosphère tire son nom du préfixe grec *strato*, qui implique une idée de stratification. Cette région est en effet constituée de strates atmosphériques très stables dynamiquement. C'est la région purement radiative de l'atmosphère.

La haute troposphère est donc la zone de transition entre la région atmosphérique purement convective, et la région plus externe, radiative. La dynamique, le champ thermique et la chimie sont fortement couplés dans ces deux régions. Voyons plus en détails de quelles façons ces quantités interagissent entre elles.

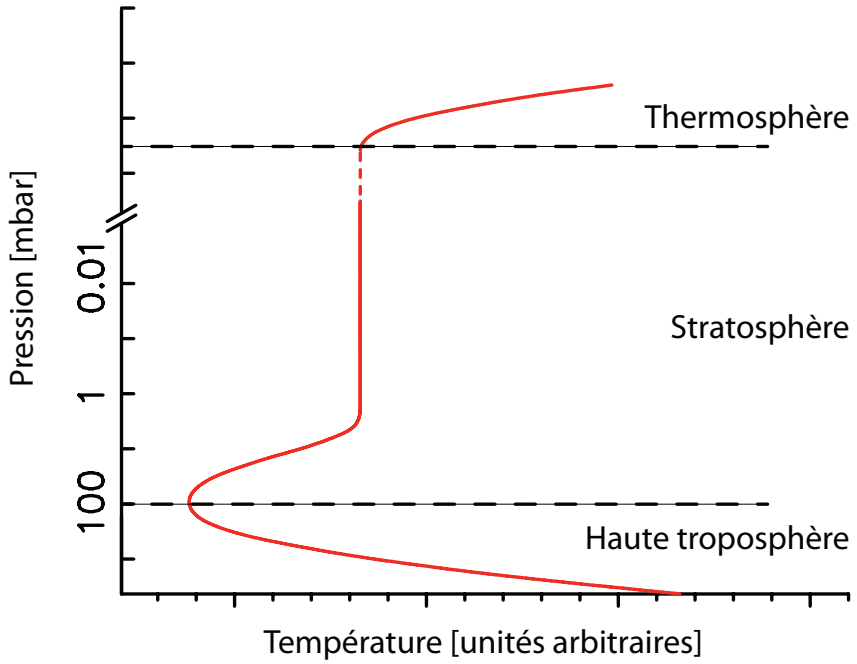

Figure 1 – Profil vertical de température typique des planètes géantes du Système solaire.

Processus physiques de la haute troposphère et de la stratosphère

• Couplage champ thermique - dynamique atmosphérique

En présence du forçage radiatif seul, la stratosphère serait dans un état très proche de l'équilibre radiatif. Cependant, la présence d'ondes atmosphériques qui se propagent depuis la troposphère jusque dans la stratosphère affecte cet équilibre, et ce, à la fois par le transport de moment angulaire ainsi que par le transport d'énergie (Shepherd, 2007). L'interaction de ces ondes avec la stratosphère génère des phénomènes de circulation atmosphérique.

Sur Terre par exemple, la circulation stratosphérique dite de *Brewer-Dobson* illustre l'interaction entre les ondes produites dans la troposphère qui, en se propageant dans la stratosphère, interagissent avec cette dernière (Butchart, 2014). Cette circulation consiste en un mouvement stratosphérique allant des faibles latitudes jusqu'aux hautes latitudes. À l'heure actuelle, une telle circulation n'a pas été mise en évidence dans les planètes géantes, mais l'interaction entre les ondes atmosphériques et la stratosphère a été observée.

Orton et al. (1991, 1994) et Leovy et al. (1991) mirent en évidence une oscillation thermique stratosphérique dans la région équatoriale de Jupiter. Cette planète fut observée de façon régulière sur une durée de 13 ans. Une oscillation thermique avec une période de 4-5 ans, nommée *quasi-quadriennal oscillation* (QQO) fut détectée. Cette oscillation possède un homologue terrestre, la *quasi-biennal oscillation*, QBO (Baldwin et al., 2001). Cette dernière est caractérisée par des bandes de vent zonal stratosphérique dans la région

équatoriale soufflant vers l'est et l'ouest de façon alternée. L'altitude à laquelle ces bandes de vent soufflent décroit dans le temps. Ces vents se dissipent lorsque leur altitude atteint la tropopause. La QBO est caractérisée par une signature thermique périodique, qui fut détectée sur Jupiter.

Une telle oscillation dans le champ thermique de Saturne a été mise en évidence à l'aide d'observations effectuées depuis le sol sur plus de 20 ans (Orton et al., 2008). L'évolution des températures ainsi mesurées est représentée sur la figure 2, à gauche. Cette détection fut par ailleurs renforcée par la mesure du profil vertical de température à l'aide de la sonde Cassini, en orbite autour de Saturne depuis 2004 (Fouchet et al., 2008). En effet, grâce à la sensibilité verticale de ces mesures, Fouchet et al. mirent en évidence la structure en courants jets des vents zonaux, caractéristiques des oscillations équatoriales. Le vent thermique déduit des observations est présenté sur la figure 2, à droite. Bien que ce vent fut interpolé dans la zone équatoriale, il laisse néanmoins suggérer la présence de ces bandes de vent aux limites de cette région.

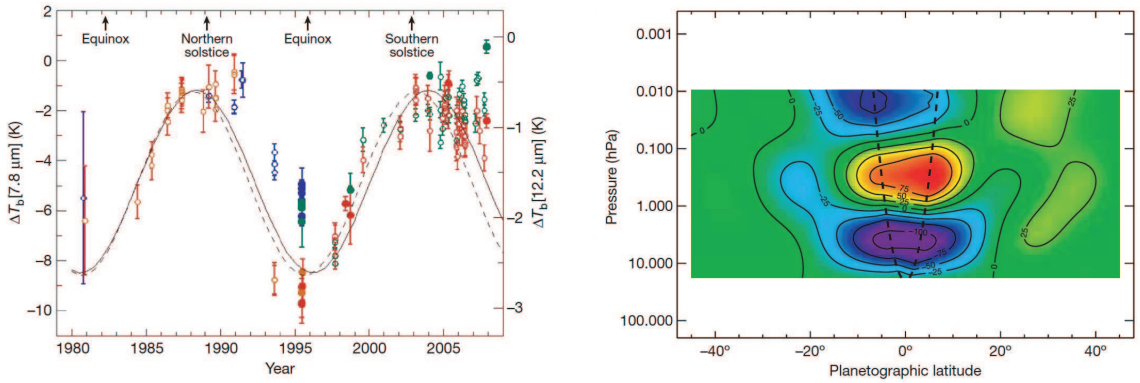

Figure 2 – **À gauche** : évolution de la différence de température de brillance entre deux latitudes équatoriales dans l'atmosphère de Saturne. Les températures de brillance de deux molécules ont été observées : méthane (bleu et vert), et éthane (orange et rouge). L'évolution de cette différence suit une sinusoïde de période 14,8 ans. Tiré de Orton et al. (2008). **À droite** : Carte de vent thermique ($m\,s^{-1}$) calculée à l'aide des observations de la température obtenues à partir des données acquises par la sonde Cassini. La zone de validité du vent thermique se situe en dehors de la région équatoriale dénotée par les pointillés.

La découverte de ces mécanismes suggère que les stratosphères des planètes sont des systèmes où la dynamique atmosphérique et le champ thermique sont couplés de façon complexe.

• Couplage champ thermique - chimie atmosphérique

La chimie atmosphérique joue aussi un rôle crucial dans l'évolution de ces régions atmosphériques. Les rayons solaires UV qui pénètrent dans la haute stratosphère photo-dissocient certains composés chimiques. Ces photolyses produisent des radicaux chimiques très réactifs qui initient alors de nombreuses réactions chimiques.

Sur Terre par exemple, la production d'ozone stratosphérique est initiée par la photolyse du dioxygène. Dans la stratosphère des planètes géantes, c'est la photolyse du méthane qui initie une chimie complexe des hydrocarbures. Ces photolyses ainsi que la chimie qui en découle ont un impact fort sur le champ thermique, et ceci de deux manières. Tout d'abord, l'absorption de rayonnement UV par les composés peut mener à la libération d'énergie cinétique par l'intermédiaire des radicaux produits, fournissant une source de chaleur localisée. Ensuite, la production de molécules absorbantes dans l'infrarouge fournit un moyen efficace de régulation de la structure thermique atmosphérique. Les raies très fortes de certains hydrocarbures observées dans les planètes géantes sont, par exemple, une preuve indiscutable de leur interaction avec le champ de rayonnement infrarouge de la planète. Afin d'illustrer ceci, la figure 3 présente le spectre infrarouge de Saturne observé par le satellite *Infrared Space Observatory* (ISO). Ce spectre met clairement en évidence la présence d'hydrocarbures dans cette planète.

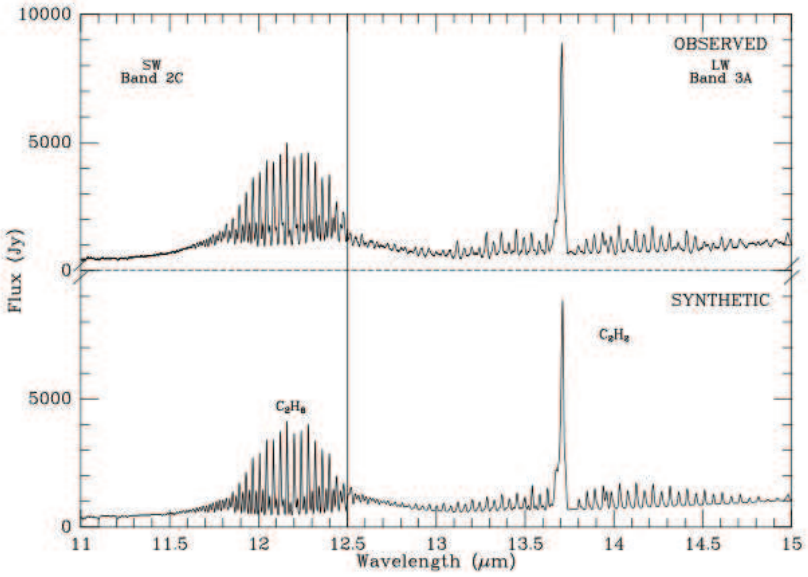

Figure 3 – Spectre de Saturne observé par ISO (en haut) et simulé (en bas). Les signatures spectrales de l'éthane (C_2H_6) et l'acétylène (C_2H_2) sont clairement identifiables. Tiré de de Graauw et al. (1997).

À l'inverse, la température atmosphérique affecte la chimie par l'intermédiaire de la dépendance thermique des taux de réaction ainsi que des taux de collision. De plus, la température à la base de la stratosphère contrôle les abondances des composés condensables en agissant comme un piège froid.

Ainsi, le couplage entre le champ thermique et la chimie atmosphérique est un élément important dans la compréhension des processus physico-chimiques qui contrôlent l'atmosphère.

- **Couplage dynamique atmosphérique - chimie atmosphérique**

Finalement, la présence de cellules de circulation affecte les abondances chimiques, en redistribuant les molécules dont la production chimique est spatialement localisée.

Inversement, la circulation atmosphérique peut isoler dynamiquement une certaine région du reste de l'atmosphère. Une fois encore, l'atmosphère terrestre fournit une bonne illustration de ce dernier phénomène. L'isolation dynamique du pôle Sud durant l'hiver par le vortex polaire offre un terrain propice à l'appauvrissement des molécules d'ozone stratosphérique dans cette région (Schoeberl and Hartmann, 1991).

Modélisation numérique des atmosphères

La dynamique atmosphérique, la chimie et le champ thermique sont tous trois couplés de façon complexe. L'étude de ces phénomènes implique la résolution simultanée :

- des équations hydrodynamiques
- des équations de cinétique chimique
- des équations de transfert radiatif

Il est irréaliste d'envisager, avec les moyens de calcul actuels, de résoudre l'ensemble de ces équations dans un modèle unique à 3D et en fonction du temps. Les différents processus physiques discutés ci-dessus doivent alors être découplés dans des modèles numériques indépendants.

La résolution des équations hydrodynamiques dans le cadre d'un *General Circulation Model* (GCM) impose une limite à la résolution spatiale des grilles de discrétisation en altitude, latitude et longitude de ces modèles. Cette résolution est donnée par le rayon de déformation de Rossby qui donne la taille caractéristique des phénomènes atmosphériques provoqués à la fois par la rotation de la planète et la stratification de l'atmosphère (Showman et al., 2010). Cette quantité, rapportée au rayon de la planète, est inférieure d'un ordre de grandeur pour Jupiter et Saturne par rapport à la Terre, ce qui implique des grilles numériques plus fines pour les planètes géantes.

À l'heure actuelle, il n'existe pas de GCM des planètes géantes qui prenne en compte l'évolution des mouvements zonaux, et qui permette de reproduire les champs thermiques des oscillations observées. Plusieurs équipes de recherche travaillent sur un GCM de Jupiter (Dowling et al., 2006; Medvedev et al., 2014) et Saturne (Dowling et al., 2006; Friedson and Moses, 2012; Spiga et al., 2014), mais ne tiennent systématiquement pas compte de l'influence de la chimie.

La chimie atmosphérique est traditionnellement étudiée dans le cadre de modèles photochimiques 1D. Ceux-ci résolvent les équations de cinétique chimique d'un nombre donné d'espèces, généralement une centaine. Ce système non-linéaire est couplé par un nombre important de réactions, jusqu'à 1 millier. La taille conséquente des réseaux chimiques a généralement restreint jusqu'ici ces modèles à une dimension spatiale (altitude). Les espèces sont ainsi libres de se déplacer verticalement en fonction de leur poids moléculaire

et de leur gradient d'abondance. En revanche, les effets des processus dynamiques complexes sur les espèces chimiques, tels que ceux suggérés par les oscillations équatoriales, ne peuvent être appréhendés dans ce type de modèle.

Finalement, l'étude de l'influence des radiations internes et externes à la planète sur son champ thermique se fait à l'aide de modèles radiatifs. Les processus dynamiques n'y sont pas pris en compte et les abondances des espèces chimiques qui interagissent avec le champ de rayonnement sont généralement supposées temporellement fixes (voir par exemple Guerlet et al. (2014)). Ces abondances sont soit calculées théoriquement à l'aide de modèles photochimiques, soit déterminées à l'aide d'observations.

Observation des planètes géantes

L'observation des composés atmosphériques est un moyen de connaître les conditions physiques qui règnent au sein d'une atmosphère. Les observations effectuées dans le domaine (sub-)millimétrique et infrarouge sont les principaux moyens observationnels disponibles pour sonder ces conditions. Les raies observées donnent alors une indication sur les conditions physico-chimiques qui règnent à des pressions de l'ordre du millibar.

La principale limitation des observations dans ce domaine spectral provient de leurs faibles résolutions spatiales. Le pouvoir de résolution [1] d'un télescope dépend en effet du rapport λ/D, où D est le diamètre du télescope utilisé et λ la longueur d'onde observée.

Le développement de moyens observationnels toujours plus performants au cours de ces dernières décennies a permis d'accroître les résolutions spatiales et spectrales des observations. La figure 4 présente l'évolution des résolutions spatiales des télescopes (sub-)millimétriques et infrarouges récents. Celles-ci sont comparées aux tailles apparentes de Jupiter et Saturne. Les télescopes spatiaux ISO, Odin et Herschel furent respectivement lancés en Novembre 1995, Février 2001 et Mai 2009.

Le radiotélescope interférométrique ALMA, inauguré officiellement en 2013, donne maintenant la possibilité de résoudre spatialement toutes les planètes géantes.

La cartographie de la température et des abondances des principaux composés a déjà débuté pour Saturne avec la mission Cassini (Fletcher et al., 2015b) ainsi que pour Jupiter lors du survol de cette sonde, et sera poursuivi très prochainement sur Jupiter avec les missions Juno et JUICE.

L'ensemble des perspectives observationnelles offertes par les récents télescopes terrestres ainsi que les futures missions spatiales suggère le développement de nouveaux outils numériques en vue de leurs interprétations. Ces nouveaux modèles doivent permettre de prédire la composition chimique à 3D dans les planètes géantes.

1. Plus petite séparation angulaire observable

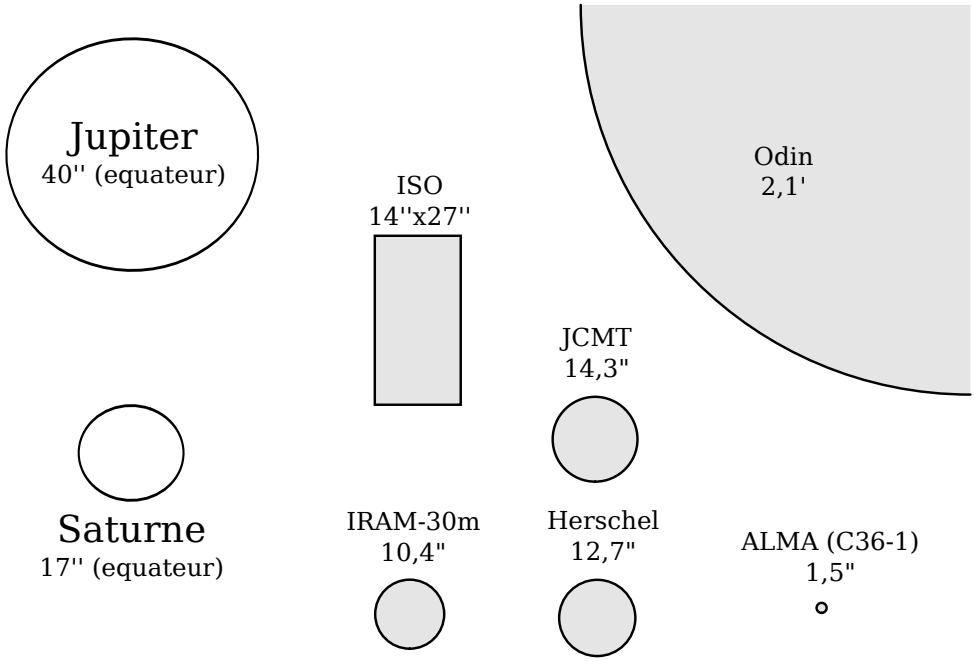

Figure 4 – Comparaison des tailles apparentes de Jupiter et Saturne avec les résolutions angulaires des principaux télescopes terrestres et spatiaux observant dans le domaine (sub-)millimétrique et infrarouge.

Développement de nouveaux outils numériques

Dans cette thèse, nous souhaitons développer un nouveau type de modèle qui puisse prédire l'abondance des espèces chimiques en fonction de la latitude et de la longitude des planètes géantes. Deux approches sont envisageables :

- développer un modèle photochimique à 2D-3D
- ajouter une chimie simplifiée dans un GCM de planète géante

Ces deux possibilités sont numériquement exigeantes. La taille des réseaux chimiques considérés dans les modèles photochimiques à 1D les rendent difficilement intégrables dans un modèle à plusieurs dimensions si l'on souhaite conserver des temps de calculs raisonnables.

Par ailleurs, bien que plusieurs équipes travaillent sur le développement de GCM de planètes géantes, il n'existe pas de modèle opérationnel à l'heure actuelle. Lefèvre et al. (2004) démontrèrent la faisabilité d'un GCM couplé avec une chimie réaliste, dans le cadre de la planète Mars. Cependant, cette solution est difficilement applicable à Jupiter et Saturne, car leur rayon de déformation de Rossby (rapporté à leur rayon planétaire) est vingt fois plus petit que dans le cas de Mars (Showman et al., 2010).

La démarche adoptée dans cette thèse a été de partir d'une approche classique de modélisation photochimique à 1D, et d'augmenter la complexité du modèle en ajoutant des dimensions spatiales supplémentaires. Les principaux objectifs qui ont motivé le développement de ce modèle sont les suivants :

- étudier les effets saisonniers
- étudier les processus physico-chimiques localisés dans l'espace (apports locaux issus de l'interaction avec des satellites ou des systèmes d'anneaux) et le temps (apports cométaires)
- étudier les cartes d'abondance observées afin de mieux contraindre les processus physiques et chimiques atmosphériques
- introduire à terme une chimie de plus en plus complexe qui varie spatialement, comme la chimie des ions-neutres aux hautes latitudes

Dans le cadre de cette thèse, nous avons donc développé un nouveau modèle photochimique saisonnier à 2D en altitude et en latitude. La versatilité de ce modèle en fait un outil adapté à de nombreuses utilisations.

La description du modèle est détaillée dans le chapitre 1 de cette thèse. Nous avons diminué les contraintes numériques imposées par les réseaux chimiques conséquents qui sont traditionnellement utilisés dans les modèles 1D grâce à un réseau chimique réduit.

Une version du modèle adapté à Saturne a servi dans un premier temps à étudier le couplage entre sa composition chimique et son champ thermique. Nous avons tout d'abord étudié les effets saisonniers sur Saturne qui se manifestent à la fois sur sa composition chimique et sur son champ thermique. Nous avons alors étudié l'effet de ces variations saisonnières de température sur sa composition. Les résultats obtenus, qui constituent le chapitre 2, représentent un pas vers une meilleure compréhension de l'impact du champ thermique sur la composition chimique.

Une étape supplémentaire de la prise en compte de ce couplage a ensuite été franchie en calculant l'effet des variations saisonnières de composition sur le champ de température. Le modèle photochimique de Saturne présenté dans le chapitre 2 a été couplé dans ce but au modèle radiatif de Greathouse et al. (2008). Les résultats obtenus, exposés dans le chapitre 3, constituent à l'heure actuelle la vision la plus poussée du couplage entre la composition chimique atmosphérique et le champ de température.

Nous avons ensuite développé une version de Jupiter du modèle photochimique 2D, ce qui nous permis d'étudier les effets saisonniers sur sa composition chimique, ainsi que de les comparer à ceux précédemment calculés pour Saturne. Les nombreuses missions spatiales qui ont visité cette planète fournissent de fortes contraintes sur sa composition. La reproduction des observations du survol de Cassini nous a permis d'étudier de manière préliminaire le couplage entre la dynamique atmosphérique et le champ d'abondance. Ces résultats sont présentés dans le chapitre 4.

Enfin, une étape additionnelle dans l'étude de ce dernier couplage a été franchie par la prise en compte de cellules de circulation atmosphériques. Le chapitre 5 présente les résultats préliminaires et dresse les axes de recherche futurs.

Chapitre 1

Un nouveau modèle photochimique pour les planètes géantes

Sommaire

1.1 Introduction 10
1.2 Équation de continuité à 2D dans les atmosphères planétaires 10
1.2.1 Chimie atmosphérique 10
1.2.2 Transport vertical 15
1.2.3 Transport latitudinal 19
1.2.4 Équation de continuité complète 20
1.3 Description du modèle 2D 20
1.3.1 Discrétisation de la divergence 20
1.3.2 Schéma de discrétisation 23
1.4 Résolution de l'équation de continuité 28
1.4.1 Méthode de résolution : schémas explicites et implicites 28
1.4.2 Écriture du Jacobien 31
1.4.3 Conditions aux limites inférieures 32
1.4.4 Conditions aux limites supérieures 33
1.4.5 Discrétisation de l'atmosphère en altitude et latitude 34
1.5 Transfert radiatif 37
1.5.1 Généralités 38
1.5.2 Interaction rayonnement - matière 39
1.5.3 Calcul du flux actinique 44
1.5.4 Comparaison des modèles de transfert radiatif 53
1.6 Implémentation de la dimension saisonnière 57
1.6.1 Éléments orbitaux 57
1.6.2 Forçage saisonnier 62
1.7 Réseau chimique 63
1.7.1 Chimie des neutres dans les atmosphères planétaires : méthodologie 64
1.7.2 Réduction du réseau chimique 66

1.1 Introduction

Nous exposons en détail dans ce chapitre le développement du modèle photochimique saisonnier à 2D.

Dans un premier temps, nous introduirons l'équation de continuité à deux dimensions qui contrôle l'évolution spatio-temporelle de la concentration d'une espèce chimique. Dans cette équation, nous détaillerons les termes de production et de perte chimique, puis les termes responsables du transport et du mélange des espèces.

Bien que les surfaces planétaires des géantes gazeuses diffèrent d'une forme strictement sphérique, nous avons opté pour le développement d'un modèle à géométrie sphérique. Nous présenterons alors la discrétisation de cette équation sur la grille sphérique considérée ainsi que l'outil de résolution numérique utilisé.

Nous discuterons du modèle de transfert radiatif utilisé pour calculer l'atténuation du rayonnement UV lors de sa propagation dans l'atmosphère. Nous exposerons ensuite la façon d'implémenter la dimension saisonnière dans le modèle. Enfin, nous présenterons le réseau chimique utilisé dans ce travail.

1.2 Équation de continuité à 2D dans les atmosphères planétaires

Considérons une atmosphère modélisée par une succession de couches en latitude et en altitude. L'équation de continuité s'écrit sous la forme suivante :

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = P_i - n_i L_i - div\, \mathbf{\Phi_i} \tag{1.1}$$

où $\mathbf{\Phi_i}$ = flux de l'espèce i [$\mathrm{cm^{-2}\,s^{-1}}$]
n_i = concentration de l'espèce chimique i [$\mathrm{cm^{-3}}$]
P_i = terme de production chimique de l'espèce i [$\mathrm{cm^{-3}\,s^{-1}}$]
L_i = terme de perte chimique de l'espèce i [$\mathrm{s^{-1}}$]

Intéressons-nous dans un premier temps aux termes chimiques P_i et L_i qui mènent à la production et à la destruction des espèces chimiques.

1.2.1 Chimie atmosphérique

Les composés chimiques peuvent principalement interagir de deux façons :

– par réactions chimiques avec un ou plusieurs autres composés, avec une cinétique dépendante des conditions de pression/température
– par réactions photochimiques avec les photons issus d'une source de rayonnement, solaire ou externe au Système solaire, et dont la cinétique varie en fonction de cette source

Décrivons tout d'abord la cinétique chimique du premier type de réaction.

Cinétique chimique

Prenons le cas d'une réaction chimique arbitraire pouvant s'écrire de la façon suivante :

$$\sum_{i=1}^{n_r} \alpha_i A_i \longrightarrow \sum_{j=1}^{n_p} \alpha_j A_j \tag{1.2}$$

où A_i, A_j = i$^{\text{ème}}$ réactif et j$^{\text{ème}}$ produit de la réaction
α_i, α_j = coefficients stœchiométriques du i$^{\text{ème}}$ réactif et j$^{\text{ème}}$ produit de la réaction
n_r, n_p = nombre de réactifs et nombre de produits de la réaction

La conservation de la matière impose, lors de la réaction 1.2, la relation :

$$-\frac{1}{\alpha_i}\frac{\mathrm{d}[A_i]}{\mathrm{dt}} = \frac{1}{\alpha_j}\frac{\mathrm{d}[A_j]}{\mathrm{dt}} = v \tag{1.3}$$

où v = vitesse de réaction [$\mathrm{cm^{-3}\,s^{-1}}$]
$[A]$ = concentration de l'espèce A [$\mathrm{cm^{-3}}$]

(1.4)

La vitesse de réaction v représente le nombre de molécules de réactif/produit qui sont détruits/créés par unité de volume et par unité de temps.
On peut alors définir la vitesse de destruction du réactant A_i, notée v_{A_i} [$\mathrm{cm^{-3}\,s^{-1}}$], ainsi que la vitesse de production du produit A_j, notée v_{A_j} [$\mathrm{cm^{-3}\,s^{-1}}$] comme étant :

$$v_{A_i} = \frac{\mathrm{d}[A_i]}{\mathrm{dt}} \quad ; \quad v_{A_j} = \frac{\mathrm{d}[A_j]}{\mathrm{dt}} \tag{1.5}$$

Dans le cas d'une réaction de type (1.2), celle-ci se produira lorsque les réactants rentreront en contact en un point de l'espace. Il est intuitif de penser que plus la concentration de réactants sera élevée, plus ces collisions se produiront. Des collisions à 3, 4, 5

corps ont statistiquement moins de chance de se produire par rapport à des collisions à 2 corps. Ainsi, Van't Hoff postula que la vitesse de réaction v prend la forme suivante :

$$v = k \prod_{i=1}^{n_r} [A_i]^{\alpha_i} \tag{1.6}$$

où k = constante de vitesse dont l'unité dépend du type de réaction (voir texte)

L'unité de la constante de vitesse va dépendre du nombre de réactants impliqués dans la réaction. Pour une réaction à 2 corps, k est exprimé en $[\mathrm{cm^3\,s^{-1}}]$ et en $[\mathrm{cm^6\,s^{-1}}]$ pour une réaction à 3 corps.

La dépendance thermique des constantes de vitesse de réaction à 2 corps s'exprime par la loi d'Arrhénius, qui prend la forme suivante :

$$k(T) = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \tag{1.7}$$

où A = facteur pré-exponentiel (aussi appelé facteur de fréquence), de même dimension que k
E = énergie d'activation de la réaction $[\mathrm{J\,mol^{-1}}]$
R = constante des gaz parfaits $[\mathrm{J\,mol^{-1}\,K^{-1}}]$

L'énergie d'activation E peut être vue comme une énergie à apporter au système afin de vaincre la barrière de potentiel créée par la répulsion coulombienne à longue portée des nuages électroniques. Ainsi, plus la température du système sera élevée, plus l'énergie cinétique des composés permettra de vaincre cette barrière d'activation.
La loi d'Arrhénius est cependant seulement valide dans une certaine gamme de température. Aussi, il est courant de trouver un ajustement de cette loi pour certaines réactions afin de couvrir une plus large gamme de température. Cette loi, dite d'Arrhénius modifiée prend alors la forme suivante :

$$k(T) = aT^b \exp\left(-\frac{c}{RT}\right) \tag{1.8}$$

où a = facteur pré-exponentiel, de même dimension que k
b = coefficient d'ajustement de la dépendance thermique du facteur pré-exponentiel
c = énergie d'activation [J]

Notons ici que les constantes de vitesse dans les bases de données chimiques (par exemple KIDA (Wakelam et al., 2012)) sont souvent données suivant la formulation d'Arrhénius-Kooij, soit :

$$k_{Kooij}(T) = \alpha \left(\frac{T}{300\,\mathrm{K}}\right)^{\beta} \exp\left(-\frac{\gamma}{RT}\right) \tag{1.9}$$

Il est par ailleurs nécessaire de prendre en compte une limite de cette loi à basses pressions pour les réactions à 3 corps du type $A + B \xrightarrow{M} C$. En effet, ce type de réaction nécessite un 3^{eme} corps (M) afin de stabiliser le produit de la réaction et il est intuitif de penser que plus la concentration sera grande et plus l'efficacité de la réaction sera importante. La zone de transition entre les régimes basses et hautes pressions s'appelle la zone de *fall-off*, et plusieurs formulations existent (Lindemann, Troe). La formulation de Troe que nous avons utilisée s'écrit :

$$k_{Troe}(T) = \frac{k_0\ [M]}{1 + k_0\ [M]\ /k_\infty} F \tag{1.10}$$

où k_0 = constante de vitesse dans la limite des basses pressions [$\mathrm{cm^6\,s^{-1}}$]
k_∞ = constante de vitesse dans la limite des fortes pressions [$\mathrm{cm^3\,s^{-1}}$]
F = facteur d'élargissement permettant un meilleur ajustement de $k_{Troe}(T)$ dans la zone de *fall-off*

Photodissociation des molécules

La photochimie est initiée lorsque des composés absorbent un photon. Il passe alors dans un état excité.

$$A + h\nu \longrightarrow A^*$$

Une fois dans cet état excité A^*, plusieurs voies de désexitation sont possibles :
- désexcitation par réémission d'un photon de même longueur d'onde ou de longueur plus grande : $A^* \longrightarrow A + h\nu'$
- ionisation du composé chimique : $A^* \longrightarrow A^+ + e^-$
- dissociation du composé chimique : $A^* \longrightarrow B + C$

Nous nous intéresserons principalement au dernier processus de désexcitation. Nous ne prendrons pas en compte la chimie ionique dans cette thèse. Plusieurs voies de dissociation sont éventuellement possibles. L'importance d'une voie par rapport à une autre

est quantifiée par le rapport de branchement, noté q qui dépend de la longueur d'onde et de la température. Ce rapport est compris entre 0 et 1, tel que :

$$\sum_k q_k = 1$$

où k = nombre de voies de photodissociation

En l'absence d'autres termes de production et de perte chimiques, ou encore de phénomène de transport, la variation temporelle du nombre de molécules i par unité de temps s'exprime de la façon suivante :

$$\frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{dt}} = -J_i\, n_i(t) \tag{1.11}$$

où J_i = coefficient de photodissociation [s^{-1}]

Ce coefficient J_i donne le nombre de photodissociations du composé i par unité de temps dû à l'ensemble des voies de dissociation possibles sur la totalité du spectre. Il se calcule comme :

$$J_i(z) = \int_{\lambda=0}^{\infty} F(\lambda, z)\, \sigma_i(\lambda) \sum_{k=0}^{n_k} q_{i,k}(\lambda)\, \mathrm{d}\lambda \tag{1.12}$$

où $q_{i,k}(\lambda)$ = rapport de branchement de la voie k du composé i
n_k = nombre de voies de dissociation
$\sigma_i(\lambda)$ = section efficace du composé i [cm^2]
$F(\lambda, z)$ = flux actinique à la longueur d'onde λ et l'altitude z [$\mathrm{cm}^2\,\mathrm{s}^{-1}$]

Le flux actinique est une quantité fondamentale du modèle. Il correspond à la quantité de photons incidents en un point de l'atmosphère. Il est calculé comme le rapport entre la quantité de photons à une altitude donnée et la quantité de photons en haut de l'atmosphère. Nous verrons dans un second temps comment calculer ce flux.

Revenons maintenant à l'équation de continuité 1.1. Le flux de matière de l'espèce i peut être décomposé suivant les directions latitudinales et verticales. Notons ici que les caractères gras dénotent un vecteur. Ainsi, dans un référentiel sphérique à 2D, la divergence de ce flux prend la forme suivante :

$$div\,\mathbf{\Phi_i} = \frac{1}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}\left(z^2\Phi_i^z\right) + \frac{1}{z\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\Phi_i^\theta\right)$$

où Φ_i^z = flux de l'espèce i lié au transport vertical [$\mathrm{cm^{-2}\,s^{-1}}$]
Φ_i^θ = flux de l'espèce i lié au transport latitudinal [$\mathrm{cm^{-2}\,s^{-1}}$]
z = distance au centre de la planète [cm]

Le flux de l'espèce i comprend généralement deux termes de mélange bien différents. Tout d'abord, on distingue les phénomènes de transport advectif qui sont des processus directionnels liés à la présence de vent. Ceux-ci, par exemple, peuvent être générés par un gradient de température (vent thermique) ou par l'équilibre entre les forces de Coriolis et les forces qui résultent du gradient de pression atmosphérique (vent géostrophique). Les phénomènes de diffusion, quand à eux, sont associés à une réponse d'une inhomogénéité spatiale. Nous séparerons les flux de matière dans les dimensions verticale (altitude) et latitudinale (latitude). Intéressons-nous dans un premier temps au transport vertical.

1.2.2 Transport vertical

La diffusion turbulente

La très grande majorité des modèles photochimiques des planètes géantes se focalise sur une description la plus précise possible des processus chimiques. Par exemple, les modèles photochimiques de Moses et al. (2000a,b, 2005); Venot et al. (2012) incluent plus d'une centaine de composés couplés par parfois plus d'un millier de réactions. Ces modèles, pour des contraintes de temps de calcul évidentes, se limitent à la résolution à une dimension des équations de cinétique chimique. Par ailleurs, ces modèles se limitent à la résolution de l'équation de continuité 1.1 et ne sont donc pas en mesure de calculer l'évolution d'une perturbation hydrodynamique comme en seraient capables des GCM (voir par exemple les modèles de Dowling et al. (2006); Medvedev et al. (2013).)
Ainsi, à cause de la restriction à une dimension des modèles photochimiques ainsi que du caractère non-hydrodynamique de ces modèles, l'ensemble des processus dynamiques (hors diffusion moléculaire) sont paramétrisés par un terme de diffusion, appelé diffusion turbulente. Ces processus ont des origines diverses et variées, qui ne sont pas toujours bien quantifiés. Ils peuvent par exemple être dus à la propagation d'ondes de gravité et aux marées atmosphériques, qui sont des oscillations d'origine thermique, ainsi qu'aux fluctuations de certaines grandeurs comme la vitesse ou la concentration totale. L'importance de cette diffusion pour une espèce i est proportionnelle à l'écart de sa concentration par rapport à la concentration totale.

$$\Phi_i^z = -K_{zz}n\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{n_i}{n}\right) \tag{1.13}$$

Nous pouvons alors réécrire ce flux en fonction des fractions molaires $y_i = n_i/n$:

$$\Phi_i^z = - K_{zz} n_i \left(\frac{1}{y_i} \frac{\partial y_i}{\partial z} \right) \tag{1.14}$$

L'évaluation de ce coefficient est un point délicat. De nombreux travaux théoriques ont montré par exemple que la dissipation d'ondes de gravité génèrent des phénomènes de turbulence dont l'efficacité du mélange résultant grandit avec l'altitude dans la stratosphère (Lindzen, 1967, 1968; Lindzen and Blake, 1971; Lindzen, 1981). Dans le cas des planètes géantes, ces ondes sont générées par la convection dans la troposphère et se propagent verticalement dans la stratosphère. Leur amplitude croit le long de leur propagation pour devenir instable et se dissiper, ce qui engendre un mélange turbulent des parcelles d'air (Irwin, 2009). Le coefficient de diffusion turbulente qui dérive de ces travaux est supposé varier dans la stratosphère comme l'inverse de la racine carrée de la concentration. Il s'exprime généralement de la façon suivante :

$$K_{zz}(z) = K_0 \left(\frac{P_0}{P(z)} \right)^{\gamma} \tag{1.15}$$

où K_0 = coefficient de diffusion turbulente à une altitude de référence [$\mathrm{cm^2\,s^{-1}}$]
P_0 = pression à une altitude de référence [mbar]

En pratique, la formulation théorique de l'équation (1.15) ne fonctionne pas toujours de façon satisfaisante, et c'est généralement les observations qui permettent d'affiner la contrainte sur cette quantité.

La diffusion moléculaire

La diffusion moléculaire est différente de la diffusion turbulente. Celle-ci va se mettre en place dès que la concentration d'un composé s'écartera de l'équilibre hydrostatique. Lorsqu'une espèce est à cet équilibre, elle vérifie la relation :

$$\frac{\partial \tilde{n_i}}{\partial z} = -\tilde{n_i} \left(\frac{1}{H_i} + \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial z} \right) \tag{1.16}$$

où $\tilde{n_i}$ = distribution des composés suivant l'équilibre hydrostatique [$\mathrm{cm^{-3}}$]

L'écriture du flux de particules généré via la diffusion moléculaire est très similaire au flux généré par la diffusion turbulente (cf. équation 1.13). La différence notable vient

du fait que l'on substitue $\tilde{n_i}$ à n_i, le système étant maintenant hors équilibre lorsqu'un composé ne vérifie plus l'équilibre hydrostatique. Par ailleurs, on substitue D_i le coefficient de diffusion moléculaire à K_{zz}, le coefficient de diffusion turbulente. Le flux de l'espèce i dû à la diffusion moléculaire s'écrit donc :

$$\Phi_i^z = - D_i \tilde{n_i} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{n_i}{\tilde{n_i}} \right) \tag{1.17}$$

$$= - D_i \tilde{n_i} \left(\frac{1}{\tilde{n_i}} \frac{\partial n_i}{\partial z} - \frac{n_i}{\tilde{n_i}^2} \frac{\partial \tilde{n_i}}{\partial z} \right) \tag{1.18}$$

$$= - D_i n_i \left(\frac{1}{n_i} \frac{\partial n_i}{\partial z} + \frac{1}{H_i} + \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial z} \right) \tag{1.19}$$

où D_i = coefficient de diffusion moléculaire [$\mathrm{cm^2\,s^{-1}}$]

Un terme lié à la diffusion thermique doit aussi être pris en compte. Celui-ci caractérise la diffusion de particules en réponse à un gradient thermique, et dont l'importance est contrôlée par le facteur de diffusion thermique α_i (Yung and DeMore, 1999). Cette diffusion joue cependant un rôle très minoritaire comparée aux autres termes de diffusion, α_i est nul pour toutes les espèces, sauf pour l'hydrogène atomique où α_i = -0,38 (Kockarts, 2002).

Le flux de l'espèce i lié au transport vertical s'écrit alors :

$$\Phi_i^z = -D_i n_i \left(\frac{1}{n_i} \frac{\partial n_i}{\partial z} + \frac{1}{H_i} + \frac{(1+\alpha_i)}{T} \frac{\partial T}{\partial z} \right) \tag{1.20}$$

Ce flux, exprimé à l'aide des fractions molaires s'écrit alors :

$$\Phi_i^z = - D_i n_i \left(\frac{1}{y_i} \frac{\partial y_i}{\partial z} + \frac{1}{H_i} - \frac{1}{H} + \frac{\alpha_i}{T} \frac{\partial T}{\partial z} \right) \tag{1.21}$$

La théorie qui décrit la diffusion moléculaire dans un mélange binaire est relativement bien connue (Reid et al., 1988). Pour un mélange de deux types de molécules, A et B, le flux de particule A suit une loi de Fick. Il s'écrit donc :

$$\phi_A = -n D_{AB} \frac{\mathrm{d}y_A}{\mathrm{d}z} \tag{1.22}$$

Théoriquement, ce coefficient D_{AB} est obtenu en résolvant l'équation de Boltzmann (Reid et al., 1988). Fuller et al. (1966) ont modifié la forme du coefficient D_{AB} et proposèrent l'expression suivante :

$$D_{AB} = \frac{0,00143\,T^{1,75}}{P\sqrt{M_{AB}}}\left[(\Sigma_v)_A^{(1/3)} + (\Sigma_v)_B^{(1/3)}\right]^2 \tag{1.23}$$

où Σ_v = somme des volumes de diffusion atomique de chaque atome constituant les espèces A ou B

Les valeurs des volumes de diffusion atomique ont été tabulées par Fuller et al. (1969) à l'aide de mesures expérimentales de coefficient de diffusion. Dans le cas des planètes géantes, l'atmosphère est dominée par un mélange H_2 / He dont la proportion varie suivant la planète considérée, le coefficient de diffusion d'un composé i s'écrit donc :

$$D_{im} = \left(\frac{y_{H_2}}{D_{i\,H_2}} + \frac{y_{He}}{D_{i\,He}}\right)^{-1} \tag{1.24}$$

La dépendance en pression du coefficient D_i est P^{-1} (cf équation 1.23) alors que la dépendance en pression du coefficient de diffusion turbulente $K(z)$ est $P^{-\frac{1}{2}}$ (cf équation 1.15). Par conséquent, dans la basse atmosphère, c'est la diffusion turbulente qui va dominer, et inversement, dans la haute atmosphère, ce sera la diffusion moléculaire qui va dominer. L'homopause est l'altitude pour laquelle les termes de diffusion moléculaire et turbulent sont égaux.

Le transport vertical advectif

Le modèle photochimique développé ici prend aussi en compte le transport de masse d'air par la présence de cellules de circulation. À la différence des modèles de type GCM où les cellules de circulation sont calculées par le modèle et influencées par les conditions aux limites du modèle (Friedson and Moses, 2012), les vents sont ici des paramètres d'entrée. Le flux vertical de matière qui résulte d'une circulation advective s'écrit [1] :

$$\Phi_i^z = v^z n_i \tag{1.25}$$

où v^z = vent vertical de la circulation advective, commun à toutes les espèces [$\mathrm{cm\,s^{-1}}$]

1. Afin de clarifier les équations suivantes qui comportent de nombreux indices, la nomenclature Φ^z et v^z qui signifie les flux de matière et vitesse suivant l'axe z a été adopté. Ces quantités ne sont évidemment pas portées à la puissance z.

Finalement, le flux de l'espèce i lié au transport vertical sous l'effet combiné des diffusions turbulentes, moléculaires ainsi que de la présence de vent vertical s'écrit :

$$\Phi_i^z = - D_i n_i \left(\frac{1}{y_i} \frac{\partial y_i}{\partial z} + \frac{1}{H_i} - \frac{1}{H} + \frac{\alpha_i}{T} \frac{\partial T}{\partial z} \right) - K n_i \left(\frac{1}{y_i} \frac{\partial y_i}{\partial z} \right) + v^z n_i \tag{1.26}$$

1.2.3 Transport latitudinal

Décrivons à présent les phénomènes pris en compte par le modèle et qui sont responsables du transport latitudinal.

La diffusion latitudinale

Le flux de particule lié à ce transport résulte de la présence d'un gradient de concentration dans la distribution de particule. Ce flux s'écrit sous la forme suivante :

$$\Phi_i^\theta = - \left(D_i + K_{yy} \right) n \left(\frac{\partial y_i}{z \partial \theta} \right) \tag{1.27}$$

où D_i = coefficient de diffusion moléculaire [$\mathrm{cm^2\,s^{-1}}$]
K_{yy} = coefficient de diffusion turbulente latitudinal [$\mathrm{cm^2\,s^{-1}}$]

De façon similaire au transport vertical, nous considérerons deux processus de diffusion. Le coefficient de diffusion moléculaire D_i est calculé de façon identique, via l'équation 1.23. En revanche, K_{yy} est un paramètre libre qui pourra soit être calqué sur le coefficient de diffusion turbulente verticale, soit ajusté afin de reproduire les observations.

Le transport latitudinal advectif

De façon identique à la dimension verticale, le modèle développé peut prendre en compte la circulation latitudinale. Le flux méridional résultant d'une telle circulation s'écrit :

$$\Phi_i^\theta = v^\theta n_i \tag{1.28}$$

où v^θ = vent latitudinal de la circulation advective [$\mathrm{cm\,s^{-1}}$]

Finalement, le flux de l'espèce i lié au transport latitudinal sous l'effet combiné de la diffusion ainsi que de la présence de vent s'écrit :

$$\Phi_i^\theta = -\left(D_i + K_{yy}\right) n \left(\frac{\partial y_i}{z\partial\theta}\right) + v^\theta n_i \tag{1.29}$$

1.2.4 Équation de continuité complète

Afin de conclure cette première partie, l'équation de continuité 1.1 présentée en introduction de ce chapitre et complétée de l'ensemble des termes chimiques et de transport détaillés ici s'écrit :

$$\begin{aligned}\frac{\partial n_i}{\partial t} &= P_i - n_i L_i + \\ &\frac{1}{z^2}\frac{\partial}{\partial z}\left[z^2\left(D_i n_i\left(\frac{1}{y_i}\frac{\partial y_i}{\partial z} + \frac{1}{H_i} - \frac{1}{H} + \frac{\alpha_i}{T}\frac{\partial T}{\partial z}\right) + Kn\frac{\partial y_i}{\partial z} - v^z n_i\right)\right] \\ &+ \frac{1}{z\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\left(\left(D_i + K_{yy}\right)\frac{n}{z}\frac{\partial y_i}{\partial\theta} - v^\theta n_i\right)\right]\end{aligned} \tag{1.30}$$

Nous allons résoudre cette équation de continuité pour chaque espèce chimique considérée, à chaque altitude et chaque latitude du modèle. Notons que certaines de ces équations de continuité sont fortement couplées entre elles par des termes chimiques dont les temps caractéristiques d'évolution peuvent avoir plusieurs ordres de grandeurs d'écart.

1.3 Description du modèle 2D

Nous allons maintenant présenter les équations du modèle photochimique discrétisées à deux dimensions en géométrie sphérique.

1.3.1 Discrétisation de la divergence

L'atmosphère étudiée sera décomposée en n_Z cellules en altitude. Elles iront d'une valeur minimale z_{min} à une valeur maximale z_{max}, le pas en altitude Δz sera pris constant. La décomposition en latitude se fera aussi suivant un pas constant, noté $\Delta\theta$. La grille en latitude partira d'une valeur $\theta_{min} - \frac{\pi}{2}$ donnée pour atteindre une valeur $\frac{\pi}{2} - \theta_{min}$. Du fait de l'approximation sphérique considérée, les latitudes planétocentriques et planétographiques sont identiques.

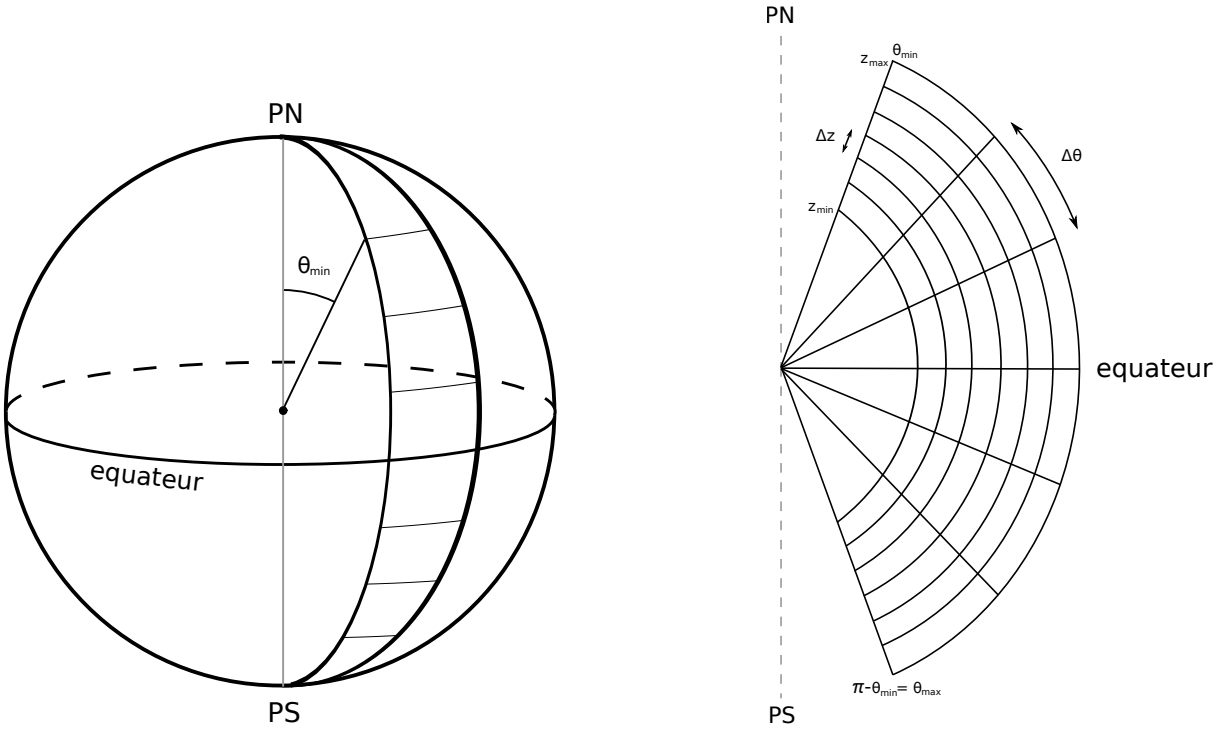

Figure 1.1 – Schéma représentant la discrétisation à deux dimensions du modèle photochimique. À gauche, représentation sur une sphère de la discrétisation latitudinale du modèle. À droite, discrétisation en altitude et latitude utilisée et respectivement notées Δz et $\Delta\theta$. PN et PS dénotent respectivement les pôles Nord et Sud.

La discrétisation de la divergence du flux de transport vertical et latitudinal de l'équation 1.30 pour une espèce i à une altitude donnée, repérée par l'indice j et à une latitude donnée, repérée par l'indice l s'écrit :

$$div\,\mathbf{\Phi_i^{j,l}} = \frac{(z^{j+\frac{1}{2},l})^2\,\Phi_i^{z\ j+\frac{1}{2},l} - (z^{j-\frac{1}{2},l})^2\,\Phi_i^{z\ j-\frac{1}{2},l}}{(z^{j,l})^2\,\Delta z} + \frac{\sin(\theta^{l+\frac{1}{2}})\,\Phi_i^{\theta\ j,l+\frac{1}{2}} - \sin(\theta^{l-\frac{1}{2}})\,\Phi_i^{\theta\ j,l-\frac{1}{2}}}{z^j\,\Delta\theta\sin\theta^l} \tag{1.31}$$

où $\Phi_i^{z\ j+\frac{1}{2},l}$ = flux vertical du composé i entre les cellules en altitude repérées par les indices j et $j+1$ à une latitude donnée, repérée par l'indice l [$\mathrm{cm^{-2}\,s^{-1}}$]

$\Phi_i^{\theta\ j,l+\frac{1}{2}}$ = flux latitudinal du composé i entre les cellules en latitude repérées par les indices l et $l+1$ à une altitude donnée, repérée par l'indice j [$\mathrm{cm^{-2}\,s^{-1}}$]

D'après l'équation 1.26, le flux vertical de matière à l'interface entre les cellules repérées par les indices j, l et $j+1, l$ s'écrit :

$$\begin{aligned}\Phi_i^{z\ j+\frac{1}{2},l} = &- D_i^{z\ j+\frac{1}{2},l} n_i^{j+\frac{1}{2},l} \left(\frac{1}{y_i^{j+\frac{1}{2},l}} \left.\frac{\partial y_i}{\partial z}\right|_{j+\frac{1}{2},l} + \frac{1}{H_i^{j+\frac{1}{2},l}} - \frac{1}{H_a^{j+\frac{1}{2},l}} + \frac{\alpha_i}{T^{j+\frac{1}{2},l}} \left.\frac{\partial T}{\partial z}\right|_{j+\frac{1}{2},l} \right) \\ &- K^{z\ j+\frac{1}{2},l} n_i^{j+\frac{1}{2},l} \left(\frac{1}{y_i^{j+\frac{1}{2},l}} \left.\frac{\partial y_i}{\partial z}\right|_{j+\frac{1}{2},l} \right) + v^{z\ j+\frac{1}{2},l} n_i^{j+\frac{1}{2},l} \end{aligned} \tag{1.32}$$

On posera alors :

$$\Psi_i^{j+\frac{1}{2},l} = \frac{1}{H_i^{j+\frac{1}{2},l}} - \frac{1}{H_a^{j+\frac{1}{2},l}} + \frac{\alpha_i}{T^{j+\frac{1}{2},l}} \left.\frac{\partial T}{\partial z}\right|_{j+\frac{1}{2},l} \tag{1.33}$$

De même, d'après l'équation 1.29 le flux latitudinal à l'interface entre les cellules repérées par les indices j, l et $j, l+1$ s'écrit :

$$\Phi_i^{\theta\ j,l+\frac{1}{2}} = -(D_i^{\theta\ j,l+\frac{1}{2}} + K^{\theta\ j,l+\frac{1}{2}}) \left(\left.\frac{\partial n_i}{\partial \theta}\right|_{j,l+\frac{1}{2}} \right) + v^{\theta\ j,l+\frac{1}{2}} n_i^{j,l+\frac{1}{2}} \tag{1.34}$$

Les quantités évaluées aux interfaces entre les cellules sont prises égales aux moyennes de ces quantités dans chacune des cellules adjacentes. Ainsi :

$$\begin{aligned} D_i^{z\ j+\frac{1}{2},l} &\approx \frac{1}{2}\left(D_i^{z\ j,l} + D_i^{z\ j+1,l}\right) \approx \langle D_i^{z\ j+\frac{1}{2},l} \rangle \\ D_i^{\theta\ j,l+\frac{1}{2}} &\approx \frac{1}{2}\left(D_i^{\theta\ j,l} + D_i^{\theta\ j,l+1}\right) \approx \langle D_i^{\theta\ j,l+\frac{1}{2}} \rangle \\ \left.\frac{\partial y_i}{\partial z}\right|_{j+\frac{1}{2},l} &\approx \frac{y_i^{j+1,l} - y_i^{j,l}}{z^{j+1} - z^j} = \frac{\Delta y_i^{j+\frac{1}{2},l}}{\Delta z} \\ \left.\frac{\partial n_i}{\partial \theta}\right|_{j,l+\frac{1}{2}} &\approx \frac{n^{j,l}\, y_i^{j,l} - n^{j,l+1}\, y_i^{j,l+1}}{z^j(\theta^{l+1} - \theta^l)} = \frac{\Delta n_i^{j+\frac{1}{2},l}}{z^j\, \Delta\theta} \end{aligned}$$

Le flux vertical et le flux latitudinal peuvent alors se réécrire de la façon suivante :

$$\Phi_i^{z\ j+\frac{1}{2},l} = -\langle n^{j+\frac{1}{2},l}\rangle \left\{ \langle D_i^{z\ j+\frac{1}{2},l}\rangle \left(\frac{\Delta y_i^{j+\frac{1}{2},l}}{\Delta z} + y_i^{j+\frac{1}{2},l} \langle \Psi_i^{j+\frac{1}{2},l}\rangle \right) \right\}$$
$$- \langle n^{j+\frac{1}{2},l}\rangle \left\{ \langle K^{z\ j+\frac{1}{2},l}\rangle \left(\frac{\Delta y_i^{j+\frac{1}{2},l}}{\Delta z} \right) \right\} + v^{z\ j+\frac{1}{2},l} n_i^{j+\frac{1}{2},l} \tag{1.35}$$

$$\Phi_i^{\theta\ j,l+\frac{1}{2}} = -\left(\langle D_i^{\theta\ j,l+\frac{1}{2}}\rangle + \langle K^{\theta\ j,l+\frac{1}{2}}\rangle \right) \left(\frac{\Delta n_i^{j,l+\frac{1}{2}}}{z^j \Delta\theta} \right) + v^{\theta\ j,l+\frac{1}{2}} n_i^{j,l+\frac{1}{2}} \tag{1.36}$$

$\langle \Psi_i^{j+\frac{1}{2},l}\rangle$ [cm^{-1}] prend la forme suivante :

$$\langle \Psi_i^{j+\frac{1}{2},l}\rangle = \frac{2}{H_i^{j+1,l} + H_i^{j,l}} - \frac{2}{H_a^{j+1,l} + H_a^{j,l}} + \frac{2\alpha_i}{\Delta z} \frac{T^{j+1} - T^j}{T^{j+1} + T^j} \tag{1.37}$$

La quantité Ψ est d'une grande importance pour ce qui va suivre. Physiquement, elle prend en compte les effets de chute des espèces chimiques liés à la gravité ainsi que les phénomènes de diffusion liés à la présence d'un gradient de température. Si l'on néglige la diffusion thermique, elle est positive ou négative suivant la masse des particules. Si une espèce chimique a une masse molaire supérieure à la masse molaire moyenne, la fonction Ψ sera positive. Inversement, si sa masse molaire est supérieure à la masse molaire moyenne elle sera négative. Ceci revêt une grande importance car cette fonction Ψ fait partie d'un terme d'advection dans l'équation 1.35. En effet, ce terme s'identifie clairement à un terme advectif caractérisé par une vitesse $\langle D_i^{z\ j+\frac{1}{2},l}\rangle \langle \Psi_i^{j+\frac{1}{2},l}\rangle$. Afin d'éviter les instabilités numériques, une grande précaution doit être apportée au schéma numérique traitant des termes d'advection. Le lecteur intéressé peut se référer à l'annexe A pour une discussion plus conséquente sur le sujet. Nous allons ainsi maintenant présenter les différents schémas numériques utilisés pour discrétiser les termes $y_i^{j+\frac{1}{2},l}$ de l'équation 1.35.

1.3.2 Schéma de discrétisation

Isolons tout d'abord le terme advectif du flux vertical de l'équation 1.35, tout en négligeant le flux advectif pur lié à la présence du vent v^z afin de simplifier le problème.

$$\left(\Phi_i^{z\ j+\frac{1}{2},l} \right)^{adv} = -\langle n^{j+\frac{1}{2},l}\rangle \langle D_i^{z\ j+\frac{1}{2},l}\rangle y_i^{j+\frac{1}{2},l} \langle \Psi_i^{j+\frac{1}{2},l}\rangle \tag{1.38}$$

L'apparition d'instabilités dans le modèle va dépendre de la façon dont $y_i^{j+\frac{1}{2},l}$ est interpolée. Cette interpolation suivant un schéma centré s'écrit :

$$\left(y_i^{j+\frac{1}{2},l}\right)^{centre} = \frac{y_i^{j,l} + y_i^{j+1,l}}{2} \tag{1.39}$$

Le schéma centré, largement utilisé dans les modèles photochimiques (voir par exemple ceux de Collet et al. (2010); Venot et al. (2012); Hu et al. (2012); Agúndez et al. (2014)) est instable. Il peut cependant être stabilisé sous certaines conditions (voir annexe A). D'autres interpolations existent, et notamment les interpolations *upwind* d'ordre 1 et 2, qui s'implémentent de façon différente. Elles nécessitent de connaitre la direction de propagation du vent incident afin d'utiliser seulement les fractions en amont du vent incident pour l'interpolation de la quantité $y_i^{j+\frac{1}{2},l}$. Lorsque celui-ci est dirigé suivant la direction des z croissants, en accord avec la figure 1.2, l'interpolation de $y_i^{j+\frac{1}{2},l}$ s'effectue de la façon suivante :

$$\left(y_i^{j+\frac{1}{2},l}\right)^{upwind\,1} = y_i^{j,l} \tag{1.40}$$

$$\left(y_i^{j+\frac{1}{2},l}\right)^{upwind\,2} = \frac{3}{2}\,y_i^{j,l} - \frac{1}{2}\,y_i^{j-1,l} \tag{1.41}$$

Inversement, lorsque le vent est dirigé suivant la direction des z négatifs, l'interpolation de $y_i^{j+\frac{1}{2},l}$ s'écrit :

$$\left(y_i^{j+\frac{1}{2},l}\right)^{upwind\,1} = y_i^{j+1,l}$$

$$\left(y_i^{j+\frac{1}{2},l}\right)^{upwind\,2} = \frac{3}{2}\,y_i^{j+1,l} - \frac{1}{2}\,y_i^{j+2,l}$$

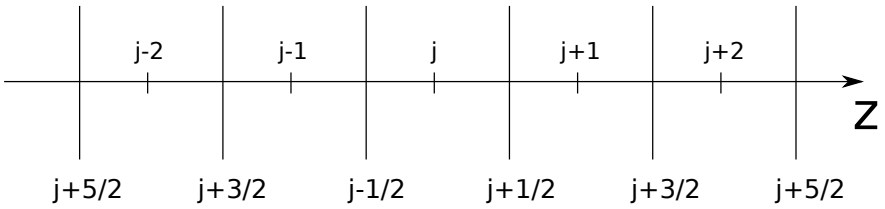

Figure 1.2 – Schéma représentant la discrétisation en altitude appliquée, les valeurs demi-entières de j représentent les interfaces entre les cellules de la grille.

Parmi les trois schémas numériques présentés plus haut, seuls le schéma *upwind* d'ordre 1 est stable. En revanche, ce schéma présente une diffusivité numérique importante. Les schémas centré et *upwind* d'ordre 2 sont instables, ou peuvent être stabilisés sous certaines conditions (voir annexe A).

La grande diffusivité du schéma *upwind* d'ordre 1 peut se comprendre à l'aide de la figure 1.3. En effet, dans les zones de gradients élevés, le fait de prendre la valeur directement en amont du vent incident implique une erreur d'autant plus importante que l'amplitude du gradient est importante. L'interpolation *upwind* d'ordre 2 consiste à corriger l'erreur faite par l'interpolation d'ordre 1 à l'aide de deux valeurs de la fractions molaires en amont du vent. Elle permet de limiter la diffusivité du schéma *upwind* d'ordre 1, mais génère des oscillations dans les fractions molaires proches des zones de gradients élevés.

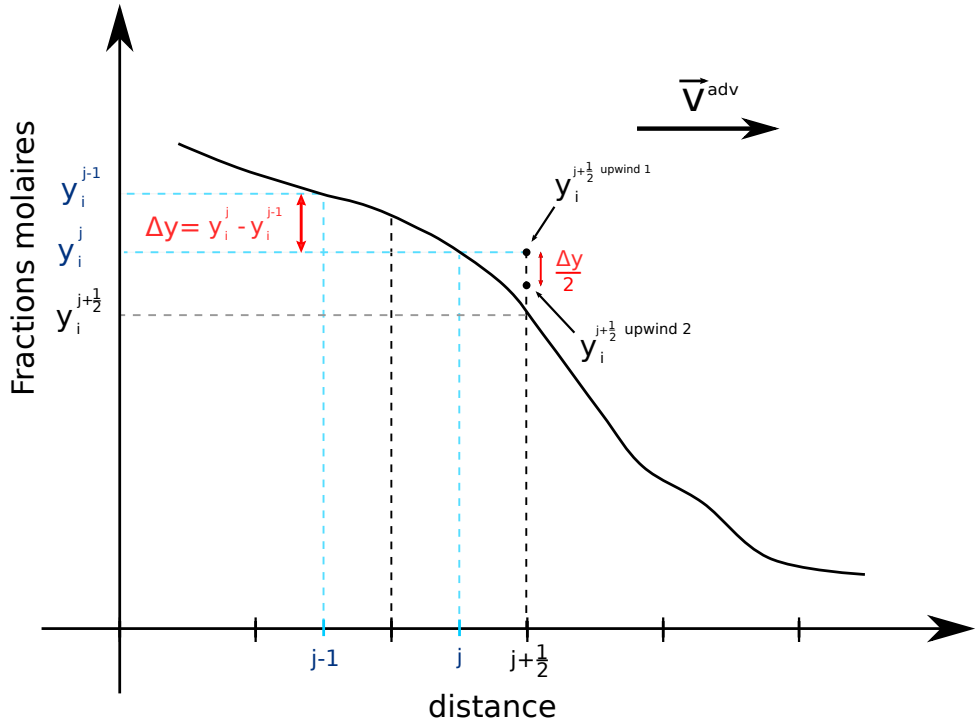

Figure 1.3 – Représentation graphique de l'évolution de la fraction molaire en fonction de la distance (altitude). L'interpolation *upwind* d'ordre 1 consiste à utiliser la fraction molaire directement en amont du vent incident, impliquant une erreur importante. L'interpolation au second ordre implique une correction utilisant deux valeurs des fractions molaires en amont du vent incident.

Finalement, la discrétisation de la divergence à deux dimensions de l'équation 1.1 s'écrit :

$$
\begin{aligned}
div\ \mathbf{\Phi}_i^{j,l} = & -\left(\frac{(z^{j+\frac{1}{2},l})^2\langle n^{j+\frac{1}{2},l}\rangle}{(z^{j,l})^2\,\Delta z}\right) \\
& \times\left\{\langle D_i^{z\ j+\frac{1}{2},l}\rangle\left(\frac{\Delta y_i^{j+\frac{1}{2},l}}{\Delta z}+y_i^{j+\frac{1}{2},l\ \mathbf{interp}}\langle\Psi_i^{j+\frac{1}{2},l}\rangle\right)+\langle K^{z\ j+\frac{1}{2},l}\rangle\left(\frac{\Delta y_i^{j+\frac{1}{2},l}}{\Delta z}\right)\right\} \\
& +\langle n^{j+\frac{1}{2},l}\rangle\langle v^{j+\frac{1}{2},l}\rangle y_i^{j+\frac{1}{2},l\ \mathbf{interp}} \\
& +\left(\frac{(z^{j-\frac{1}{2},l})^2\langle n^{j-\frac{1}{2},l}\rangle}{(z^{j,l})^2\,\Delta z}\right) \\
& \times\left\{\langle D_i^{z\ j-\frac{1}{2},l}\rangle\left(\frac{\Delta y_i^{j-\frac{1}{2},l}}{\Delta z}+y_i^{j-\frac{1}{2},l\ \mathbf{interp}}\langle\Psi_i^{j-\frac{1}{2},l}\rangle\right)+\langle K^{z\ j-\frac{1}{2},l}\rangle\left(\frac{\Delta y_i^{j-\frac{1}{2},l}}{\Delta z}\right)\right\} \\
& -\langle n^{j-\frac{1}{2},l}\rangle\langle v^{j-\frac{1}{2},l}\rangle y_i^{j-\frac{1}{2},l\ \mathbf{interp}} \\
& -\frac{\sin(\theta^{l+\frac{1}{2}})}{z^j\,\Delta\theta\sin\theta^l}\left(\langle D_i^{\theta\ j,l+\frac{1}{2}}\rangle+\langle K^{\theta\ j,l+\frac{1}{2}}\rangle\right)\frac{\Delta n_i^{j,l+\frac{1}{2}}}{z^j\Delta\theta} \\
& +\frac{\sin(\theta^{l+\frac{1}{2}})}{z^j\,\Delta\theta\sin\theta^l}\langle n^{j,l+\frac{1}{2}}\rangle\langle v^{j,l+\frac{1}{2}}\rangle y_i^{j,l+\frac{1}{2}\ \mathbf{interp}} \\
& +\frac{\sin(\theta^{l-\frac{1}{2}})}{z^j\,\Delta\theta\sin\theta^l}\left(\langle D_i^{\theta\ j,l-\frac{1}{2}}\rangle+\langle K^{\theta\ j,l-\frac{1}{2}}\rangle\right)\frac{\Delta n_i^{j,l-\frac{1}{2}}}{z^j\Delta\theta} \\
& -\frac{\sin(\theta^{l-\frac{1}{2}})}{z^j\,\Delta\theta\sin\theta^l}\langle n^{j,l-\frac{1}{2}}\rangle\langle v^{j,l-\frac{1}{2}}\rangle y_i^{j,l-\frac{1}{2}\ \mathbf{interp}}
\end{aligned}
\tag{1.42}
$$

Les quantités $y_i^{j+\frac{1}{2},l\ \mathbf{interp}}$; $y_i^{j-\frac{1}{2},l\ \mathbf{interp}}$; $y_i^{j,l+\frac{1}{2}\ \mathbf{interp}}$; $y_i^{j,l-\frac{1}{2}\ \mathbf{interp}}$ sont des termes advectifs et doivent donc être calculés avec précaution.

Le choix du schéma d'interpolation doit résulter d'un bon compromis entre précision et temps de calcul raisonnable. Bien que les schémas d'ordres élevés soient instables, ils présentent tout de même une meilleure précision que le schéma d'ordre 1, lorsqu'ils sont stabilisés sous certaines conditions (voir annexe A). En revanche, plus l'ordre du schéma est élevé, plus l'interpolation va nécessiter un nombre de variables *upwind* (i.e. en amont du vent incident) important. Le schéma *upwind* d'ordre 1 utilise une seule valeur de fraction molaire en amont du vent, le schéma *upwind* d'ordre 2 nécessite deux valeurs et ainsi de suite pour les ordres plus élevés.
L'utilisation d'interpolation *upwind* d'ordres arbitrairement élevés requiert de prendre quelques précautions (voir la discussion de l'annexe A). En effet, seule l'interpolation *upwind* d'ordre 1 est inconditionnellement stable et ne génère pas d'extréma supplémentaires dans la quantité advectée (Godunov, 1959), bien que ce schéma présente une diffusion numérique relativement forte. Le schéma *upwind* d'ordre 2 a, en revanche, une diffusion

numérique plus faible, mais créé des extremas supplémentaires dans la quantité physique advectée, proches des zones de fort gradient, ceci étant une conséquence du théorème de Godunov (1959).

La montée en ordre du schéma d'advection utilisé va fortement affecter les performances du modèle tout en générant d'autant plus d'extréma dans la quantité advectée que le schéma sera d'ordre élevé. Une solution pour remédier à cela est d'utiliser un schéma hybride, qui combine des schémas d'ordres différents. Ce sont les méthodes de *limiteur de flux*, qui sont largement discutés dans la littérature (voir par exemple les revues très complètes de Waterson and Deconinck (1995, 2007)). Le principe de ces méthodes consiste à utiliser un schéma d'ordre élevé dans les régions du système ou les gradients sont relativement faibles et à se ramener à un schéma d'ordre 1 lorsque les gradients deviennent importants.

Les méthodes de flux peuvent se mettre sous la forme suivante :

$$y_i^{j+\frac{1}{2}\ \mathbf{interp}} = \left(y_i^{j+\frac{1}{2}}\right)^{low} - \Phi^{FL}(r_i^{j+\frac{1}{2}}) \left[\left(y_i^{j+\frac{1}{2}}\right)^{low} - \left(y_i^{j+\frac{1}{2}}\right)^{high}\right] \tag{1.43}$$

où $\left(y_i^{j+\frac{1}{2}}\right)^{low}$ et $\left(y_i^{j+\frac{1}{2}}\right)^{high}$ sont respectivement basées sur un schéma d'ordre 1 et un schéma d'ordre plus élevé. Par ailleurs, $\Phi^{FL}(r_i)$ est la fonction du limiteur de flux et r_i le rapport des gradients successifs de cellules voisines. Ce rapport des gradients sera pris de façon différente suivant le sens du transport advectif.

$$\begin{cases} r_i^{j+\frac{1}{2}} = \dfrac{y_i^j - y_i^{j+1}}{y_i^{j+1} - y_i^{j+2}} & \text{si } \langle \Psi_i^{j+\frac{1}{2}} \rangle > 0 \\ \\ r_i^{j+\frac{1}{2}} = \dfrac{y_i^{j+1} - y_i^j}{y_i^j - y_i^{j-1}} & \text{si } \langle \Psi_i^{j+\frac{1}{2}} \rangle < 0 \end{cases}$$

À l'aide de cette méthode des limiteurs de flux, nous avons couplé un schéma *upwind* d'ordre 1 avec un schéma *upwind* d'ordre 2. Ainsi, en remplaçant les quantités 1.40 et 1.41 dans l'équation 1.43, on obtient :

$$\left(y_i^{j+\frac{1}{2}}\right)^{adv} = y_i^{j+1} - \frac{\Phi^{FL}(r_i^{j+\frac{1}{2}})}{2}\left(y_i^{j+1} - y_i^{j+2}\right) \tag{1.44}$$

Diverses fonctions pour le limiteur de flux ont été proposées dans la littérature et ont été revues et comparées par Waterson and Deconinck (2007). Nous avons testé plusieurs de ces fonctions pour coder à la fois la partie advective de la diffusion moléculaire et le transport advectif vertical et latitudinal. Pour la diffusion moléculaire, nous sommes restés sur le schéma d'interpolation *upwind* d'ordre 1 qui, bien qu'étant diffusif, présente un temps de calcul avantageux. Nous avons préféré augmenter la résolution du modèle

pour limiter la diffusion numérique plutôt qu'utiliser un schéma d'ordre plus élevé avec un limiteur de flux. En revanche, pour la partie advective liée à la présence de vent, deux limiteurs de flux proposés dans la littérature présentent des performances intéressantes ; *OSPRE* et *MUSCL* (Waterson and Deconinck, 2007). Le limiteur de flux *OSPRE* a été finalement préféré à *MUSCL* car sa fonction est continue et dérivable dans l'ensemble du domaine r considéré, critère qu'il est préférable de satisfaire afin d'assurer la stabilité du *solveur* numérique. Ce limiteur de flux s'écrit :

$$\Phi^{FL}(r)^{OSPRE} = \frac{3}{2}\frac{r^2 + r}{r^2 + r + 1} \tag{1.45}$$

Nous allons maintenant présenter le solveur numérique utilisé pour la résolution de l'équation de continuité.

1.4 Résolution de l'équation de continuité

La méthode de résolution d'un ensemble d'équations différentielles est choisie suivant les caractéristiques du problème étudié. Ces méthodes se classent en deux grandes catégories, qui sont basées soit sur des schémas implicites, soit sur des schémas explicites.

1.4.1 Méthode de résolution : schémas explicites et implicites

Considérons un problème de la forme :

$$\dot{y}_i(t) = f_i(t) \tag{1.46}$$

où $i = [1; N]$, et N est le nombre d'équations différentielles du problème.

Schémas explicites

Les schémas de résolution d'équations différentielles dits explicites peuvent se mettre sous la forme suivante :

$$\frac{\Delta y_i}{\Delta t} = f_i(t) \tag{1.47}$$

La fonction f utilisée pour résoudre ce système est évaluée en t afin d'obtenir les solutions en $t + \Delta t$. Bien que relativement simple à implémenter, ces méthodes souffrent d'un manque de précision. En effet, le pas de temps doit être fortement réduit afin d'accroitre la précision de la méthode.

Schémas implicites

Les schémas de implicites s'expriment sous la forme suivante :

$$\frac{\Delta y_i}{\Delta t} = \theta f_i(t + \Delta t) + (1 - \theta) f_i(t) \tag{1.48}$$

où θ = facteur d'implicité de la méthode

En fonction du facteur d'implicité de la méthode, les valeurs de la fonction en t et $t + \Delta t$ sont utilisée pour la résolution. Ces valeurs sont estimées à l'aide de schémas de résolution plus simples. Lorsque $\theta = 1$ la méthode est purement implicite. Inversement lorsque $\theta = 0$, on retrouve une méthode explicite. Notons au passage l'existence de solution semi-implicite, *i.e.* lorsque $\theta \in]0; 1[$. Par exemple, à $\theta = 0,5$ correspond la méthode de $Crank - Nicholson$.

L'équation de continuité 1.30 se résout généralement à l'aide de méthodes implicites. En effet, l'importance des divers termes de droite de cette équation peut différer de plusieurs ordres de grandeurs. Dans ce cas, le système d'équation est dit raide (*stiff*). Seules quelques méthodes numériques sont adaptées à la résolution de ce type de problème. Par exemple, les méthodes de *Adams* (Adams-Moultonn, Adams-Bashforth), qui sont pourtant basées sur des schémas de résolution implicite, échouent lors de la résolution de problèmes trop raides (Hindmarsh, 1983). En revanche, la méthode BDF (*Backward Differentiation Formula*), initialement implémentée par Gear (1971), est une méthode à pas multiples adaptée à la résolution de ce type de problème. De multiples *solveurs*, basés sur cette méthode de résolution existent (*DLSODE* et *DLSODES* (Hindmarsh, 1983), *VODE* (Brown et al., 1989), *VODPK* (Byrne and Hindmarsh, 1999)) et ont des usages variés. J'ai choisi d'utiliser le solveur *DLSODES* car il présente de meilleures performances dans le cadre de résolution de cinétique chimique (Nejad, 2005). Celui-ci exploite en effet la dispersion (*sparsity*) des éléments non-nuls de la matrice jacobienne du problème et permet ainsi une optimisation du temps de calcul.

Voyons brièvement le principe de fonctionnement d'une telle méthode.

Méthodes BDF

La solution de l'équation 1.46 par la méthode BDF d'ordre arbitraire q peut se mettre sous la forme suivante :

$$y_i(t + \Delta t) = \sum_{m=0}^{q} \alpha_m y_i(t - m \cdot \Delta t) + dt\, \beta_0 \dot{y}_i(t + \Delta t) \tag{1.49}$$

$$= a_i(t) + \Delta t\, \beta_0 f_i\left(t + \Delta t, y_i(t + \Delta t)\right) \tag{1.50}$$

où q = ordre de la méthode, ici : $0 \leq q \leq 5$

Les coefficients α_m et β_0 sont des facteurs numériques choisis en fonction de l'ordre q de la méthode BDF souhaitée. Par exemple, pour l'ordre $q = 0$, l'équation 1.49 s'écrit :

$$y_i(t + \Delta t) = \alpha_0 y_i(t) + dt\, \beta_0 \dot{y}_i(t + \Delta t) \tag{1.51}$$

On retrouve dans ce cas-ci la méthode d'Euler d'implicite, avec $\alpha_0 = 1$ et $\beta_0 = 1$.

La résolution de l'équation 1.46 s'effectue à l'aide d'une méthode de type Newton-Raphson modifiée, qui permet d'obtenir les zéros d'une fonction quelconque de façon itérative connaissant sa dérivée. Selon cette méthode, la solution $y_i(t + \Delta t)^{(k+1)}$ à la $(k + 1)^{\text{ème}}$ itération est alors :

$$y_i^{k+1}(t + \Delta t) = y_i^k(t + \Delta t) - \frac{y_i^k(t + \Delta t) - a_i(t) - \Delta t\, \beta_0 f_i\left(t + \Delta t, y_i^k(t + \Delta t)\right)}{P} \tag{1.52}$$

où $P = \mathbf{I} - \Delta t\, \beta_0 J$

$\mathbf{I}$ = matrice unité de dimension $N \times N$

$J = \dfrac{\partial f}{\partial y}$ = matrice Jacobienne N×N du système

La matrice P s'obtient par :

$$P = \frac{\partial}{\partial y_i(t + \Delta t)} \left[y_i(t + \Delta t) - a_i(t) - \Delta t\, \beta_0 f_i\left(t + \Delta t, y_i(t + \Delta t)\right) \right] \tag{1.53}$$

En pratique, une première estimation $y_i^0(t + \Delta t)$ est initialement donnée à l'aide d'une méthode de résolution basée sur un schéma explicite. La matrice jacobienne est alors évaluée uniquement en ce point et sera prise constante durant les *k+1* itérations vers la solution au point $t + \Delta t$. Dans le cas de non-convergence du solveur, J est réévaluée au point considéré, produisant un message d'avertissement. Une fois que la méthode a atteint le point $t + \Delta t$, la méthode produit une estimation de $y_i^0(t + 2\,\Delta t)$, la matrice jacobienne est évaluée en ce point et l'itération continue de cette façon. Enfin, une décomposition LU de la matrice P est utilisée afin de résoudre ce système de N équations.

1.4.2 Écriture du Jacobien

Nous devons donc résoudre l'équation de continuité pour chaque composé i, à chaque altitude j et chaque latitude l. L'équation de continuité exprimée en fraction molaire se présente sous la forme suivante :

$$\frac{\partial y_i^{j,l}}{\partial t} = \frac{1}{n^{j,l}} \left(P_i^{j,l} - n^{j,l} y_i^{j,l} L_i^{j,l} - div\, \mathbf{\Phi}_i^{j,l} \right) \tag{1.54}$$

On pose alors :

$$f_i^{j,l} = \frac{1}{n^{j,l}} \left(P_i^{j,l} - n^{j,l} y_i^{j,l} L_i^{j,l} - div\, \mathbf{\Phi}_i^{j,l} \right) \tag{1.55}$$

On définit le vecteur $\mathbf{Y}$ qui comporte les valeurs des $y_i^{j,l}$ pour chaque composé ($i \in [1, n_c]$), chaque altitude ($j \in [1, n_Z]$) et chaque latitude ($l \in [1, n_\theta]$). Ce vecteur est de dimension $N = n_c \times n_\theta \times n_Z$

$$\mathbf{Y} = \{y_1^{n_Z,1}, y_2^{n_Z,1}, ..., y_{n_c}^{n_Z,1}, y_1^{n_Z,2}, ..., ..., y_{n_c}^{n_Z,n_\theta}, y_1^{n_Z-1,1}, ..., ..., y_{n_c}^{1,n_\theta}\} \tag{1.56}$$
$$\mathbf{Y} = \{Y_1, Y_2, ..., Y_N\} \tag{1.57}$$

De même, on définit $\mathbf{F}$, vecteur de dimension N contenant les $f_i^{j,l}$:

$$\mathbf{F} = \{F_1^{n_Z,1}, f_2^{n_Z,1}, ..., f_{n_c}^{n_Z,1}, f_1^{n_Z,2}, ..., ..., f_{n_c}^{n_Z,n_\theta}, f_1^{n_Z-1,1}, ..., f_{n_c}^{1,n_\theta}\} \tag{1.58}$$
$$\mathbf{F} = \{F_1, F_2, ..., F_N\} \tag{1.59}$$

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial Y_1} & \cdots & \frac{\partial F_1}{\partial Y_N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_N}{\partial Y_1} & \cdots & \frac{\partial F_N}{\partial Y_N} \end{pmatrix} \tag{1.60}$$

L'écriture de la matrice jacobienne est un exercice fastidieux dont nous épargnerons les détails au lecteur. En effet, bien que l'écriture du jacobien chimique ne pose pas de problème particulier, l'écriture du jacobien dynamique nécessite plus d'attention, de part la présence des termes advectifs contenus dans la divergence du flux de l'équation 1.1. Calculer cette matrice revient à calculer les dérivées partielles du terme div $\mathbf{\Phi}_i^{j,l}$ en fonction des fractions molaires. Comme la valeur de cette divergence est conditionnée par le signe de la fonction $\langle \Psi_i^{j+\frac{1}{2},l} \rangle$, de la direction des vents verticaux et latitudinaux ainsi que du type d'interpolation utilisé, les éléments non-nuls du jacobien comprenant seulement la partie transport verticale seront les suivants :

$$\frac{\mathrm{d}(\mathrm{div}\,\mathbf{\Phi}_i^{j,l})}{\mathrm{d}y_i^{j-2,l}}, \frac{\mathrm{d}(\mathrm{div}\,\mathbf{\Phi}_i^{j,l})}{\mathrm{d}y_i^{j-1,l}}, \frac{\mathrm{d}(\mathrm{div}\,\mathbf{\Phi}_i^{j,l})}{\mathrm{d}y_i^{j,l}}, \frac{\mathrm{d}(\mathrm{div}\,\mathbf{\Phi}_i^{j,l})}{\mathrm{d}y_i^{j+1,l}}, \frac{\mathrm{d}(\mathrm{div}\,\mathbf{\Phi}_i^{j,l})}{\mathrm{d}y_i^{j+2,l}}$$

De même, les éléments non-nuls du jacobien qui comprennent uniquement les termes du transport latitudinal seront les suivants :

$$\frac{\mathrm{d}(\mathrm{div}\,\mathbf{\Phi}_i^{j,l})}{\mathrm{d}y_i^{j,l-2}}, \frac{\mathrm{d}(\mathrm{div}\,\mathbf{\Phi}_i^{j,l})}{\mathrm{d}y_i^{j,l-1}}, \frac{\mathrm{d}(\mathrm{div}\,\mathbf{\Phi}_i^{j,l})}{\mathrm{d}y_i^{j,l}}, \frac{\mathrm{d}(\mathrm{div}\,\mathbf{\Phi}_i^{j,l})}{\mathrm{d}y_i^{j,l+1}}, \frac{\mathrm{d}(\mathrm{div}\,\mathbf{\Phi}_i^{j,l})}{\mathrm{d}y_i^{j,l+21}}$$

Encore une fois, suivant le signe de la fonction $\langle \Psi_i^{j\pm\frac{1}{2},l} \rangle$, ainsi que de la direction des vents verticaux et latitudinaux, les dérivées partielles de la divergence par rapport aux fractions molaires *downwind* seront nulles.

1.4.3 Conditions aux limites inférieures

Les conditions aux limites du modèle vont permettre de simuler la présence de composés chimiques dans la troposphère profonde qui interagissent avec la stratosphère.
Au niveau des conditions aux limites inférieures du modèle, dans la basse atmosphère, deux cas seront considérés :

Lorsque l'abondance au niveau inférieur du composé i est non-nulle : $y_i^{lim} \neq 0$

Le flux vertical de matière à la première interface ($j = \frac{1}{2}$) ne va pas s'écrire de la même façon suivant le signe de $\Psi_i^{\frac{1}{2},l}$. La définition de cette fonction diffère de la définition de l'équation 1.37. Elle s'écrit en effet maintenant de la façon suivante :

$$\Psi_i^{\frac{1}{2},l} = \frac{1}{H_i^{1,l}} - \frac{1}{H_a^{1,l}} \tag{1.61}$$

Il vient alors que, si $\Psi_i^{\frac{1}{2},l} > 0$, le flux vertical de matière à la première interface ($j = \frac{1}{2}$) s'écrit :

$$\begin{aligned}\Phi_i^{z\ \frac{1}{2},l} = -\langle n^{\frac{1}{2},l} \rangle \left\{ D_i^{z\ 1,l} \left(\frac{\Delta y_i^{\frac{1}{2},l}}{\Delta z} + y_i^{1,l}\, \Psi_i^{1,l} \right) + K^{z\ 1,l} \left(\frac{\Delta y_i^{\frac{1}{2},l}}{\Delta z} \right) \right\} \\ + v^{z\ \frac{1}{2},l} n_i^{\frac{1}{2},l}\end{aligned} \tag{1.62}$$

Enfin, si $\Psi_i^{\frac{1}{2},l} < 0$:

$$\Phi_i^{z\ \frac{1}{2},l} = -\langle n^{\frac{1}{2},l} \rangle \left\{ D_i^{z\ 1,l} \left(\frac{\Delta y_i^{\frac{1}{2},l}}{\Delta z} + y_i^{lim}\ \Psi_i^{\frac{1}{2},l} \right) + K^{z\ 1,l} \left(\frac{\Delta y_i^{\frac{1}{2},l}}{\Delta z} \right) \right\} + v^{z\ \frac{1}{2},l} n_i^{\frac{1}{2},l} \tag{1.63}$$

Où $\dfrac{\Delta y_i^{\frac{1}{2},l}}{\Delta z} = \dfrac{y_i^{\frac{1}{2},l} - y_i^{lim}}{\Delta z}$

Notons par ailleurs la précaution à apporter lors du calcul du jacobien qui va différer suivant le signe de $\Psi_i^{\frac{1}{2},l}$.

Lorsque l'abondance au niveau inférieur du composé i est nulle : $y_i^{lim} = 0$

Le composé atmosphérique i diffuse à la vitesse terminale, vitesse maximale de diffusion vers le bas, v_i^{lim}. Le flux de matière à la première interface s'écrit alors :

$$\Phi_i^{z\ \frac{1}{2},l} = -\langle n^{\frac{1}{2},l} \rangle v_i^{lim} + v^{z\ \frac{1}{2},l} n_i^{\frac{1}{2},l} \tag{1.64}$$

$$= -\langle n_i^{\frac{1}{2},l} \rangle \frac{K^{z\ 1,l}}{H_a^{1,l}} + v^{z\ \frac{1}{2},l} n_i^{\frac{1}{2},l} \tag{1.65}$$

où v_{lim} = vitesse maximale de diffusion du composé i vers le bas [$\mathrm{cm\,s^{-1}}$]
$= K^{z\ 1,l}/H_a^{1,l}$

Le tableau 1.1 représente les valeurs des abondances y_i^{lim} supposées à la limite inférieure du modèle pour les planètes géantes, mises à jour de Cavalié (2008).

1.4.4 Conditions aux limites supérieures

Le modèle photochimique simule l'évolution des espèces chimiques au delà de l'homopause du méthane où les composés chimiques subissent la séparation diffusive. La grande majorité des espèces chimiques modélisées sont trop lourdes pour s'échapper et seules les espèces légères (H, H_2, He) sont présentes à plusieurs hauteurs d'échelle au-dessus de l'homopause. Par conséquent, nous avons supposé un flux nul à la limite supérieure du modèle pour l'ensemble des espèces chimiques à quelques exceptions près.
Tout d'abord notre modèle s'arrête à quelques hauteurs d'échelles au dessus de l'homopause, il ne permet donc pas de simuler l'ensemble des processus physiques se produisant dans l'ionosphère. En effet, l'hydrogène moléculaire qui diffuse dans l'ionosphère des

Planète	Jupiter	Saturne	Uranus	Neptune
$y(H_2)^*$	0,8622	0,8771	0,808	0,77
y(He)	$0{,}1359^a$	$0{,}1184^b$	$0{,}152^c$	$0{,}19^d$
$y(CH_4)$	$0{,}00181^e$	$0{,}00447^f$	$0{,}04^{g\,**}$	$0{,}04^{h\,**}$

[a]von Zahn et al. (1998) ; [b]Conrath and Gautier (2000)
[c]Conrath et al. (1987) ; [d]Conrath et al. (1991)
[e]Niemann et al. (1998) ; [f]Fletcher et al. (2009)
[g]Sromovsky et al. (2014) ; [h]Karkoschka and Tomasko (2011)
* En supposant $y(H_2) + y(He) + y(CH_4) = 1$
** Valeur seulement valide pour les faibles latitudes ($< 30°$)

Table 1.1 – Abondances troposphériques mesurées de H_2, He et CH_4 dans les planètes géantes.

planètes géantes va interagir avec les radiations EUV ainsi qu'avec les électrons ionosphériques pour finalement produire de l'hydrogène atomique (Strobel, 1973; Waite et al., 1983).
Par ailleurs, l'interaction de la planète considérée avec son environnement (anneaux, satellites, poussières interplanétaires (IDP), ou encore chute de comète) peut causer l'apport ponctuel ou constant de matière. Nous reviendrons dans une partie ultérieure sur ce dernier point.

L'implémentation d'un flux à la limite supérieure se fait simplement de la façon suivante :

$$\Phi_i^{z\ n_z+\frac{1}{2},l} = \Phi_i^{lim} + v^{z\ n_z+\frac{1}{2},l} n_i^{n_z+\frac{1}{2},l} \tag{1.66}$$

où $v^{z\ n_z+\frac{1}{2},l}$ est la vitesse du vent vertical à l'interface supérieure du modèle (à $n_z + \frac{1}{2}$).

Nous allons maintenant présenter comment la cinétique chimique est prise en compte via la définition d'un profil de température.

1.4.5 Discrétisation de l'atmosphère en altitude et latitude

La structure thermique de l'atmosphère telle qu'elle est considérée dans le cadre du modèle photochimique est supposée stationnaire. Celle-ci est déterminée par les observations. Les occultations stellaires dans l'UV permettent de connaitre le profil thermique dans la haute stratosphère (voir par exemple Festou et al. (1981); Atreya et al. (1981); Smith et al. (1983)), les occultations radio, en revanche, permettent de contraindre le

profil de température dans la basse stratosphère, à proximité de la tropopause (e.g. Tyler et al. (1982); Lindal et al. (1985)). Les occultations stellaires peuvent aussi contraindre la stratosphère moyenne, à des pressions de l'ordre de 10^{-3} mbar jusqu'à environ 10^{-2} mbar (e.g. Hubbard et al. (1995, 1997)). Finalement, les observations de la bande ν_4 du méthane (bande centrée autour de 1300 cm^{-1}) permettent de contraindre les observations dans la moyenne stratosphère, à des pressions de l'ordre du mbar (e.g. Gillett et al. (1969); Tokunaga et al. (1978); Orton et al. (1991); Greathouse et al. (2005)).
L'ensemble de ces observations permettent, par construction, de fournir une information sur la structure thermique, depuis la troposphère jusqu'à la haute stratosphère. Les profils thermiques moyens des planètes géantes sont présentés sur la figure 1.4. La partie modélisée par les modèles photochimiques s'étend depuis la haute troposphère (à des pressions de l'ordre de la centaine de mbar) jusqu'au-delà de l'homopause.

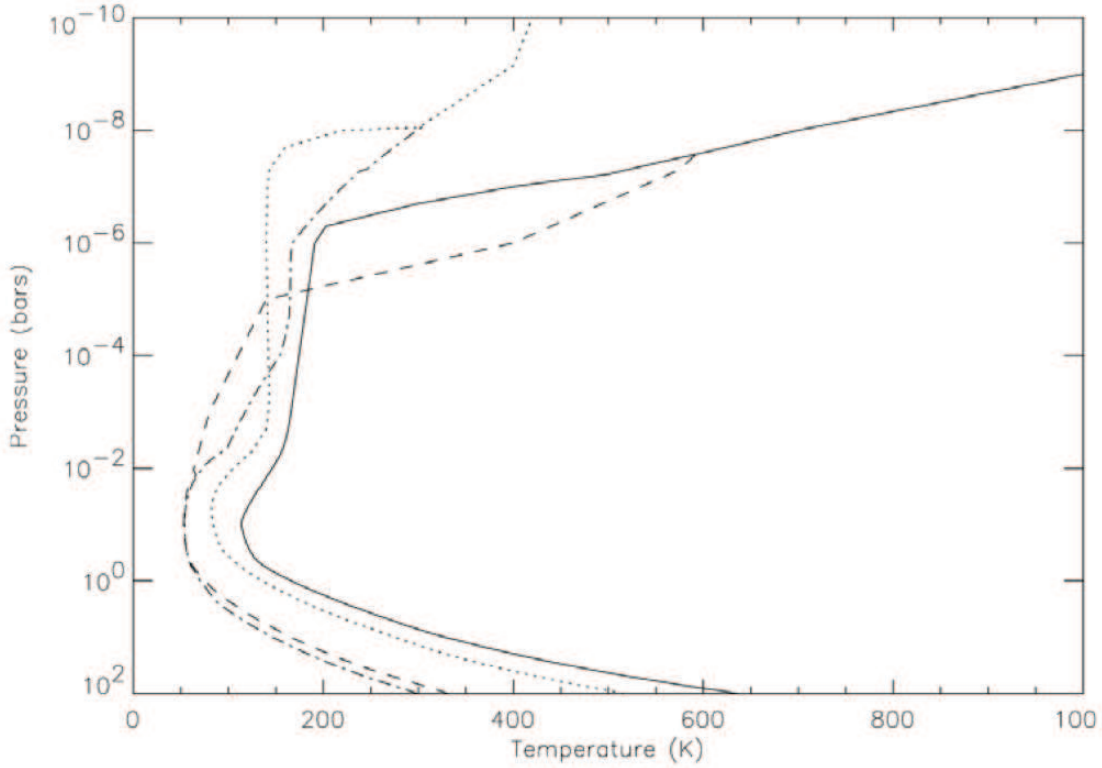

Figure 1.4 – Profils équatoriaux de température des planètes géantes en fonction de la pression en bar. Jupiter, trait plein ; Saturn, pointillés ; Uranus, tirets ; Neptune, pointillés-tirets. D'après Irwin (2009).

Les atmosphères modélisées sont supposées à l'équilibre hydrostatique, définit par :

$$\frac{\partial P(z)}{\partial z} = -\rho(z)g(z) \tag{1.67}$$

où $P(z)$ = pression à l'altitude z [barye]
$\rho(z)$ = masse volumique du fluide [$\mathrm{g\,cm^{-3}}$]
$g(z)$ = accélération de la pesanteur à l'altitude z [$\mathrm{cm\,s^{-2}}$]

En supposant que l'atmosphère peut être considérée comme un gaz parfait, l'équation 1.67 s'écrit alors :

$$\frac{\partial P(z)}{P(z)} = - \frac{\partial z}{H(z)} \tag{1.68}$$

où $H(z)$ = hauteur d'échelle de l'atmosphère [cm]

Ainsi, partant d'une valeur de pression de référence (le niveau $z = 0$, à $P = 1\,\mathrm{bar}$ par exemple), on peut reconstruire la grille en altitude de l'atmosphère à l'aide de l'équation 1.68 en calculant l'épaisseur Δz entre deux niveaux successifs. Celle-ci s'écrit :

$$\Delta z = - H(\theta, z)\, \ln\left(\frac{P(z+\Delta z)}{P(z)}\right) \tag{1.69}$$

Par ailleurs, le modèle présenté ici prend en compte un champ de température variable avec la latitude. L'équation 1.69 s'écrit alors :

$$\Delta z = - \frac{k_b T(\theta, z)}{M(z) g(\theta, z)}\, \ln\left(\frac{P(\theta, z+\Delta z)}{P(\theta, z)}\right) \tag{1.70}$$

où $M(z)$ = masse molaire moyenne à l'altitude z [cm]
$g(\theta, z)$ = accélération de la pesanteur à la latitude θ et l'altitude z [$\mathrm{cm\,s^{-2}}$]

Par conséquent, l'utilisation d'un champ de température spatiallement non-uniforme va conduire à autant de grilles en altitude-pression différentes qu'il y a de profils de température différents. Notons que, dans l'équation 1.70, la quantité M ne varie pas en fonction de la latitude [2], alors que la gravité g et la température varient en fonction de l'altitude et de la latitude. En effet, nous avons considéré que les abondances relatives des composés majoritaires (H_2, He, CH_4) sont uniformes en fonction de la latitude et que seule la dépendance altitudinale de cette quantité est pertinente. En revanche, la variation méridionale

2. notons que cette hypothèse peut s'avérer inexacte pour les géantes glacées où l'abondance de méthane est importante et sujette à la condensation

de la gravité est à prendre en compte et nous avons adopté la formulation de Guerlet et al. (2014). Celle-ci étant :

$$g_0(\theta) = \bar{g}\left[1 - \frac{2}{3}f + \frac{3}{4}J_2 - \left(2f - \frac{15}{4}J_2\right)\cos(2\theta)\right] \tag{1.71}$$

où f = aplatissement de la planète considérée
J_2 = moment de gravité du second ordre
$\bar{g}$ = gravité moyenne [$\mathrm{cm\,s^{-2}}$]
θ = latitude considérée [degré]

La gravité moyenne $\bar{g}$ est :

$$\bar{g} = \frac{GM}{\bar{R}^2} \tag{1.72}$$

où M = masse de la planète [g]
$\bar{R}$ = rayon moyen de la planète, tiré de Guillot (2005) [cm]

Enfin, la variation verticale de la gravité est prise en compte comme :

$$g(\theta, z) = g_0(\theta)\ \left(\frac{\bar{R}}{\bar{R} + z}\right)^2 \tag{1.73}$$

1.5 Transfert radiatif

Les stratosphères des planètes géantes sont globalement très froides comme l'indique la figure 1.4. Typiquement, les températures stratosphériques moyennes de Jupiter, Saturne, Uranus et Neptune sont 163 K, 135 K, 87,5 K, 107,5 K, respectivement. Dans ces conditions physiques, la cinétique chimique serait très lente en l'absence d'apport d'énergie externe au système. Cet apport est dû aux radiations solaires et à la précipitation de particules énergétiques dans la haute atmosphère. Il déséquilibre le système en dissociant certaines molécules et en produisant des radicaux chimiques. Ces radicaux sont très réactifs, même aux basses températures des stratosphères des planètes géantes. Nous considérerons ici seulement les réactions de photodissociation, dues aux radiations solaires, qui vont du domaine visible jusqu'aux UV. Nous calculerons les coefficients de photodissociation à l'aide

de l'équation 1.12. Afin de calculer ces coefficients, il est nécessaire de déterminer précisément l'atténuation du flux solaire en fonction (caractérisée par la quantité $F(\lambda, z)$ dans l'équation 1.12) de la longueur d'onde, de l'altitude et de la latitude dans l'atmosphère considérée.

Afin de calculer ces coefficients, nous reviendrons dans un premier temps sur des généralités qui concernent les calculs de transfert radiatif. Nous rappellerons les processus physiques d'interaction rayonnement-matière considérés ici. Enfin, nous verrons plusieurs méthodes utilisées dans cette thèse afin de calculer le flux actinique.

1.5.1 Généralités

L'atténuation du flux solaire monochromatique incident $F(\lambda, z)$ suit une loi de Beer-Lambert. La variation de ce flux le long d'un trajet optique quelconque dl s'écrit donc :

$$\frac{\mathrm{d}F(\lambda, z)}{\mathrm{d}l} = -k(\lambda, z)\, F(\lambda, z) \tag{1.74}$$

où $F(\lambda, z)$ = flux solaire monochromatique [photons $\mathrm{cm}^{-2}\,\mathrm{s}^{-1}\,\mathrm{m}^{-1}$]
$k(\lambda, z)$ = coefficient d'absorption [cm^{-1}]

Ce coefficient s'exprime comme la somme des coefficients d'absorption individuels de chaque composé atmosphérique i, soit :

$$\begin{aligned} k(\lambda) &= \sum_i k_i(\lambda) \\ k(\lambda) &= \sum_i \sigma_i(\lambda)\, n_i \end{aligned} \tag{1.75}$$

où $\sigma_i(\lambda)$ = section efficace d'absorption du composé i [cm^2]
n_i = concentration du composé i ($n_i = y_i.n$) [cm^{-3}]

En intégrant l'équation 1.74, le flux solaire, en pénétrant dans l'atmosphère suit la loi suivante :

$$F(\lambda, l) = F_0(\lambda) \exp\left(-\tau(\lambda, l)\right) \tag{1.76}$$

où $\tau(\lambda, l)$ = profondeur optique
$F_0(\lambda)$ = flux solaire en haut de l'atmosphère [$\mathrm{cm^{-2}\,s^{-1}\,cm^{-1}}$]

La profondeur optique τ résulte de l'intégration sur le trajet optique du coefficient d'absorption. Cette grandeur sans unité représente la probabilité qu'il se produise une interaction, à une longueur d'onde donnée, entre un composé atmosphérique et un photon de cette longueur d'onde le long du trajet optique considéré. Elle s'écrit :

$$\tau(\lambda, l) = \sum_i \int_l^\infty \sigma_i(\lambda) n_i(l') dl' \tag{1.77}$$

La partie exponentielle de l'équation 1.76 représente concrètement la fraction du flux solaire ayant réussi à atteindre le niveau d'altitude considéré. On appelle ce terme le facteur d'augmentation :

$$\exp\left(-\tau(\lambda, l)\right) = \frac{F(\lambda, l)}{F_0(\lambda)} \tag{1.78}$$

Une atmosphère est dite opaque au rayonnement lorsque l'épaisseur optique $\tau(\lambda, l) \geq 1$, ce qui correspond à une atténuation du rayonnement incident d'un facteur $\sim 2{,}7$.

1.5.2 Interaction rayonnement - matière

Dans le domaine spectral considéré, l'atténuation du rayonnement solaire lors de sa propagation dans l'atmosphère comprend principalement deux phénomènes bien distincts :
- l'absorption du rayonnement par les composés atmosphériques
- la diffusion Rayleigh

Intéressons nous dans un premier temps à l'absorption du rayonnement par les composés.

Absorption

L'absorption d'un photon par un composé se produit lorsque l'énergie de ce photon est telle qu'il permet au composé d'effectuer une transition entre deux de ses niveaux discrets d'énergie, qu'ils soient électroniques, vibrationnels ou rotationnels. Plus l'écart en énergie entre ces niveaux est grand et plus la longueur d'onde du photon sera courte. Nous considérerons seulement les processus d'absorption menant à la photodissociation

des molécules. Pour certains composés, plusieurs voies de photodissociations sont possibles. La figure 1.5 présente l'évolution de la section efficace d'absorption du méthane en fonction de la longueur d'onde ainsi que l'évolution de l'importance des différentes voies de photodissociations. De 100 nm à 117 nm, le méthane est principalement photodissocié via la réaction suivante :

$$CH_4 + h\nu \longrightarrow {}^3CH_2 + 2H$$

De 120 nm à 150 nm, les deux réactions suivantes sont les voies majoritaires de photodissociation :

$$CH_4 + h\nu \longrightarrow {}^1CH_2 + H_2$$
$$CH_4 + h\nu \longrightarrow CH_3 + H$$

Enfin, entre 117 nm et 120 nm, les trois voies citées précédemment sont les principales voies de photodissociation.

Comme l'indique l'équation 1.12, les taux de photodissociation seront modulés en fonction du flux solaire incident. La figure 1.6 montre que celui-ci n'est pas constant sur l'intervalle considéré dans le cas du méthane, de 100 nm à 150 nm, qui se trouve dans la partie de Wien du spectre solaire.

Diffusion

Nous avons aussi considéré les processus de diffusion de la lumière par les composés atmosphériques. Nous nous sommes restreints à des processus de diffusion élastique seulement. En effet, d'après les travaux de Sromovsky (2005), la diffusion inélastique Raman reste toujours plus faible que la diffusion Rayleigh.

• Cas général de la diffusion

Revenons tout d'abord à l'équation 1.74 et considérons un cas purement diffusif. Le nombre de diffusions de photons par unité de temps provoquées par un élément de surface diffuseur $d\sigma$ (voir les notations correspondantes en figure 1.7) s'écrit :

$$k^{\text{diff}}(\lambda, z)\, F(\lambda, z)\, \cos\vartheta\, \mathrm{d}s\, \mathrm{d}\sigma\, \mathrm{d}\Omega\, \mathrm{d}\lambda \tag{1.79}$$

On notera l'élément de volume diffuseur comme :

$$\mathrm{d}v = \cos\vartheta\, \mathrm{d}s\, \mathrm{d}\sigma \tag{1.80}$$

Ainsi que l'élément d'angle solide (voir notations figure 1.8) :

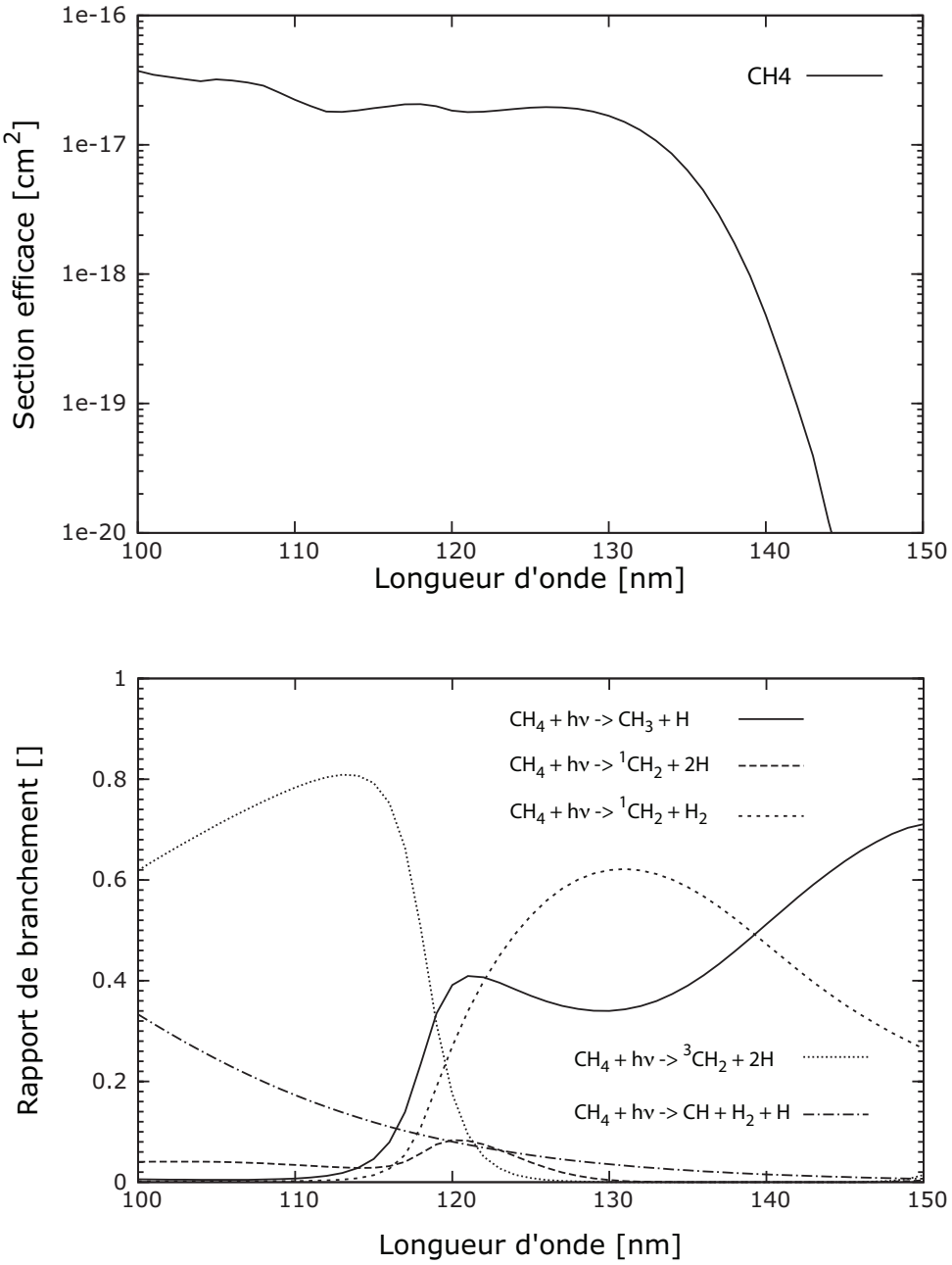

Figure 1.5 – En haut : évolution de la section efficace du coefficient d'absorption du méthane en fonction de la longueur d'onde, de 100 nm à 150 nm (Chen and Wu, 2004). **En bas :** évolution des rapports de branchement entre les différentes voies de photodissociations sur la gamme de longueur d'onde considérée (Loison et al., 2015).

$$\mathrm{d}\Omega = \sin\theta \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\Phi \tag{1.81}$$

La somme des photons diffusés dans tout l'espace peut être estimée en intégrant l'équation

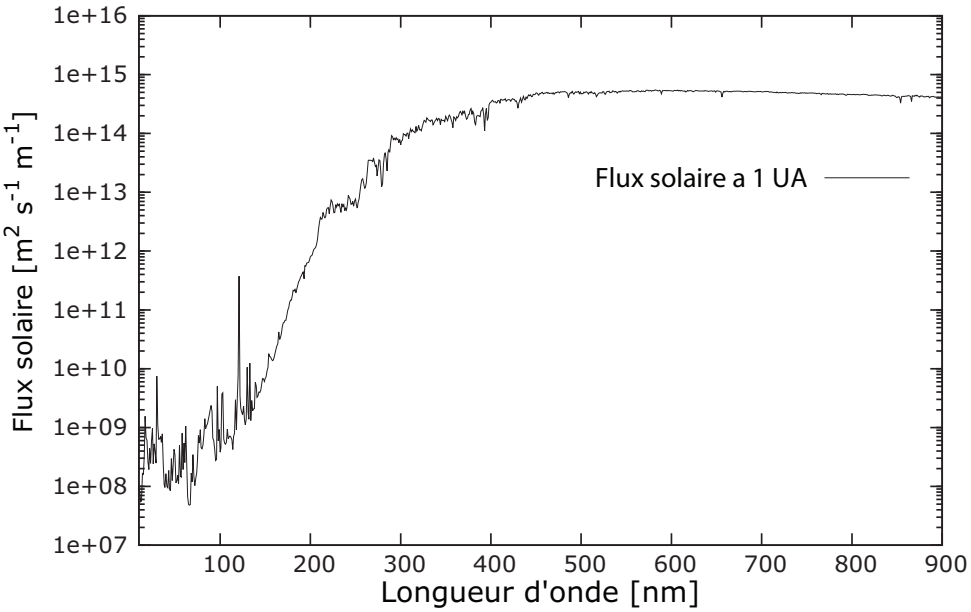

Figure 1.6 – Flux solaire mesuré à 1 ua en fonction de la longueur d'onde (Thuillier et al., 2004).

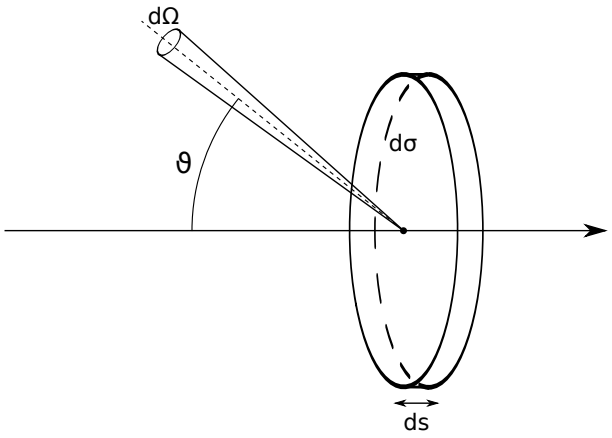

Figure 1.7 – Notations utilisées pour caractériser l'élément diffuseur.

1.79 sur tout l'angle solide $\mathrm{d}\Omega$. La distribution spatiale des photons diffusés dépend des caractéristiques des éléments diffuseurs. Le nombre de photons diffusés dans une direction repérée par les angles (θ, Φ) s'exprimer comme :

$$k^{\mathrm{diff}}(\lambda, z)\, F(\lambda, z)\, \mathrm{d}v\, \mathrm{d}\lambda\, \mathrm{d}\Omega\, p(\theta, \Phi) \frac{\mathrm{d}\omega}{4\pi} \tag{1.82}$$

où $p(\theta, \Phi)$ = fonction de phase de la diffusion considérée

$d\omega = \sin\theta\, \mathrm{d}\theta\, \mathrm{d}\Phi$ = angle solide de diffusion

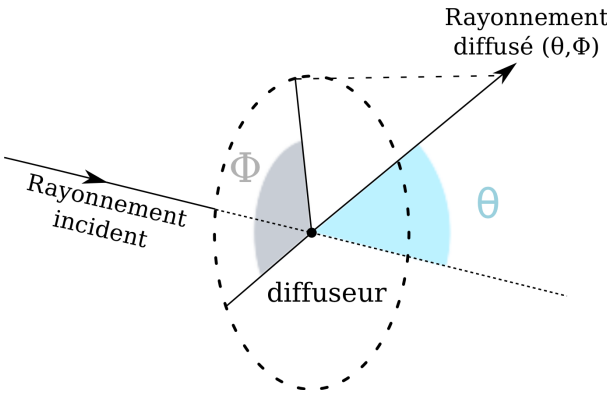

Figure 1.8 – Notations utilisées pour le traitement de la diffusion.

La fonction de phase est définie comme :

$$\int p(\theta, \Phi) \frac{d\omega}{4\pi} = 1 \tag{1.83}$$

Notons que cette quantité est égale à l'albédo de diffusion simple (*single scattering albedo*) lorsque l'on tient compte des propriétés absorbantes de l'élément diffuseur (Chandrasekhar, 2013). Dans le cas où la fonction de phase n'a pas de dépendance angulaire, la diffusion se fera de façon isotrope, lambertienne.

En fonction de la taille et de la structure des éléments diffuseurs, la fonction de phase prend des formes bien particulières. Dans le cas où les éléments diffuseurs ont une taille du même ordre de grandeur ou plus grande que la longueur d'onde des radiations considérées, cette fonction de phase est donnée par la théorie de Mie. C'est le cas des aérosols. Ayant peu de contraintes sur les propriétés physiques ainsi que sur la distribution spatiale de ces aérosols dans les planètes géantes et notamment, nous ne les prendrons pas en compte dans nos calculs. Si la taille des éléments diffuseurs est inférieure à la longueur d'onde des radiations incidentes, cette fonction suit la loi de la diffusion Rayleigh. Nous considérerons uniquement ce dernier type de diffusion.

- **Application à la diffusion Rayleigh**

Nous nous plaçons dans le cas où la taille des diffuseurs est très petite devant la longueur d'onde du rayonnement, ce qui est typiquement le cas pour les composés atmosphériques moléculaires simples vis-à-vis du rayonnement UV ou visible. D'après les travaux originaux de Rayleigh (1918), puis de Cabannes and Rocard (1929), la section efficace de diffusion Rayleigh par un composé atmosphérique s'exprime sous la forme :

$$\sigma^{\text{diff}} = \frac{8\pi^3}{3} \frac{(n'^2 - 1)^2}{\lambda^4 n^2} \frac{6 + 3\delta}{6 - 7\delta} \tag{1.84}$$

$$= \frac{8\pi^3}{3} \frac{16\pi^2 \alpha_p^2}{\lambda^4} \frac{6 + 3\delta}{6 - 7\delta} \tag{1.85}$$

où n' = indice de réfraction du milieu
n = concentration du milieu [cm^{-3}]
δ = facteur de dépolarisation
α_p = polarisabilité de la molécule considérée [cm^3]

Le facteur de dépolarisation prend en compte l'éventuelle anisotropie des molécules. Les atmosphères des géantes étant dominées par un mélange H_2/He, nous ne considérerons que la diffusion Rayleigh provoquée par ces deux molécules. Le tableau 1.2 présente les facteurs de dépolarisation ainsi que la polarisabilité des composés majoritaires considérés, tirés de Allen and Cox (2000).

Composé	Facteur de dépolarisation	Polarisabilité (10^{-25}) [cm^3]
H_2	0,02	8,2
He	0	2,1

Table 1.2 – Tableau représentant les facteurs de dépolarisation des constituants majoritaires considérés dans le modèle photochimique (Allen and Cox, 2000).

La fonction de phase dans le cas de la diffusion Rayleigh prend la forme suivante :

$$p^{Rayleigh}(\theta, \phi) = \frac{3}{4}\left(1 + \cos^2\theta\right) \tag{1.86}$$

La figure 1.9 présente la fonction de phase de la diffusion Rayleigh pour un rayonnement incident non-polarisé. Celle-ci est invariante par rotation autour de l'axe du faisceau incident (invariance en Φ, d'après les notations de la figure 1.8) et symétrique par rapport au plan transverse du vecteur d'onde de propagation $\mathbf{k}$ du faisceau incident.

Une fois que les coefficients d'absorption et de diffusion sont connus pour chaque longueur d'onde et chaque altitude, passons au calcul de l'atténuation du rayonnement dans les couches atmosphériques, à savoir le calcul du flux actinique.

1.5.3 Calcul du flux actinique

Le calcul du flux actinique dans une géométrie sphérique en prenant en compte les phénomènes de diffusion est un calcul complexe. Nous avons utilisé plusieurs modèles lors de cette étude et allons brièvement les décrire et les comparer.

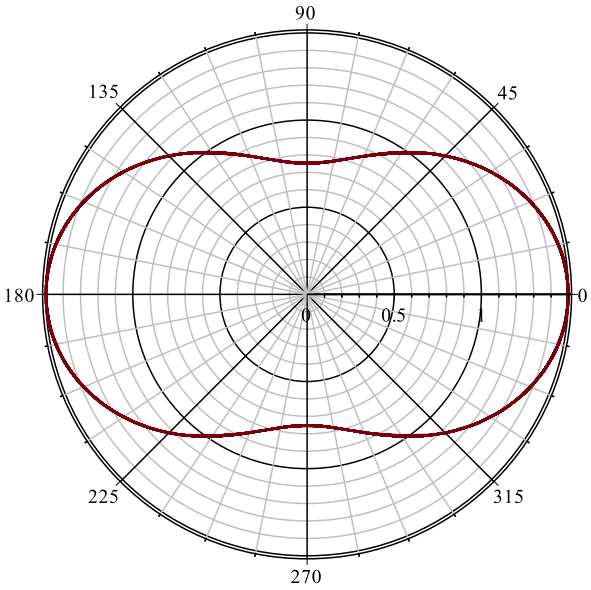

Figure 1.9 – Fonction de phase de la diffusion Rayleigh.

Rayleigh en atténuation

Le premier modèle de transfert de rayonnement utilisé est relativement simple et a le mérite d'être très rapide à l'exécution. Celui-ci prend en compte l'atténuation du rayonnement par absorption pure et par atténuation Rayleigh. Ce dernier point signifie que la diffusion Rayleigh est considérée comme un processus d'atténuation, sans réémission du photon ayant interagi.
Le flux à une altitude et à une longueur d'onde données est donc :

$$F(\lambda, z) = F_0(\lambda) \exp\left(-\tau(\lambda, z)\right) \tag{1.87}$$

Le calcul de la profondeur optique se fait suivant l'intégrale 1.77 et nécessite de connaitre la longueur du chemin parcouru par le rayonnement qui se propage. Ce modèle de plans-parallèles utilise une correction pour le calcul des trajets optiques afin de s'affranchir de la divergence de ces trajets pour les grands angles d'incidences. Les notations se réfèrent à la figure 1.10. Le détail du calcul est fourni dans l'annexe C.
La trajectoire d_j parcourue par un rayon lumineux s'écrit :

$$d_j = R\left(\sqrt{\cos^2\theta + 2\frac{\Delta z}{R} + \frac{\Delta z^2}{R^2}} - \cos\theta\right) \tag{1.88}$$

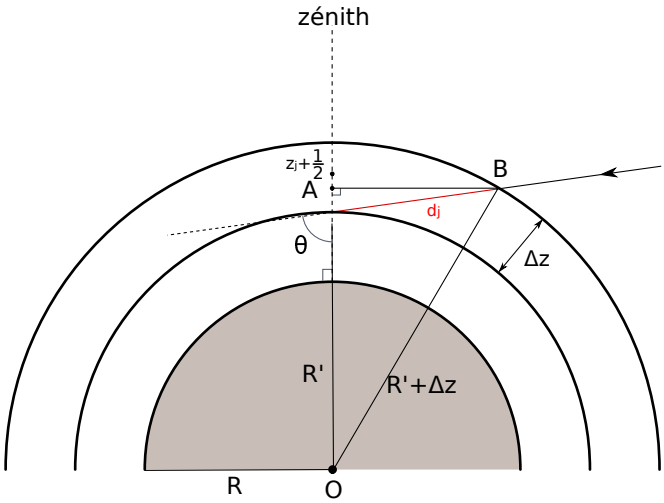

Figure 1.10 – Trajet optique parcouru par un photon dans une atmosphère discrétisée en couches sphériques au niveau d'altitude considéré j. $z_{j+\frac{1}{2}}$ représente l'altitude évaluée au milieu de la cellule j. Notez que OA $\neq R' + z_{j+\frac{1}{2}}$. L'épaisseur des couches sphériques est Δz

Algorithme d'Isaksen

Les processus de diffusion par les composés atmosphériques peuvent être pris en compte de façon relativement simple, sans entrer dans des modèles plus complexes qui nécessitent des temps de calcul conséquents. Isaksen et al. (1977) proposèrent une méthode itérative qui permet de prendre en compte ces diffusions multiples.
Dans cet algorithme, le flux lumineux est séparé en deux composantes : la composante descendante ($F^{\downarrow}$) et la composante montante ($F^{\uparrow}$) du flux. Les diffusions multiples Rayleigh sont prises en compte en considérant que la moitié des photons est diffusée vers l'avant et l'autre moitié vers l'arrière. La justification physique de cette approximation provient du fait que la fonction de phase de la diffusion Rayleigh présentée en figure 1.9, possède deux maximas identiques vers l'avant et vers l'arrière. Nous distinguerons l'atténuation du rayonnement due à l'absorption, avec sa profondeur optique associée τ_{abs}, de l'atténuation due aux processus de diffusion, avec la profondeur optique correspondante τ_{diff}. Nous noterons τ la profondeur optique totale, qui tient compte de la somme de ces deux processus. La figure 1.11 présente les notations utilisées dans ce paragraphe. Ce modèle de transfert en plans-parallèles tient aussi compte de la correction des trajets optiques pour les grands angles d'incidences.

Première itération

Lors de la première itération, le flux descendant s'écrit :

$$F_1^{\downarrow}(\lambda, z_j) = F_1^{\downarrow}(\lambda, z_{j+1}) e^{-\tau(\lambda, z_{j+\frac{1}{2}})} \tag{1.89}$$

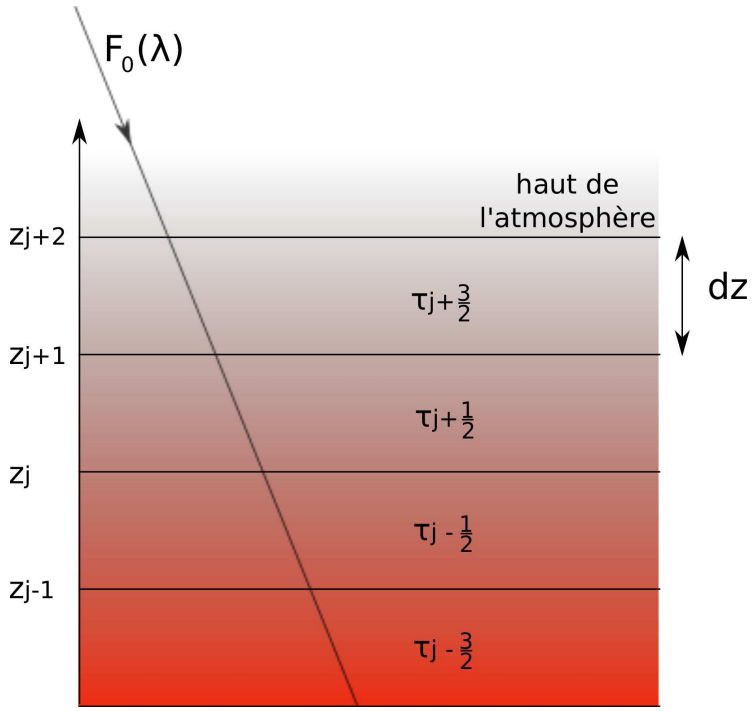

Figure 1.11 – Notations utilisées pour traiter la diffusion par utilisation de l'algorithme d'Isaksen.

où $F_1^{\downarrow}(\lambda, z_j)$ = flux descendant à l'altitude z_j, à l'ordre 1 [$\mathrm{cm}^{-2}\,\mathrm{s}^{-1}\,\mathrm{cm}^{-1}$]

$\tau(\lambda, z_{j+\frac{1}{2}})$ = profondeur optique de la cellule en altitude repérée par l'indice $j + \dfrac{1}{2}$

Le calcul de ce flux à l'ordre 1 se fait de façon itérative, en partant du haut vers le bas de l'atmosphère. Le flux à l'ordre 1 en haut de l'atmosphère correspond au flux solaire présenté sur la figure 1.6. Le calcul du flux montant à l'itération 1 s'effectue de façon similaire du bas vers le haut. Une différence est toutefois à noter lorsque l'albédo de la couche inférieure est différent de 0, par exemple, lors de la présence de nuage ou d'une surface physique réfléchissante.
Le flux montant à l'altitude inférieure est donc :

$$F_1^{\uparrow}(\lambda, z_{min}) = a(\lambda) F_1^{\downarrow}(\lambda, z_{min}) \tag{1.90}$$

où $a(\lambda)$ = albédo de la couche inférieure

Le calcul des flux montants s'effectue ensuite de façon assez directe :

$$F_1^{\uparrow}(\lambda, z_j) = F_1^{\uparrow}(\lambda, z_{j-1}) e^{-\tau(\lambda, z_{j-\frac{1}{2}})} \tag{1.91}$$

Itérations suivantes

Pour calculer le flux aux itérations suivantes, nous procédons comme suivant. La moitié des photons diffusés à l'itération précédente lors de leurs passages de l'altitude z_{j+1} à z_j le sont vers l'avant $\left(\frac{1}{2}\left(1 - e^{-\tau^{diff}(\lambda, z_{j+\frac{1}{2}})}\right) F_{i-1}^{\downarrow}(\lambda, z_{j+1})\right)$ et viennent contribuer au flux $F_i^{\downarrow}(\lambda, z_j)$, ils sont par ailleurs atténués lors de leurs passages dans cette cellule ($e^{-\tau(\lambda, z_{j+\frac{1}{2}})}$). De même, la moitié des photons diffusés à l'itération précédente lors de leurs passages de l'altitude z_{j+1} à z_j, sont rétro-diffusés $\left(\frac{1}{2}\left(1 - e^{-\tau^{diff}(\lambda, z_{j+\frac{1}{2}})}\right) F_{i-1}^{\uparrow}(\lambda, z_j)\right)$. Ils sont eux-aussi atténués lors de leurs passages dans cette cellule. Le flux descendant à l'itération i s'écrit :

$$F_i^{\downarrow}(\lambda, z_j) = \left[\frac{1}{2}\left(1 - e^{-\tau^{diff}(\lambda, z_{j+\frac{1}{2}})}\right)\left(F_{i-1}^{\uparrow}(\lambda, z_j) + F_{i-1}^{\downarrow}(\lambda, z_{j+1})\right) + F_i^{\downarrow}(\lambda, z_{j+1})\right] e^{-\tau(\lambda, z_{j+\frac{1}{2}})} \tag{1.92}$$

De façon similaire, le flux montant s'écrit :

$$F_i^{\uparrow}(\lambda, z_j) = \left[\frac{1}{2}\left(1 - e^{-\tau_{diff}(\lambda, z_{j-\frac{1}{2}})}\right)\left(F_{i-1}^{\uparrow}(\lambda, z_{j-1}) + F_{i-1}^{\downarrow}(\lambda, z_j)\right) + F_i^{\uparrow}(\lambda, z_{j-1})\right] e^{-\tau(\lambda, z_{j-\frac{1}{2}})} \tag{1.93}$$

Le flux à une interface entre deux couches données est :

$$F_i(\lambda, z_j) = F_i^{\uparrow}(\lambda, z_j) + F_i^{\downarrow}(\lambda, z_j) \tag{1.94}$$

L'algorithme est stoppé lorsque la variation du flux total entre deux itérations est inférieure à un seuil arbitraire. La figure 1.12 présente le nombre d'itérations nécessaires à la convergence de l'algorithme d'Isaksen. Lorsque l'absorption domine, notamment pour les longueurs d'onde courte ($\lambda < 150$ nm), le nombre d'itérations nécessaires est très faible. Ce nombre croit de façon importante lorsque l'absorption devient moins importante que les processus de diffusion, aux grandes longueurs d'onde ($\lambda > 150$ nm). Notons que la première itération de l'algorithme d'Isaksen correspond au modèle Rayleigh en atténuation.

Gardons cependant en tête que ces deux méthodes qui viennent d'être présentée restent des modèles de plans-parallèles qui tiennent compte d'une correction pour les grands angles d'incidences. Elles sont certes plus précises qu'un modèle de plans parallèles sans cette correction, mais présentent des limitations. En effet, la figure 1.13 représente la

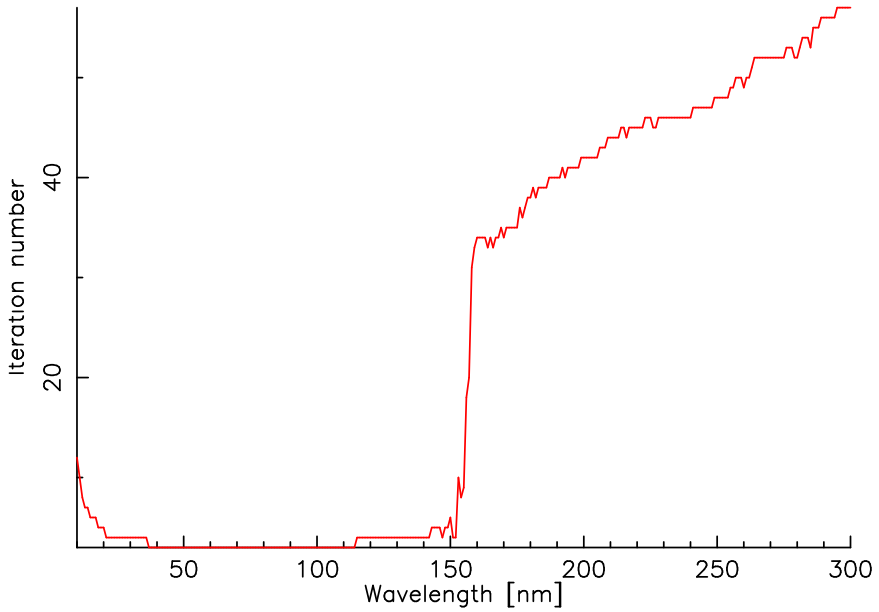

Figure 1.12 – Nombre d'itérations nécessaires à la convergence de l'algorithme d'Isaksen en fonction de la longueur d'onde des photons considérés.

trajectoire fictive d'un rayon lumineux arrivant avec un angle d'incidence θ_{incid} sur une cellule θ_j en latitude. L'approximation provient du fait que l'on considère que le rayon lumineux reste dans la même colonne atmosphérique le long de sa trajectoire, ce qui n'est vrai que pour des angles d'incidences faibles. Notons que cette approximation reste acceptable pour des planètes de type géantes gazeuses ayant un rapport entre la taille de son atmosphère (au dessus de 1 bar) sur son rayon très faible.

Modèle de transfert radiatif 3D

Dans le cadre du développement du modèle photochimique à deux dimensions, le modèle de transfert radiatif doit être suffisamment robuste pour permettre de calculer le trajet des photons qui arrivent à une incidence rasante dans l'atmosphère. Or, les deux modèles qui viennent d'être présenté ne permettent pas de calculer précisément le trajet de ces photons (voir figure 1.13 par exemple). Nous avons donc utilisé un modèle de transfert radiatif à géométrie 3D sphérique qui prend en compte les diffusions multiples à l'aide d'une procédure Monte-Carlo. Celui-ci est basé sur le modèle de transfert radiatif initié par Brillet et al. (1996) et finalisé par Brillet (2014, non-publié). Diverses fonctions de phase peuvent être considérées dans le traitement de la diffusion : la fonction de phase Rayleigh (Rayleigh, 1918) ou encore diverses fonctions de phase de Henyey-Greenstein pour le traitement de la diffusion de Mie (Henyey and Greenstein, 1941).

Les paramètres d'entrée de ce modèle sont les coefficients d'absorption et de diffusion, le découpage en géométrie sphérique du modèle, ainsi que les paramètres de diffusion

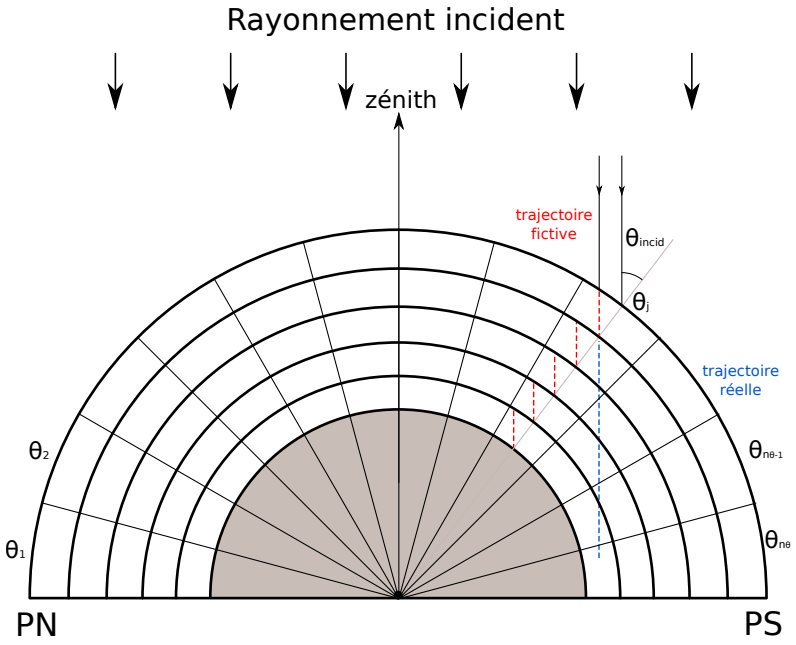

Figure 1.13 – Trajectoire réelle (en bleu) et fictive (en rouge) d'un rayon lumineux arrivant en haut de l'atmosphère avec un angle d'incidence θ_{incid}. L'approximation utilisée est d'autant plus juste que l'angle d'incidence du rayon lumineux est faible.

utilisés par la procédure Monte-Carlo, tel que le nombre de tirages, le type de diffusion, ou encore la fraction du flux solaire incident en dessous de laquelle la procédure Monte-Carlo s'arrête.

Le modèle procède alors à un tirage aléatoire d'un nombre de photons dans l'atmosphère, dont la trajectoire sera suivie en 3D. Le trajet des photons est ainsi calculé de façon formelle. Le découpage en altitude/latitude subsolaire/longitude subsolaire nécessite de calculer des trajets optiques qui intersectent des sphères/cônes/plans, respectivement. En effet, le découpage en altitude se fait par couches sphériques, le découpage en latitude subsolaire par des cônes et le découpage en longitude subsolaire par des plans. Le découpage du modèle est représenté sur les figures 1.14 et 1.15. Le point subsolaire est dénoté par le point noir sur ces figures.

Le modèle de transfert considère une géométrie qui se place dans le référentiel subsolaire (altitude, latitude subsolaire, longitude subsolaire) qui diffère du référentiel utilisé dans le cadre du modèle photochimique (altitude, latitude, longitude). Notons que le modèle photochimique suppose une composition homogène en longitude. Le couplage entre ce modèle de transfert et le modèle photochimique se fait de la façon suivante. Lorsque les taux de photodissociations du modèle photochimique nécessitent d'être calculés, les coefficients d'absorption et de diffusion à chaque latitude et altitude sont tout d'abord calculés étant donnée la composition atmosphérique. Une grille en latitude subsolaire, longitude subsolaire et altitude est alors créée. Le point crucial pour la précision du calcul des flux actiniques réside dans le fait que les paramètres de cette grille doivent être tels

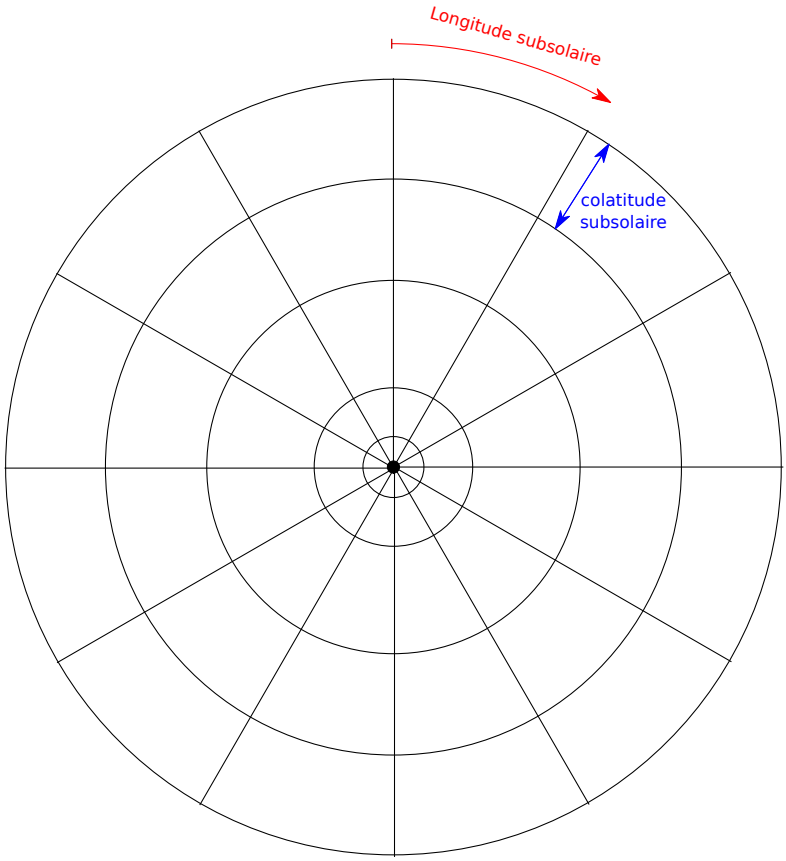

Figure 1.14 – Discrétisation utilisée dans le modèle 3D de transfert radiatif. Le point subsolaire correspond au point noir central. Il est l'origine des colatitudes subsolaires.

que les résolutions en latitude subsolaire et longitude subsolaire sont plus fines que la résolution en latitude du modèle photochimique. Si cette condition n'est pas satisfaite, les taux de photodissociations ne sont pas correctement évalués et les résultats du modèle photochimique perdent alors en précision. Le modèle de transfert suppose un découpage en latitude subsolaire et longitude subsolaire constant mais qui peut être différent l'un de l'autre, i.e. le pas en latitude subsolaire peut être différent du pas en longitude subsolaire. Par ailleurs les valeurs des discrétisations en latitude subsolaire et longitude subsolaire doivent être des valeurs entières divisant 90°.

Le passage de la distribution des coefficients d'absorption et de diffusion depuis le référentiel planétocentrique vers le référentiel subsolaire se fait de la façon suivante.
Nous cherchons, pour un point M, ses coordonnées (θ_p, λ_p) dans le référentiel planétocentrique, correspondant à des coordonnées (θ_s, λ_s) dans le référentiel subsolaire, étant donnée la géométrie de la planète considérée, c'est à dire sa déclinaison solaire (δ) et la longitude de son point subsolaire (l_s). Nous passerons par l'intermédiaire de deux référentiels cartésiens rattachés aux deux référentiels sphériques planétocentrique et subsolaire.
Les coordonnées du point M dans le référentiel cartésien rattaché au référentiel subsolaire

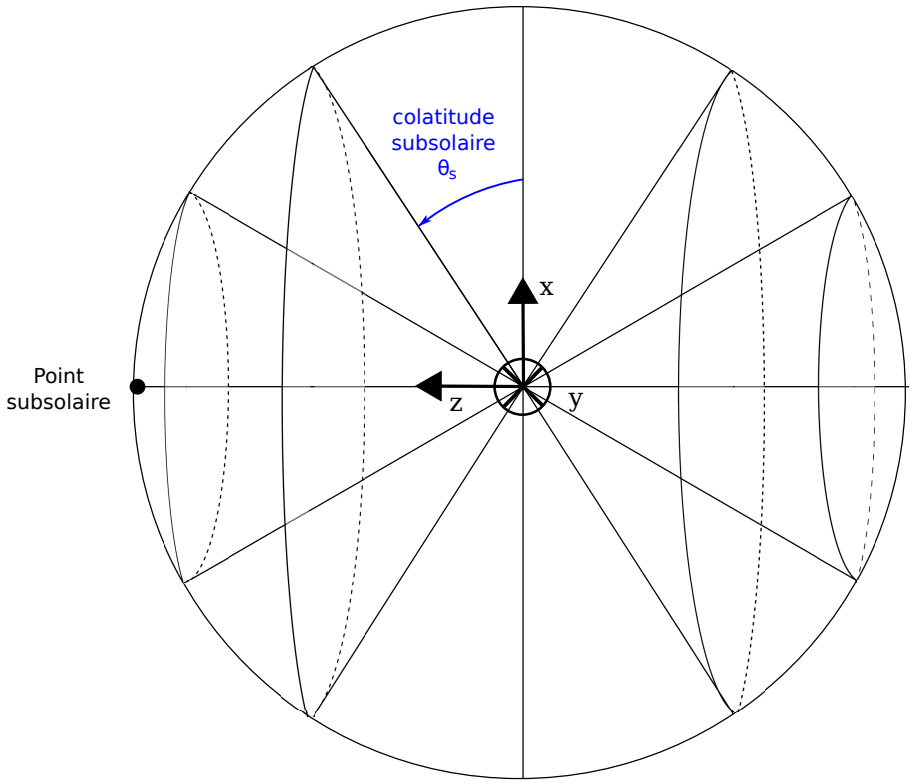

FIGURE 1.15 – Géométrie sphérique à 3D du modèle de transfert radiatif. L'angle θ_s représente la colatitude subsolaire (voir le texte pour plus de détails). Par soucis de clarté, longitude subsolaire (contenu dans le plan xOy) n'est pas représenté sur ce graphique.

sont :

$$M_s = \begin{pmatrix} x_s \\ y_s \\ z_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta_s \cos\lambda_s \\ \cos\theta_s \sin\lambda_s \\ \sin\theta_s \end{pmatrix} \tag{1.95}$$

Nous avons considéré que l'axe x correspond à la longitude subsolaire 0. Les coordonnées du point M dans le référentiel cartésien rattaché au référentiel planétocentrique se calculent de la façon suivante :

$$M_p = \begin{pmatrix} x_p \\ y_p \\ z_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin\delta_S & 0 & \cos\delta_S \\ 0 & 1 & 0 \\ -\cos\delta_S & 0 & \sin\delta_S \end{pmatrix} M_s \tag{1.96}$$

La matrice 3×3 représente une rotation d'un angle δ_S autour de l'axe y du repère cartésien attaché au référentiel subsolaire telle qu'il est présenté sur la figure 1.15. Finalement, la latitude correspondante du point M dans le référentiel planétocentrique est :

$$\theta_p = 90° - \arccos\left(\frac{z_p}{\|\mathbf{OM_p}\|}\right) \tag{1.97}$$

Rappelons que seule la latitude est utilisée dans ces calculs car nous supposons une homogénéité longitudinale. Une fois l'atténuation des rayonnements solaires calculée à l'aide de ce modèle, le passage inverse depuis le référentiel subsolaire vers le référentiel planétocentrique se fait de façon similaire et permet d'obtenir les flux actiniques dans le référentiel planétocentrique, ce qui permet, via l'équation 1.12, de calculer les taux de photodissociations.

Ce modèle, à la différence des deux précédents, permet de calculer exactement le trajet optique des photons dans l'atmosphère et de prendre en compte la diffusion Rayleigh des photons à trois dimensions. L'inconvénient d'un tel modèle se situe dans son temps d'exécution plus long par rapport aux deux modèles précédemment présentés.

Nous allons à présent comparer les résultats obtenus à l'aide des trois modèles de transfert présentés dans cette partie.

1.5.4 Comparaison des modèles de transfert radiatif

Afin de comparer ces modèles, nous nous placerons dans le cas de Saturne, et partirons d'une composition chimique calculée à l'état stationnaire, à l'aide du réseau chimique des hydrocarbures simplifié qui a été proposé par Dobrijevic et al. (2011). L'évolution en fonction de la longueur d'onde du niveau de pression pour lequel la profondeur optique est égale à 1 est présentée dans la figure 1.16. Notons que cette profondeur optique a été calculée à l'aide du modèle de transfert en plans-parallèles (modèle de Rayleigh en atténuation).
Plusieurs régimes sont alors observables :

$\lambda < 150$ nm : Absorption dominante

Dans la gamme des courtes longueurs d'onde, c'est l'absorption qui domine. Dans ce domaine, les principales molécules absorbantes dans les planètes géantes sont H_2 et CH_4. Le rayonnement est très vite arrêté dans l'atmosphère, typiquement à des pressions de l'ordre de 10^{-7}-10^{-4} mbar.

La figure 1.17 présente les facteurs d'augmentation lorsque l'absorption domine pour les trois modèles de transfert radiatif décrits plus haut, à deux longueurs d'onde différentes. Les facteurs d'augmentation sont donnés pour trois angles d'incidence différents : 0°, 40° et 80°. Pour les deux premiers cas, lorsque l'angle d'incidence n'est pas trop important,

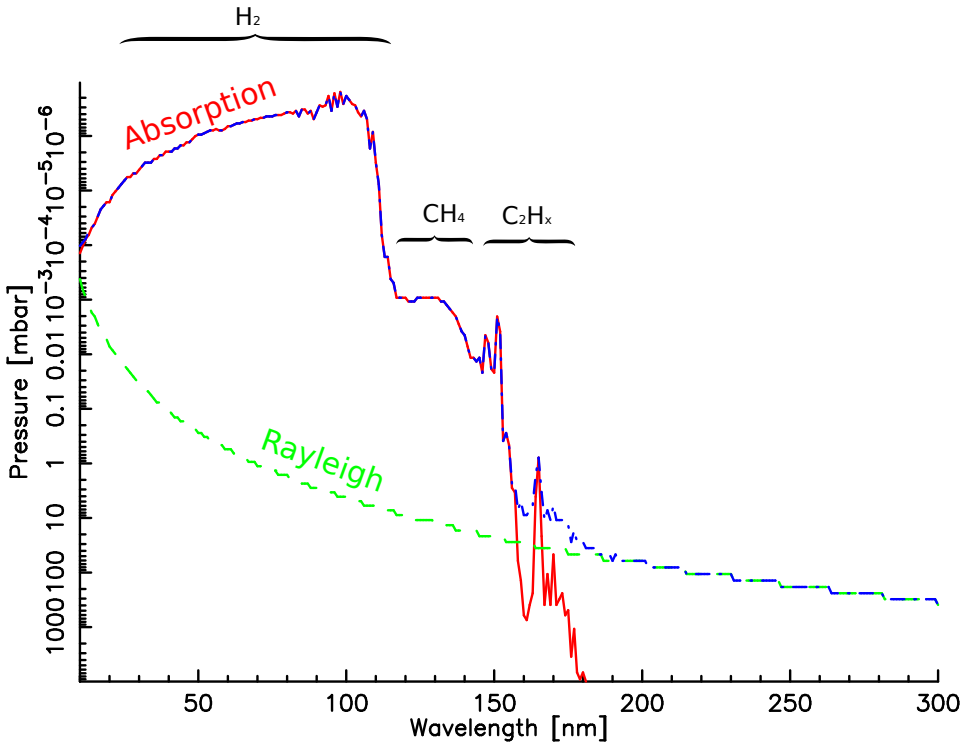

Figure 1.16 – Évolution du niveau de pression pour lequel la profondeur optique est égale à 1 en fonction de la longueur d'onde. Les différents processus impliqués sont indiqués sur la figure. L'absorption pure est tracée en rouge, la diffusion Rayleigh en vert, et la somme des deux en bleue.

les trois modèles donnent des résultats identiques. Des différences sont observées pour des angles d'incidence plus importants, i.e. 80°. Les radiations sont en effet arrêtées plus haut dans l'atmosphère avec le modèle de transfert 3D. Pour les angles d'incidences élevées, la correction du trajet optique des modèles en plans-parallèles (modèle de Rayleigh en atténuation et modèle d'Isaksen) à l'aide de la formule 1.88 ne reproduit pas correctement le trajet des photons à 3D.

$\lambda > 180$ nm : Diffusion Rayleigh dominante

Aux plus grandes longueurs d'onde, lorsque la diffusion domine, les composés considérés n'absorbent plus. Les photons subissent de multiples diffusions et seul un modèle qui tient compte de façon exacte de la diffusion Rayleigh permettra d'appréhender correctement l'atténuation des radiations incidentes dans cette gamme de longueur d'onde. Néanmoins, comme l'absorption des composés considérés est très faible dans cette gamme de longueur d'onde, l'impact sur la chimie est aussi minime. Notons que ce régime où la diffusion domine, au-delà de 180 nm, est seulement valable dans le cas où nous ne considérons qu'une chimie simplifiée des hydrocarbures. Il est évident que la prise en compte de molécules plus complexes, et notamment les composés oxygénés, qui absorbent à des

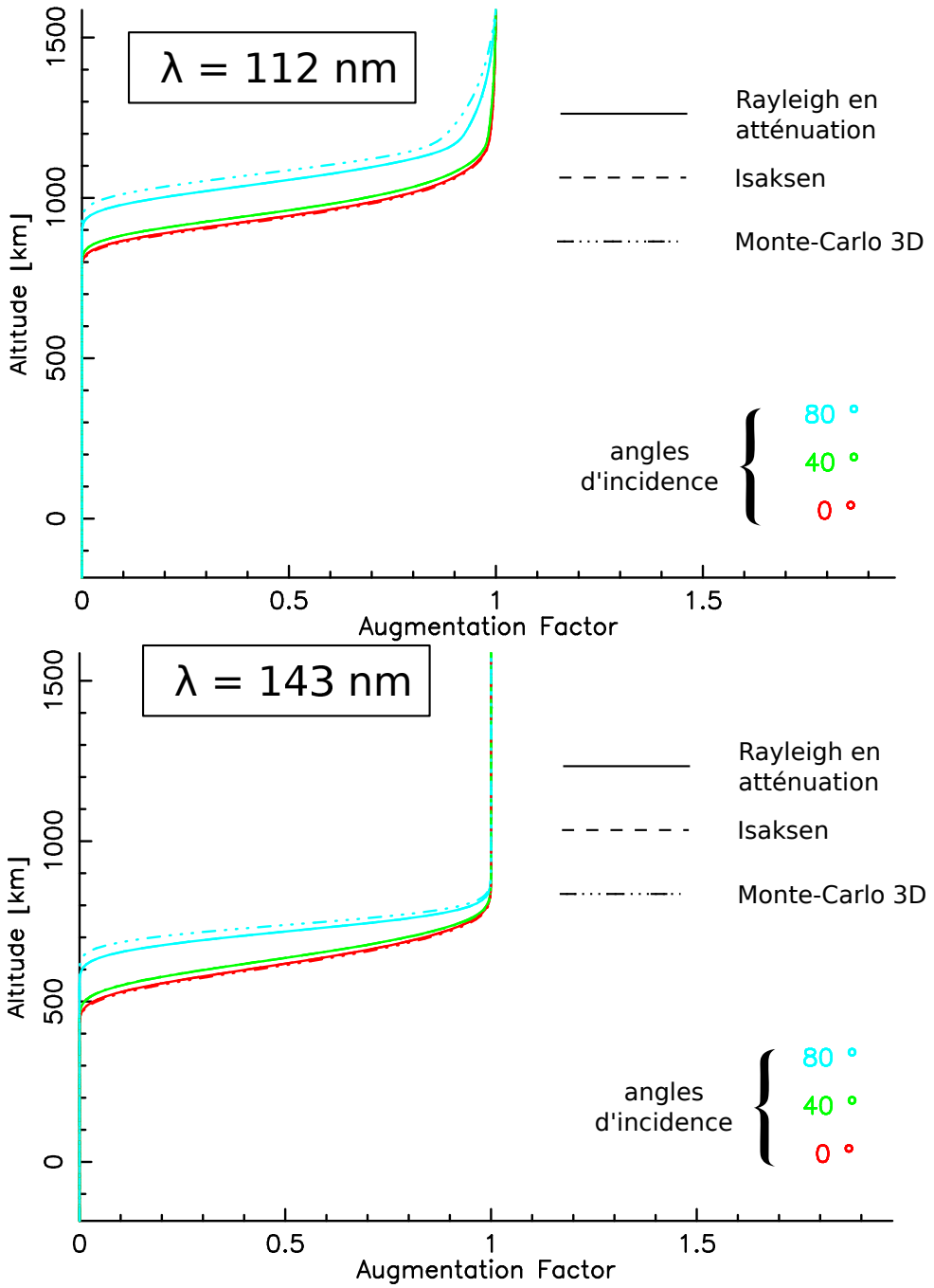

Figure 1.17 – Évolution des facteurs d'augmentation pour les trois modèles de transfert radiatif utilisés pour $\lambda = 112$ et 143 nm : Rayleigh en atténuation (trait plein), modèle d'Isaksen (pointillés) et modèle Monte-Carlo 3D (tirets et 3 points). Ces facteurs sont donnés pour trois angles d'incidence différents : 0°, 40° et 80°. Les différences entre les modèles sont très faibles lorsque l'absorption domine et que l'angle d'incidence reste faible. L'angle d'incidence 0° correspond à la colonne subsolaire.

longueurs d'onde plus importantes, va faire varier cette limite en longueur d'onde où la diffusion commence à dominer l'absorption.

La figure 1.18 présente le cas où la diffusion Rayleigh domine. Des différences très importantes sont maintenant observées à cause du traitement de la diffusion très différent entre les modèles. Physiquement, lorsque la profondeur optique τ devient proche de 1 dans cette gamme de longueur d'onde, les diffusions multiples vont devenir très fréquentes. À cause de la très faible absorption du milieu considéré à cette longueur d'onde, les photons vont subir une succession de diffusions, en étant faiblement absorbés. Les diffusions multiples sont observées avec l'algorithme d'Isaksen, se traduisant par des facteurs d'augmentation supérieurs à 1. Cependant cet algorithme ne peut reproduire le pic noté dans les facteurs d'augmentation, caractéristique de la diffusion Rayleigh pour des angles d'incidences faibles.

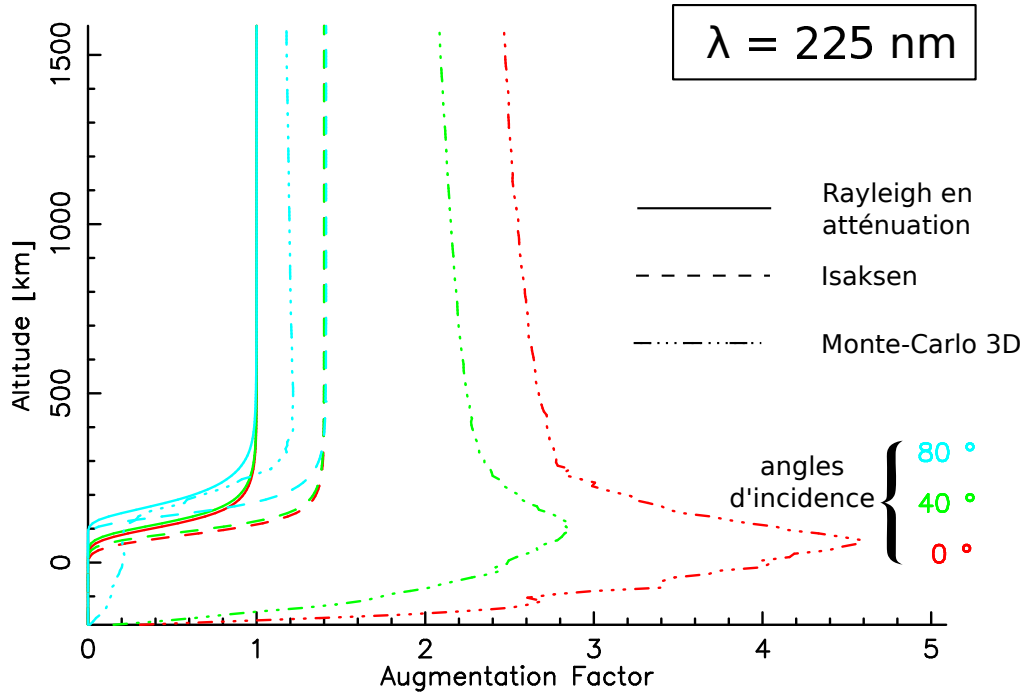

Figure 1.18 – Évolution des facteurs d'augmentation pour les trois modèles de transfert radiatif utilisés. Lorsque la diffusion est le processus physique dominant, les différences entre les modèles de transfert sont importantes.

150 nm $< \lambda <$ 180 nm : Absorption et diffusion du même ordre de grandeur

Finalement, dans la zone intermédiaire, l'absorption par les composés atmosphériques est du même ordre de grandeur que les processus diffusifs. Dans cette zone, il est difficile de prédire à l'aide d'un modèle simple l'impact que les diffusions multiples ont sur

la chimie atmosphérique. Les facteurs d'augmentation pour deux longueurs d'onde différentes dans ce cas sont présentés sur la figure 1.19. Nous remarquons que les différences sont d'autant plus importantes que l'angle d'incidence est faible. À 178 nm, notons que les processus d'absorption sont légèrement plus faibles qu'à 170 nm (voir figure 1.16). Le pic caractéristique de la diffusion Rayleigh observé dans les facteurs d'augmentation pour des faibles angles d'incidence est prédit par le modèle de transfert radiatif à 3D. Il est cependant maintenant moins prononcé du fait des processus d'absorption.

Bien que le modèle de transfert radiatif à 3D soit plus coûteux en tant de calcul, nous voyons que des modèles simples n'arrivent pas à reproduire précisément l'atténuation du flux solaire. Comme l'évaluation de ce flux, et par conséquent des taux de photodissocation, est un élément clé dans les modèles photochimiques, nous avons décidé de coupler notre modèle photochimique avec ce modèle de transfert radiatif 3D.

Nous allons maintenant présenter la façon dont l'évolution saisonnière des planètes est traitée dans le modèle photochimique.

1.6 Implémentation de la dimension saisonnière

Les caractéristiques orbitales et physiques des planètes géantes du Système solaire sont très variables, comme le montre le tableau 1.3 qui présente les valeurs d'obliquité, d'excentricité et de demi-grand axe de ces planètes. L'obliquité des différentes géantes illustre bien cette situation, car elle varie de 3,12° pour Jupiter jusqu'à 97,8° pour Uranus. Ces quantités sont les principales caractéristiques planétaires susceptibles d'influencer leur photochimie. Les excentricités orbitales des planètes jouent aussi un rôle important. En effet, une planète qui possède une importante excentricité passe peu de temps à proximité de l'étoile à l'approche de son périhélie. Si cette planète possède une obliquité significative, un des hémisphères de la planète peut être amené à recevoir un flux important durant une durée très courte (au périhélie) et, inversement, à l'aphélie, son autre hémisphère va recevoir un flux solaire plus faible mais sur une durée significativement plus longue : c'est par exemple le cas de Mars. Nous allons présenter ici comment nous avons traité ces caractéristiques planétaires.

1.6.1 Éléments orbitaux

Les notations que nous utilisons dans cette partie sont représentées sur la figure 1.20. L'anomalie moyenne M a été initialement introduite par Kepler afin de simplifier le calcul des orbites planétaires. Elle correspond au mouvement d'une planète sur une orbite circulaire ayant une période similaire à celle qu'elle a sur son orbite réelle, elliptique. L'anomalie excentrique E correspond à la position réelle de la planète projetée sur l'orbite circulaire. L'anomalie vrai ω correspond à l'angle entre le périhélie de la planète et sa position sur son orbite excentrique, mesurée depuis le foyer à proximité du périhélie.

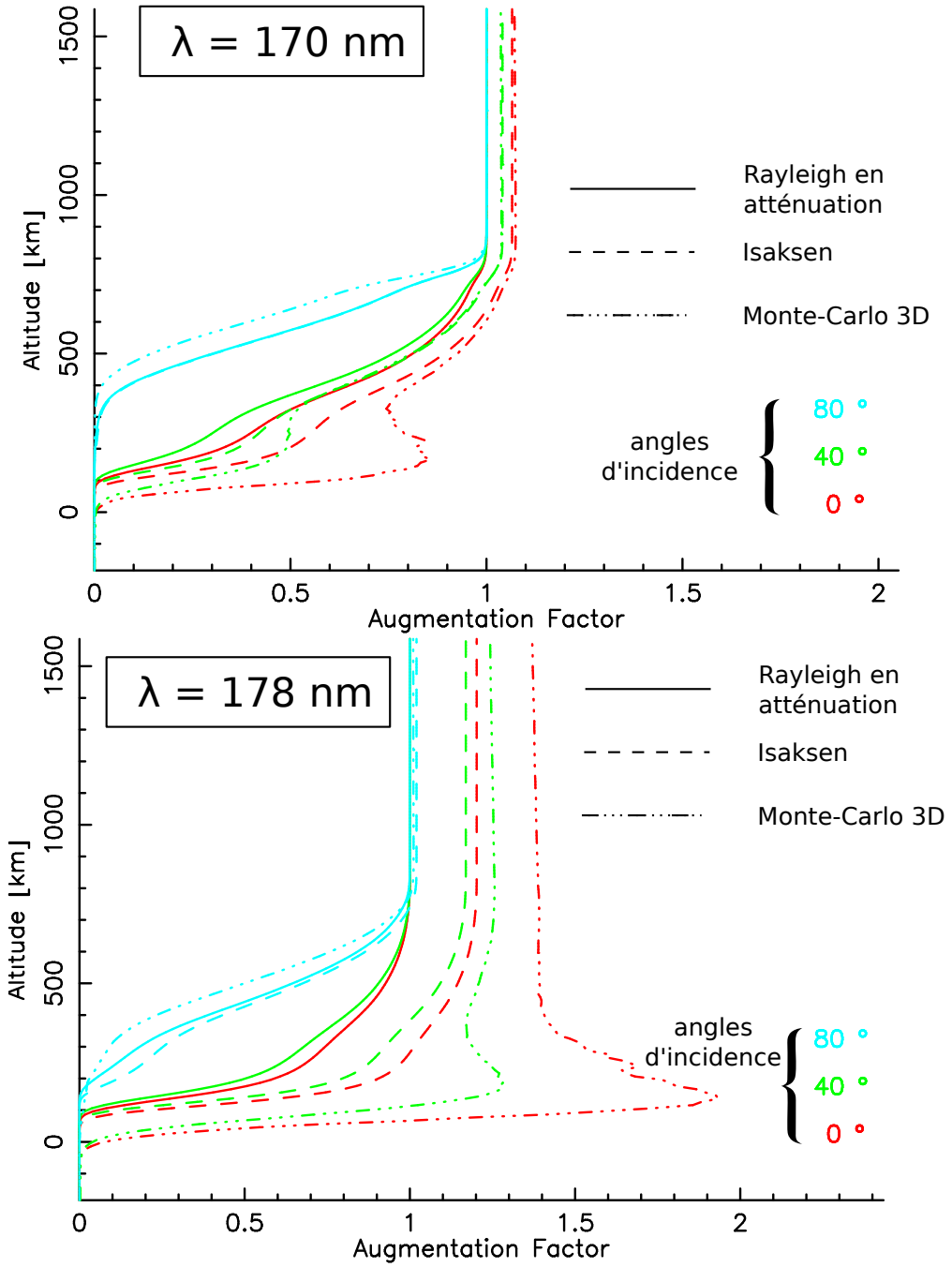

Figure 1.19 – Évolution des facteurs d'augmentation pour les trois modèles de transfert radiatif utilisés. Lorsque la diffusion et l'absorption sont du même ordre de grandeur, des écarts assez notables sont observés, particulièrement lorsque la diminution du flux devient significative, *i.e.* lorsque $\tau \approx 1$.

La formule reliant l'anomalie excentrique et l'anomalie vraie est la suivante :

Planète	Jupiter	Saturne	Uranus	Neptune
Obliquité [deg]	3,12	26,73	97,86	29,58
Excentricité []	0,048392	0,054150	0,047167	0,008585
Demi-grand axe [ua]	5,20	9,54	19,19	30,07

Table 1.3 – Présentation des principales caractéristiques orbitales d'intérêt des planètes géantes du système solaire, à J2000 (Allen and Cox, 2000).

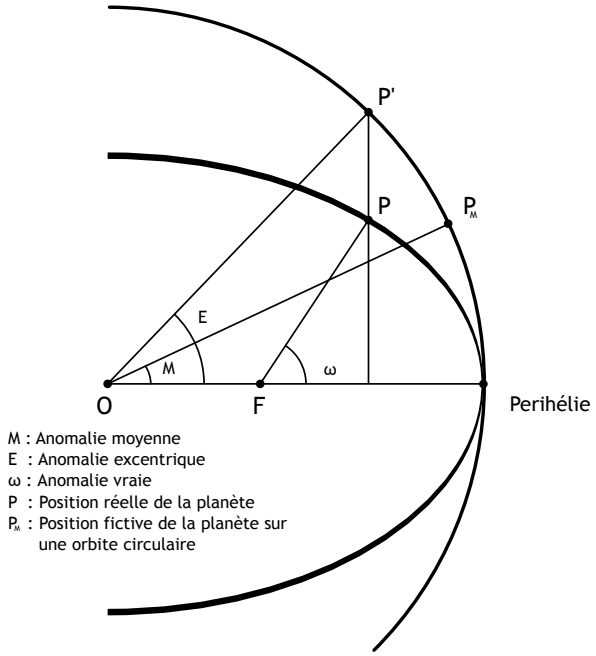

Figure 1.20 – Notations utilisées pour l'implémentation du modèle saisonnier.

$$\tan\omega = \sqrt{\frac{1+e}{1-e}}\tan E \tag{1.98}$$

où ω = anomalie vraie [degrés]

E = anomalie excentrique [degrés]

La relation entre l'anomalie moyenne et l'anomalie excentrique est donnée par l'équation de Kepler :

$$M = E(1 - e\sin E) \tag{1.99}$$

L'avantage qu'à l'utilisation de l'anomalie moyenne réside dans le fait que, sur cette orbite circulaire, la position fictive de la planète repérée par l'anomalie moyenne évolue linéairement dans le temps. On peut ainsi écrire :

$$M = \frac{2\pi}{T}t \tag{1.100}$$

où T = période de révolution [s]

t = temps mis pour atteindre un point d'anomalie moyenne M [s]

L'utilisation de la longitude solaire permet une implémentation relativement simple de la dimension temporelle dans le modèle saisonnier. Cette longitude solaire (aussi appelée longitude héliocentrique, notée L_s) est une quantité similaire à l'anomalie vraie. Seules les origines de ces deux quantités sont différentes. Le point de longitude solaire nulle correspond à l'équinoxe de printemps dans l'hémisphère nord, soit la direction du point vernal (notée γ) de la planète considérée, alors que l'origine des anomalies vraies correspond au périhélie de la planète.

Pour déterminer l'écart angulaire entre la position du périhélie de la planète et son point vernal, angle que l'on notera ω_0 par la suite, nous avons utilisé le calculateur d'éphéméride JPL-HORIZONS. Il permet d'obtenir la longitude écliptique, notée λ^{ecl} ici, en fonction du temps. Cette nouvelle longitude est mesurée à partir de l'orbite terrestre (à J2000), et son origine correspond au point vernal de l'orbite terrestre. En calculant la longitude écliptique du point vernal des planètes considérées, on peut ainsi avoir le décalage, noté λ_γ^{ecl}, à appliquer à ces longitudes écliptiques afin d'obtenir la longitude héliocentrique correspondante. Ainsi :

$$L_s = \lambda^{ecl} - \lambda_\gamma^{ecl} \tag{1.101}$$

où L_s = longitude héliocentrique [degrés]

λ^{ecl} = longitude écliptique [degrés]

λ_γ^{ecl} = longitude écliptique du point vernal [degrés]

L'écart angulaire ω_0 entre la position du périhélie et du point vernal est :

$$\omega_0 = \lambda_\gamma^{ecl} - \lambda_{peri}^{ecl} \tag{1.102}$$

où L_s = longitude écliptique du périhélie [degrés]

(1.103)

Planète	Jupiter	Saturne	Uranus	Neptune
λ_{γ}^{ecl} [degrés]	317,23	173,57	347,54	45,84
λ_{peri}^{ecl} [degrés]	14,52	93,87	170,09	38,00
ω_0 [degrés]	302,71	79,69	177,45	7,94

Table 1.4 – Longitudes écliptiques de l'équinoxe vernal ainsi que du périhélie des planètes géantes, obtenues à l'aide du calculateur d'éphéméride JPL-HORIZONS (J2000).

Pour la suite de la démonstration, il est nécessaire de calculer le temps mis par la planète pour atteindre l'origine des longitudes solaires depuis son périhélie. Nous noterons ce temps t_0, ainsi :

$$t_0 = \frac{T}{2\pi} M_0 \tag{1.104}$$

$$t_0 = \frac{T}{2\pi} E_0 \left(1 - e \sin E_0\right) \tag{1.105}$$

Enfin, E_0 et ω_0 sont reliés par la relation 1.98. Le temps mis par la planète pour aller au point de longitude solaire L_s, étant donné que son périhélie ne coïncide pas avec son point de longitude solaire nulle est :

$$t(L_s) = t(\omega) - t_0 \tag{1.106}$$

$$t(L_s) = \frac{T}{2\pi} M - t_0 \tag{1.107}$$

$$t(L_s) = \frac{T}{2\pi} E \left(1 - e \sin E\right) - t_0 \tag{1.108}$$

De même, la distance orbitale de la planète, essentielle pour le calcul du flux solaire reçu par la planète si celle-ci est sur une orbite excentrique, se calcule de la façon suivante :

$$r(\omega) = \frac{a\left(1 - e^2\right)}{1 + e\ \cos \omega} \tag{1.109}$$

$$r(\omega) = \frac{a\left(1 - e^2\right)}{1 + e\ \cos(L_s - \omega_0)} \tag{1.110}$$

où a = demi-grand axe de la planète [ua]

e = excentricité de la planète

Nous allons à présent voir, à l'aide de ces équations, comment le forçage saisonnier est implémenté dans le modèle photochimique.

1.6.2 Forçage saisonnier

L'orbite de la planète est tout d'abord discrétisée de manière à ce que les quantités d'intérêt du modèle (profils de température, déclinaison solaire, distance heliocentrique) soient connues en chaque point. Le pas de discrétisation orbitale, noté ΔL_s est arbitraire. Plus celui-ci est petit, et plus les calculs sont précis. Les valeurs de ΔL_s utilisées dans cette thèse varient de 90° à 10°. Une deuxième discrétisation est alors effectuée, et ses points se trouvent exactement au milieu de deux points adjacents de la première discrétisation. La figure 1.21 présente schématiquement cette façon de procéder. Les points de la première discrétisation, indiqués en noir, sont ceux pour lesquels on obtient une sortie du modèle. L'intérêt de cette procédure consiste à éviter que, pour un intervalle de longitude solaire donnée, les calculs de cinétique chimique se basent sur des quantités thermodynamiques (température, pression, constantes cinétiques) qui correspondent à l'une des deux bornes en longitude. Nous prendrons donc plutôt des valeurs moyennées, qui correspondent à un point orbital situé entre les deux bornes. Sur l'intervalle représenté par l'arc de cercle orange sur cette même figure, les quantités thermodynamiques, la déclinaison solaire ou encore la distance héliocentrique sont considérées comme constantes.

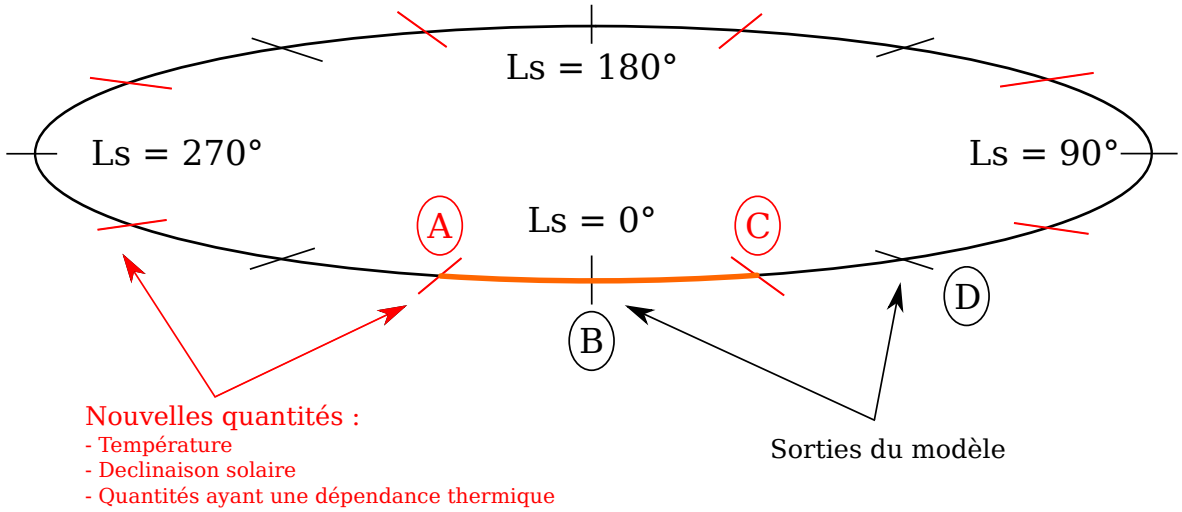

Figure 1.21 – Implémentation de la dimension orbitale. Deux discrétisations différentes sont utilisées. La discrétisation noire correspond aux sorties du modèle, là ou les quantités d'intérêts (par exemple les fractions molaires des composées atmosphériques, ou encore la température) seront écrites sur un fichier de données externe. Lorsque la planète atteint un point orbital rouge, les quantités (température, pression) sont "mises à jour".

Afin de mieux saisir la procédure, suivons sur quelques points la démarche effectuée. Supposons que la planète soit initialement située au point A :

1. Mise à jour des quantités suivantes au point A : Profils de température correspondant au point B, déclinaison solaire correspondant au point B, calcul des nouvelles quantités ayant une dépendance thermique (constantes cinétiques, coefficients de diffusion, lois de pression de vapeur saturante)
2. Résolution de l'équation de continuité (chimie + dynamique) sur un intervalle de temps $\Delta t = T_B - T_A$ donné par l'équation 1.108
3. En B : Sortie du modèle : Écriture des fractions molaires, température, pression, quantités relatives au transfert de rayonnement, coefficients de diffusion.
4. Résolution de l'équation de continuité sur un intervalle de temps $\Delta t = T_C - T_B$
5. Mise à jour des quantités suivantes au point C : profils de température correspondant au point D, déclinaison solaire correspondant au point D, calcul des nouvelles quantités ayant une dépendance thermique.

Nous procédons ainsi de suite jusqu'à ce que l'orbite complète de la planète considérée soit bouclée. Une fois l'orbite bouclée, nous itérons sur plusieurs orbites afin d'arriver à une convergence des abondances chimiques dans la basse atmosphère, i.e. lorsque les fluctuations d'abondance d'une orbite sur l'autre sont en-dessous d'un seuil arbitraire.

Le dernier point que nous allons aborder dans ce chapitre concerne le réseau chimique utilisé dans cette thèse.

1.7 Réseau chimique

L'étude de la chimie atmosphérique des planètes géantes passe par la résolution de l'équation de continuité pour chaque espèce chimique considérée dans l'ensemble du domaine physique supposé, que celui-ci soit à une ou plusieurs dimensions. La complexité des réseaux chimiques publiés dans la littérature a fortement augmenté ces dernières années. Le tableau 1.5 recense par exemple quelques modèles photochimiques des planètes géantes publiés ces 20 dernières années. Le nombre d'espèces ainsi que le nombre de réactions est en constante augmentation. Par ailleurs, les réseaux chimiques à hautes températures, qui permettent de modéliser les planètes de type Jupiter chaud, prennent en compte plus de 200 composés couplés par environ 2000 réactions (Venot et al., 2015).

Nous ferons ici la distinction entre précision d'un réseau chimique et sa complétude. En effet, la complexification des réseaux chimiques ne doit pas être forcément associée à une augmentation de leur précision. Nous allons maintenant présenter plusieurs travaux effectués, entre autre, au sein du Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux et qui ont mené au réseau chimique utilisé dans ce travail.

	Nombre de composés	Nombre de réactions
Gladstone et al. (1996) (Jupiter)	39	194
Ollivier et al. (2000b) (Saturne)	46	211
Moses et al. (2000a,b) (Saturne)	62	431
Moses et al. (2005) (Jupiter)	66	501
Dobrijevic et al. (2010) (Neptune)	75	431

Table 1.5 – Caractéristiques générales de quelques réseaux chimiques des planètes géantes présents dans la littérature.

1.7.1 Chimie des neutres dans les atmosphères planétaires : méthodologie

L'ensemble des équations qui gouvernent l'évolution des concentrations des espèces chimiques est un système non-linéaire couplé. Tout ceci forme donc un système d'équations très sensibles aux paramètres qui couplent ces équations entre elles. Une modification de ces paramètres pourrait avoir un impact important sur le résultat final. Stolarski et al. (1978) ont montré, dans le cadre de l'étude de l'ozone stratosphérique terrestre, qu'une modification des constantes cinétiques pouvait affecter sensiblement les résultats du modèle. L'effet induit par la variation de ces constantes cinétiques a pu être évalué en utilisant une procédure Monte-Carlo, dans laquelle les valeurs de toutes les constantes cinétiques sont tirées de manière aléatoire à chaque nouvelle simulation. Thompson and Stewart (1991) et Stewart and Thompson (1996) étendirent cette étude à la troposphère terrestre et mirent en place des calculs de corrélation permettant d'estimer les réactions chimiques les plus critiques vis-à-vis de la précision des résultats. Les imprécisions de ces réactions chimiques résident dans la valeur des constantes de vitesse, car elles sont entachées d'une erreur expérimentale, pour peu que celles-ci aient été mesurées. Lorsqu'elles sont théoriquement calculées, ces incertitudes sont fixées de façon arbitraire suivant une loi log-normale.

Ces calculs de propagation d'incertitudes furent introduits dans le contexte de la photochimique des planètes géantes par Dobrijevic and Parisot (1998); Dobrijevic et al. (2003, 2010), puis à Titan par Hébrard et al. (2006); Hébrard et al. (2007) et Dobrijevic et al. (2008). Ces auteurs mirent en place une méthodologie dont l'objectif a été d'améliorer la précision des prédictions des modèles photochimiques, notamment par une analyse de sensibilité des réactions clés en utilisant les RCCs (coefficient de correlation, ou *Rank Correlation Coefficient*). Ces réactions chimiques clés ont une influence majeure sur la précision globale des résultats (Hébrard et al., 2009; Dobrijevic et al., 2011), car

- elles peuvent être fortement couplées aux composés d'intérêts au sein du réseau ou/et
- l'incertitude sur leur constante cinétique est très importante

L'utilisation de ces coefficients de corrélation permet par conséquent de mettre en évidence les réactions pour lesquelles une étude plus poussée est nécessaire afin d'accroitre la précision des modèles. La méthodologie proposée par l'ensemble de ces travaux est représentée sur la figure 1.22.

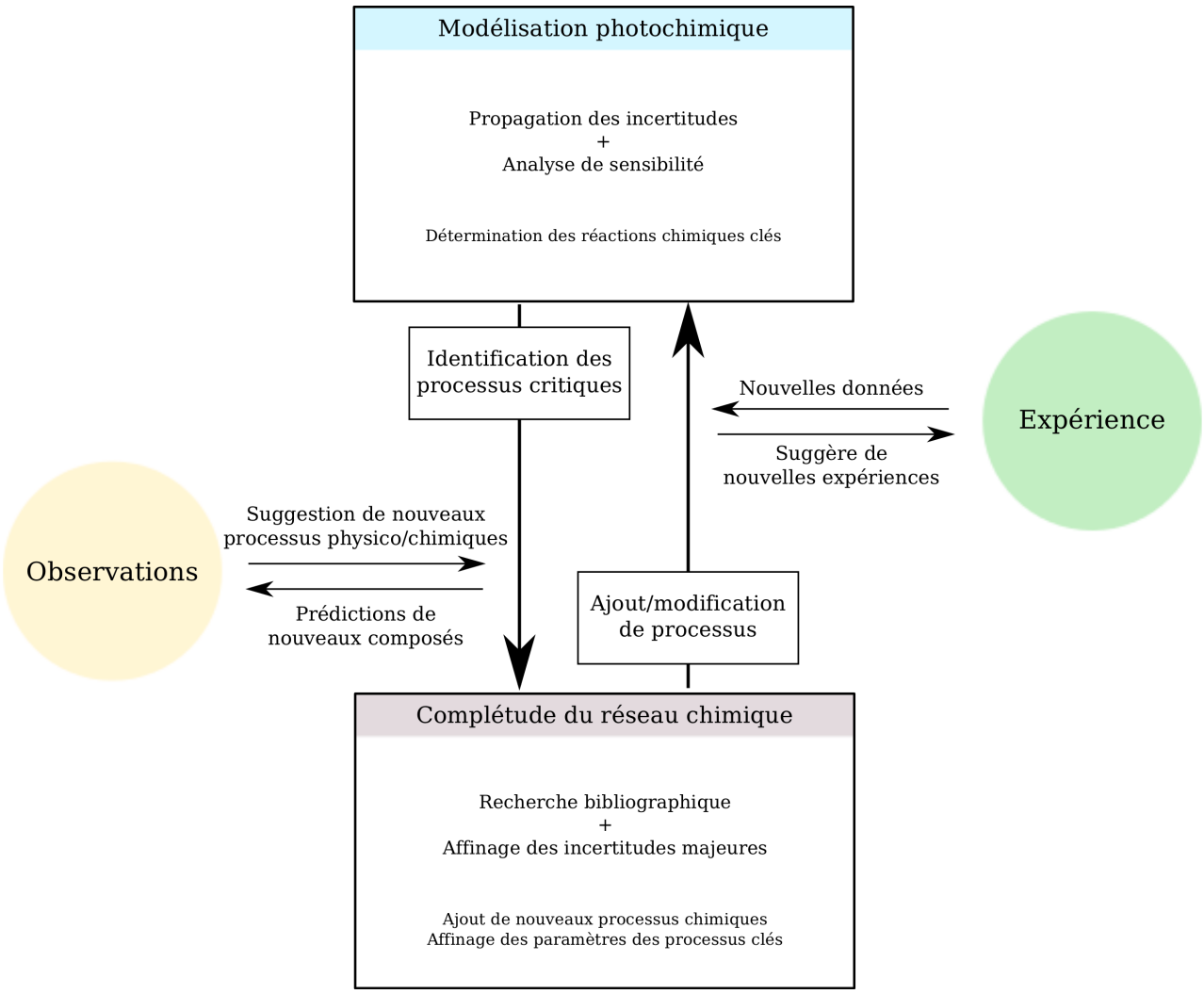

Figure 1.22 – Méthodologie appliquée pour améliorer la prédictibilité des réseaux chimiques.

Cette méthodologie consiste dans un premier temps à identifier les réactions chimiques critiques dans la prédictibilité des modèles photochimiques via des méthodes de propagation d'incertitudes. Ces réactions sont alors étudiées en détail par une recherche bibliographique ou une étude du caractère critique de la réaction (extrapolation basse température, importante incertitude de mesure, chemin chimique manquant). Elle peut aussi suggérer de nouvelles expériences afin d'améliorer la connaissance de ces réactions clés. Cette méthodologie permet au final d'améliorer la prédiction des résultats. Une fois ces tâches effectuées un certain nombre de fois, certains processus physiques peuvent être

contraints car leurs effets sont alors plus faibles que les incertitudes sur la chimie.

Cette méthodologie a été suivie lors de travaux récents. Elle a notamment permis à Dobrijevic et al. (2008) de montrer des phénomènes de bimodalité provenant de la forte incertitude de certaines réactions clés. Les améliorations à la suite de ces travaux ont permis de réduire cette bimodalité (Hébrard et al., 2009) dans un premier temps, pour la faire disparaitre complètement (Hébrard et al., 2013). En particulier, l'amélioration de la chimie des hydrocarbures (Vuitton et al., 2012; Hébrard et al., 2013), a permis de diviser par un facteur 3,4 les incertitudes sur les profils de C_2H_2 dans la basse atmosphère (Hébrard et al., 2009; Loison et al., 2015).

Finalement, les travaux de Dobrijevic et al. (2014) et Loison et al. (2015) représentent, à l'heure actuelle, la version la plus précise de la connaissance de la chimie des hydrocarbures et des azotés dans les atmosphères planétaires. Dans ce dernier travail, nous avons appliqué la méthodologie présentée sur la figure 1.22 afin d'améliorer la chimie des hydrocarbures, des oxygénés et des azotés. À l'aide de ce réseau chimique ainsi revisité, nous avons alors pu calculer les nouvelles incertitudes dans le modèle photochimique de Titan, présenté par Dobrijevic et al. (2014), auquel nous avons couplé le modèle de transfert radiatif 3D présenté dans ce travail en section 1.5.3.

Un des résultats significatifs de l'amélioration de la chimie du HCN/HNC initiée Hébrard et al. (2012) ainsi que la mise à jour du réseau que nous avons effectuée a permis, par exemple, de diviser par un facteur ~ 50 les incertitudes sur les profils de HCN (Hébrard et al., 2007; Loison et al., 2015). Les points critiques ayant permis cette amélioration sont (i) l'identification des nouvelles voies de production n'ayant pas été prises en compte dans la littérature, (ii) la mise en évidence des voies de production majeures et dont la précision faible, (iii) l'amélioration de la précision de ces voies de production, généralement à l'aide d'outils théoriques permettant d'estimer les taux de réactions.

La quantification des paramètres sensibles dans les réseaux chimiques a montré que des réactions chimiques secondaires pouvaient être supprimées du réseau sans en affecter sa prédictibilité sur une sélection d'espèces chimiques. Nous allons maintenant développer ce point.

1.7.2 Réduction du réseau chimique

L'étude de la propagation des incertitudes dans les atmosphères planétaires a permis de quantifier via les coefficients de corrélation de rang (RCCs) l'importance qu'une réaction chimique donnée a sur les résultats du modèle.

Dobrijevic et al. (2011) ont montré que si on s'intéresse seulement à un sous-ensemble de composés du réseau, alors il est possible de supprimer toutes les réactions chimiques dont les RCCs sont en-dessous d'un certain seuil. Ceci, tout en obtenant des profils verticaux pour ces composés qui sont en accord avec les résultats du modèle nominal (en tenant compte de leurs incertitudes).

Ils ont appliqué cette méthodologie pour les composés observés dans l'atmosphère, telles que CH_3, C_2H_2, C_2H_4, C_2H_6. Le nouveau réseau obtenu, dit réseau réduit, compte alors 25 composés et 46 réactions (en incluant les photolyses), tandis que le réseau initial compte 90 espèces et plus de 600 réactions.

À chaque mise à jour significative du réseau chimique, il est important de vérifier que le réseau réduit est toujours adapté, ou chercher éventuellement un nouveau réseau réduit.

Dans le cadre de cette thèse, nous avons appliqué la même procédure de réduction de réseau chimique que celle présentée par Dobrijevic et al. (2011). Cette procédure consiste à calculer les coefficients de corrélation qui lient les vitesses des réactions avec le logarithme des fractions molaires des composés calculées par le modèle photochimique. Les réactions chimiques qui possèdent un coefficient de corrélation faible vont avoir une influence mineure sur les résultats du modèle. Cela signifie que, lorsque ces coefficients de corrélation sont au-dessous d'un certain seuil arbitraire, la réaction chimique considérée ne joue pas un rôle prépondérant dans le calcul des abondances des composés. Plus le seuil utilisé est important, et plus le nombre de réactions qui peuvent être supprimées est important. Le critère a posteriori pour valider un réseau chimique réduit suivant cette méthode est de pouvoir reproduire les abondances de certains composés calculées à l'aide d'un modèle nominal, généralement le modèle qui comprend l'ensemble des réactions et composés avant réduction, tout en restant dans un intervalle de confiance. Cet intervalle de confiance est calculé en effectuant des tirs Monte-Carlo de propagation d'incertitudes sur l'ensemble des constantes de vitesse du réseau nominal.

À partir du réseau chimique publié par Loison et al. (2015), qui contient 124 composés et plus de 1300 réactions (incluant les photolyses), nous avons réduit le réseau chimique à 22 composés et 57 réactions. Ce réseau comprend principalement les hydrocarbures simples (limités aux C_2H_x) ainsi que les composés oxygénés principaux (CO, CO_2, H_2O, H_2CO). Ce réseau réduit est présenté dans Hue et al. (2015a). La figure 1.23 présente les profils verticaux obtenus à l'aide du réseau chimique réduit. Ces profils sont comparés aux profils nominaux et médians ainsi qu'aux largeurs typiques des distributions obtenues à l'aide de la propagation d'incertitude dans le réseau initial. Nous pouvons remarquer que les profils obtenus à l'aide du réseau réduit restent extrêmement proches des profils médians et nominaux du réseau initial, avec des écarts à ces distributions bien en-dessous des écarts typiques liés aux incertitudes.

L'utilisation d'un tel réseau permet de réduire de façon importante les temps de calcul, tout en s'assurant que les résultats sont significativement proches d'un réseau chimique plus complet. Ce réseau réduit ouvre ainsi la porte au développement de modèles photochimiques à plusieurs dimensions.

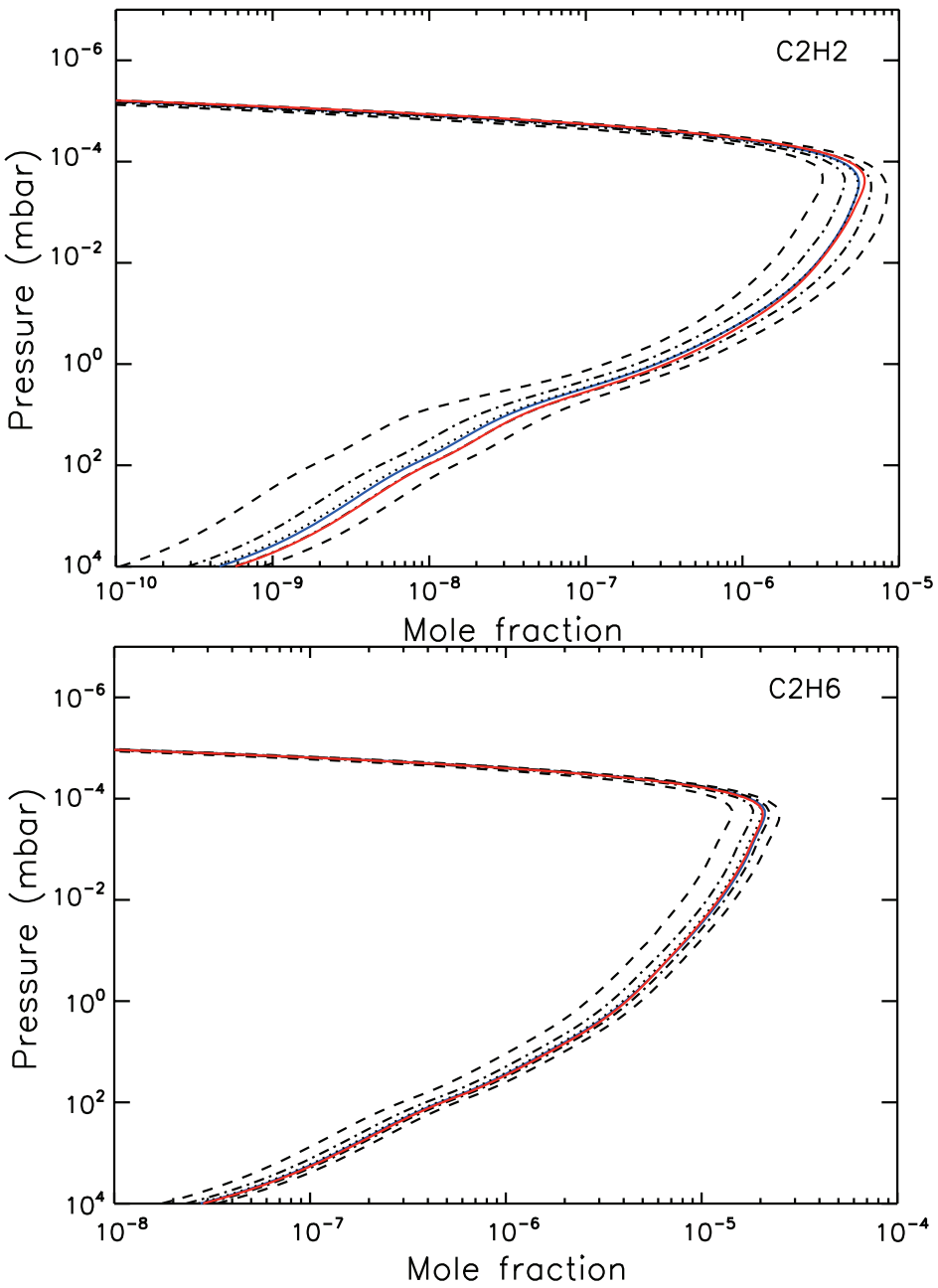

Figure 1.23 – Profils verticaux de C_2H_2 (en haut) et C_2H_6 (en bas) en fonction de la pression dans la stratosphère de Saturne. Les courbes rouges présentent les profils verticaux obtenus à l'aide du réseau réduit, les courbes bleues les profils médians obtenus à l'aide du réseau chimique nominal. La propagation d'incertitude sur le réseau initial permet de définir le profil médian (courbe pointillé) ainsi que les 5^{eme} et 15^{eme} des 20-quantiles des distributions obtenues après 500 tirages Monte-Carlo.

Chapitre 2

Modélisation photochimique de l'atmosphère de Saturne : Effets saisonniers

Sommaire

2.1 Introduction 70
2.2 Modélisation saisonnière de la photochimie de Saturne 72
2.2.1 Variation des paramètres orbitaux 72
2.2.2 Variation saisonnière du flux actinique 74
2.2.3 Champ thermique 77
2.3 Résultats 85
2.3.1 Modélisation photochimique saisonnière : champ thermique uniforme 85
2.3.2 Impact de l'occultation des anneaux sur la photochimie 87
2.3.3 Effet de l'évolution saisonnière de la température sur la photochimie 93
2.3.4 Comparaison avec les observations Cassini/CIRS 99
2.4 Discussion 105
2.4.1 Coefficient de diffusion turbulente 106
2.4.2 Circulation stratosphérique dans Saturne 107
2.4.3 Diffusion latitudinale 108
2.4.4 Chimie ion-neutre 109
2.5 Conclusion / ouverture 109
2.5.1 Variations saisonnières de C_2H_6 et C_2H_2 110
2.5.2 Prise en compte du champ thermique saisonnier 110
2.5.3 Comparaison avec les observations Cassini/CIRS 111
2.5.4 Implication pour les modèles radiatifs 111

2.1 Introduction

Les observations de l'atmosphère de Saturne, effectuées depuis le domaine infrarouge jusqu'au domaine submillimétrique, permettent de sonder les couches de la haute troposphère et de la stratosphère. Les liaisons inter-atomiques de ses composés atmosphériques sont sujettes à des mouvements rotationnels et vibrationnels. Aux transitions rotationnelles des composés vont correspondre des radiations dans le domaine submillimétrique/millimétrique alors que les transitions vibrationnelles se feront principalement dans l'infrarouge.

L'intensité relative des émissions atmosphériques qui proviennent de chacune des molécules sera différente suivant les caractéristiques de celle-ci ainsi que des conditions physiques environnantes. L'étude de ces raies atmosphériques permet de sonder les propriétés physiques des régions dans lesquelles elles sont émises.

Les observations dans l'infrarouge ou le submillimétrique telles que celles, par exemple, effectuées par le satellite ISO (*Infrared Space Observatory*) sont généralement moyennées et sont ainsi représentatives de conditions atmosphériques intégrées sur l'ensemble du disque (voir Moses et al. (2000a) et Fouchet et al. (2009) pour une liste complète des observations). Afin d'analyser et interpréter ces observations, des modèles photochimiques à une dimension ont été développés (Moses et al., 2000a,b). Ces modèles, restreints à la dimension verticale, reproduisent de façon satisfaisante la composition chimique moyenne des principaux composés observés.

Les sondes spatiales, telle que Voyager 1 et 2, ainsi que les récentes observations effectuées depuis le sol ont permis de résoudre spatialement cette planète. Elles ont ainsi permis de cartographier à la fois la température et l'abondance des principaux hydrocarbures dans l'atmosphère de Saturne en fonction de la latitude (Ollivier et al., 2000a; Greathouse et al., 2005; Sinclair et al., 2013).

La sonde Cassini-Huygens, après un lancement depuis Cap Canaveral le 15 Octobre 1997, s'inséra dans le système de Saturne le 1er Juillet 2004. Cette sonde permit, entre autre, d'en cartographier la température troposphérique et stratosphérique en fonction de la latitude sur l'ensemble de la durée de la mission, c'est à dire plus de 10 ans (Howett et al., 2007; Fouchet et al., 2008; Hesman et al., 2009; Guerlet et al., 2009, 2010; Li et al., 2010; Fletcher et al., 2010; Sinclair et al., 2013, 2014; Sylvestre et al., 2015), ce qui correspond à environ un tiers d'une révolution orbitale complète.

Avec ces récentes missions, l'approche classique qui consistait à interpréter les observations moyennées à l'aide de modèles à une dimension atteint ses limites. En effet, les modèles photochimiques à une dimension de Saturne (Moses et al., 2000a,b; Ollivier et al., 2000b) sont maintenant inadaptés pour expliquer les observations résolues de Cassini dépendantes du temps. En parallèle de l'approche photochimique qui consiste à utiliser un réseau chimique le plus complet possible, des modèles de circulation générale de Saturne ont été développés, ou sont en cours de développement (Dowling et al., 2006, 2010; Friedson and Moses, 2012; Guerlet et al., 2014). De tels modèles se focalisent sur une

description la plus complète possible de la dynamique atmosphérique, en négligeant l'aspect chimique tel qu'il est traité dans le cadre des modèles photochimiques. Par ailleurs, les modèles de circulation générale ne simulent qu'une fraction de l'atmosphère, depuis la haute troposphère jusqu'à la basse stratosphère.

Moses and Greathouse (2005) ont développé un modèle photochimique pour Saturne afin d'en étudier les saisons. Ceux-ci furent suivis par Moses et al. (2007) qui développèrent un modèle photochimique à deux dimensions (altitude-latitude) prenant en compte la circulation atmosphérique via une cellule simple de type Hadley, ainsi que du transport diffusif latitudinal. Le modèle développé par Moses and Greathouse (2005) prend en compte les variations des paramètres orbitaux de Saturne ainsi que l'évolution de l'insolation solaire au cours de son orbite. Ils ont montré que les effets saisonniers sur Saturne étaient importants à cause de son obliquité de 26,7° (contre 23,4° pour La Terre). Leur modèle consiste en fait en une somme de modèles photochimiques à une dimension, calculés à diverses latitudes. Il n'inclut néanmoins pas le transport latitudinal, ni le calcul du flux actinique à deux ou 3 dimensions.

L'importante obliquité de Saturne affecte fortement sa température stratosphérique, comme en témoigne les observations de la sonde Cassini (Fletcher et al., 2010). En effet, peu après son insertion orbitale, un gradient de température nord/sud de 40 K a été observé dans la stratosphère moyenne, à un niveau de pression de 1 mbar. Cet important gradient fût encore observé cinq ans plus tard, en 2010, quoique quelque peu atténué. L'évolution saisonnière de la température stratosphérique est donc une donnée importante à prendre en compte dans les modèles photochimiques.

La sensibilité des modèles photochimiques à la température fut prise en compte dans le modèle de Moses and Greathouse (2005) dans un cas ponctuel pour lequel la température fut modifiée seulement à deux latitudes différentes, en accord avec les observations effectuées par Greathouse et al. (2005). Par la suite, le modèle photochimique de Moses and Greathouse (2005) mis à jour par Guerlet et al. (2010) représente une amélioration car il prend en compte à la fois le gradient thermique observé par Fletcher et al. (2007b) ainsi que par Guerlet et al. (2009). L'ensemble de ces modèles photochimiques ne prend pas en compte l'évolution saisonnière de la température, celle-ci étant tenue fixe durant les simulations photochimiques. Finalement, le modèle photochimique à deux dimensions de Moses et al. (2007), bien que prenant en compte les processus de transport advectif à deux dimensions, néglige de façon systématique l'évolution saisonnière de cette température.

À l'heure actuelle, il n'existe pas de modèle photochimique prenant en compte de façon simultanée le forçage saisonnier, le transport méridional ainsi que l'évolution saisonnière de la température. Dans ce chapitre, nous présenterons un tel modèle appliqué à Saturne. Le modèle, écrit à deux dimensions (altitude-latitude), est couplé à un modèle de transfert radiatif à trois dimensions et peut être vu comme le lien indispensable entre les modèles photochimiques à une dimension qui possèdent la chimie la plus complète possible et les GCMs qui étudient la dynamique à trois dimensions. Le but de ce chapitre est de présenter la réponse chimique aux variations saisonnières d'insolation et de température en négligeant pour simplifier le transport à deux dimensions.

Nous présenterons dans un premier temps les paramètres clés à prendre en compte pour la modélisation photochimique de Saturne, à savoir la configuration orbitale de la planète, la prise en compte de l'occultation des rayonnements solaires par ses anneaux, l'évolution saisonnière de la température ainsi que le réseau chimique utilisé. Dans un second temps, nous présenterons l'impact de la prise en compte de l'évolution saisonnière de la température en comparant nos résultats avec un cas classique où la température n'évolue pas avec les saisons. Nous présenterons de même dans cette partie une comparaison avec les observations récentes de Cassini. Enfin, nous conclurons ce deuxième chapitre en rappelant les principaux résultats ainsi que les pistes de travail qui restent à explorer.

2.2 Modélisation saisonnière de la photochimie de Saturne

2.2.1 Variation des paramètres orbitaux

La quantité de rayonnement solaire reçue par l'atmosphère de Saturne à une latitude donnée varie fortement en fonction de la saison à cause de son obliquité et son excentricité. La température stratosphérique de cette planète est régulée par un équilibre radiatif entre l'absorption des rayonnements proche-IR par la molécule de méthane (CH_4) et le refroidissement causé par les émissions des molécules d'éthane (C_2H_6) et d'acétylène (C_2H_2) (Yelle et al., 2001; Greathouse et al., 2008) ainsi que les émissions induites par collision de H_2. Le champ thermique stratosphérique dépend principalement de l'abondance de ces composés ainsi que de leur réponse à la variation saisonnière d'insolation.

Ces émissions infrarouges responsables du refroidissement stratosphérique peuvent augmenter en intensité lorsque :

– la température atmosphérique augmente
– l'abondance des molécules émettrices augmente

Il est ainsi difficile, par la simple observation, de séparer la contribution thermique pure de la contribution liée à l'augmentation d'abondance de la molécule émettrice dans l'infrarouge. La levée de dégénérescence peut s'effectuer en supposant que l'abondance de la molécule de méthane est relativement homogène sur l'ensemble de la planète. Cette molécule peut, par conséquent, être utilisée afin d'estimer cette température (Fletcher et al., 2007b). Une fois la température connue, les abondances des autres molécules émettrices peuvent être obtenues (Greathouse et al., 2005).

Avec l'arrivée de la sonde Cassini dans le système de Saturne, les évolutions de la température atmosphérique ainsi que des principales molécules émettrices depuis la haute troposphère jusqu'à la stratosphère ont pu être mesurées. L'arrivée de cette sonde s'est faite en Juillet 2004, peu de temps après le solstice d'hiver dans l'hémisphère nord (voir la figure 2.1). Depuis lors, Cassini témoigne de l'asymétrie thermique stratosphérique entre ses deux hémisphères suite au passage de la planète à l'un de ses solstices (Flasar et al.,

2005; Howett et al., 2007; Fletcher et al., 2007b). Suite à cela, et durant plus de 10 ans, Cassini a pu observer comment l'hémisphère nord, plongé sous l'ombre des anneaux en 2004 a progressivement émergé de cette ombre et s'est réchauffé tandis qu'à l'inverse, l'hémisphère sud s'est refroidi (Fletcher et al., 2010; Sinclair et al., 2013).

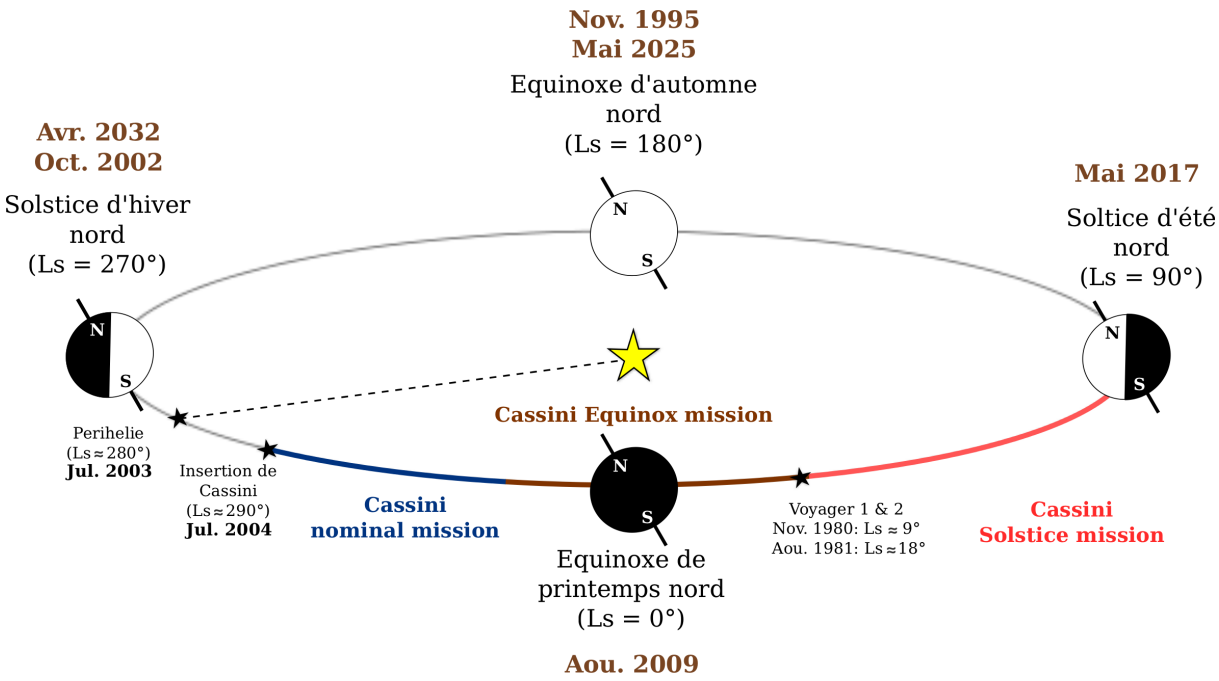

Figure 2.1 – Représentation des saisons sur Saturne. La position de Saturne sur son orbite est repérée par la longitude héliocentrique, L_s. Pour $L_s = 0°$, $L_s = 90°$, $L_s = 180°$, $L_s = 270°$, correspondent l'équinoxe Vernal de Saturne, le solstice d'été, l'équinoxe d'automne et le solstice d'hiver dans l'hémisphère nord. La sonde Cassini est arrivée dans le système saturnien le 1 Juillet 2004, soit peu de temps après son solstice d'hiver dans l'hémisphère nord (Octobre 2002) ainsi que son périhélie (Juillet 2003). Les différentes missions de Cassini sont indiquées sur la figure. Les passages des sondes Voyager 1 et 2 sont indiqués ; ils se sont produits les 12 Novembre 1980 et 26 aout 1981, respectivement.

À cause de l'orbite elliptique de Saturne ainsi que de sa configuration orbitale, l'été dans l'hémisphère sud y est plus court et plus chaud que l'été dans son hémisphère nord. En effet, elle atteint son périhélie peu de temps après le solstice d'été dans l'hémisphère sud. L'implémentation de la dimension saisonnière se fait suivant la procédure décrite dans la partie 1.6. La figure 2.2 présente l'évolution de la déclinaison solaire sur Saturne ainsi que sa distance héliocentrique en fonction de sa position orbitale.

Une fois les spécificités orbitales de Saturne abordées, nous allons présenter comment les flux actiniques sont calculés.

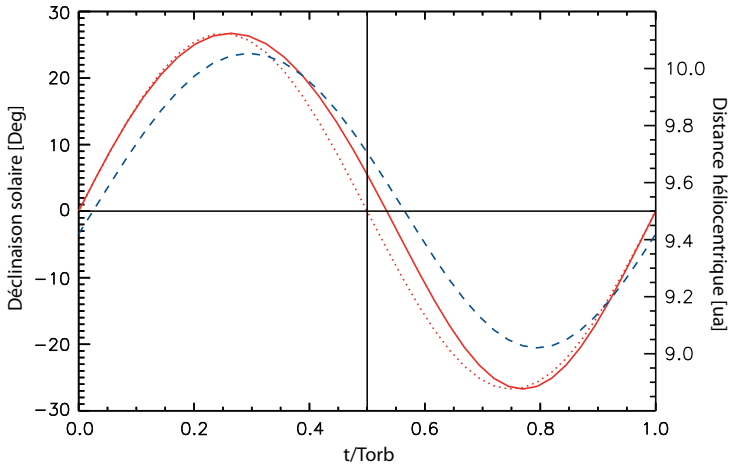

Figure 2.2 – Évolution de la déclinaison solaire sur Saturne en considérant son excentricité $e = 0{,}05415$ (trait plein rouge) ainsi qu'une excentricité nulle (pointillés rouges). L'origine de la fraction orbitale $t/Torb$ est prise à l'équinoxe de printemps dans l'hémisphère nord ($L_s = 0°$). La variation de distance héliocentrique correspondante (tirets bleus) est tracée sur l'échelle verticale de droite. La ligne verticale à $t/Torb = 0{,}5$ correspond au moment ou la planète a effectué la moitié de sa période orbitale. Le deuxième équinoxe se produit plus tard ($t/Torb = 0{,}55$) du fait de la position du périhélie de Saturne proche de son solstice d'hiver dans l'hémisphère nord (à $t/Torb = 0{,}78$).

2.2.2 Variation saisonnière du flux actinique

L'important système d'anneaux de Saturne a pendant longtemps limité l'observation depuis La Terre de son hémisphère plongé sous l'ombre des anneaux à l'approche du solstice (Gillett and Orton, 1975; Rieke, 1975; Tokunaga et al., 1978; Gezari et al., 1989; Ollivier et al., 2000a; Greathouse et al., 2005). Grâce à la sonde Cassini, il a été possible d'observer les caractéristiques physiques de cette région ainsi que de mesurer la structure de ses anneaux.

Son important système d'anneaux est le plus développé du Système solaire. Sa structure est intimement liée à la présence des proches lunes Saturniennes ainsi qu'au champ de gravité de la planète lui-même. En effet, les lunes les plus proches des anneaux A et B (le couple de lunes coorbitantes Janus-Épiméthée ainsi que Mimas) influencent la structure externe de ces anneaux (Colwell et al., 2009). En revanche, l'anneau C n'est proche d'aucune résonance orbitale de lune connue. Hedman and Nicholson (2013) ont montré que c'était le champ de gravité généré par les modes d'oscillation de la structure interne de Saturne qui était responsable des perturbations observées au niveau de cet anneau.

Dans cette étude, nous considérerons seulement les occultations causées par les anneaux les plus denses, c'est à dire A, B et C. À l'aide de l'instrument Cassini/UVIS, Colwell et al. (2010) ont mesuré l'opacité de ces anneaux en analysant les occultations stellaires de plus de 100 étoiles. Les régions d'opacités différentes à l'intérieur de chaque anneau sont séparées et présentées sur la figure 2.3. Leurs valeurs numériques sont données dans le tableau 2.1. La bande passante spectrale de l'instrument UVIS étant 110-190 nm (Esposito et al., 2004), nous considérerons en première approximation que les opacités

sont valides sur l'ensemble du spectre considéré dans le modèle de transfert radiatif UV.

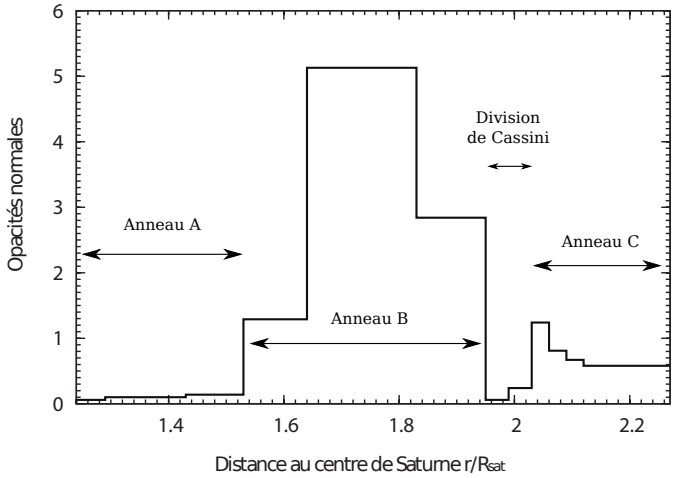

Figure 2.3 – Opacités normales (angle des rayons incidents sur les anneaux de 90°) des anneaux A, B, C ainsi que de la division de Cassini en fonction de la distance par rapport au centre de Saturne. La distance est donnée en fraction du rayon de Saturne.

R_{int}	R_{ext}	Opacités
Anneau C		
1,24	1,29	0,06
1,29	1,43	0,10
1,43	1,53	0,14
Anneau B		
1,53	1,64	1,29
1,64	1,83	5,13
1,83	1,95	2,84
Division de Cassini		
1,83	1,95	0,06
1,83	1,95	0,24
Anneau A		
2,03	2,06	1,24
2,06	2,09	0,81
2,09	2,12	0,67
2,12	2,27	0,58

Table 2.1 – Valeurs des opacités normales utilisées pour les différents anneaux de Saturne, tirées de Guerlet et al. (2014).

La prise en compte de l'opacité des anneaux se fait suivant une procédure géométrique

simple proposée par Guerlet et al. (2014). Elle fut préférée à la procédure de Brinkman and McGregor (1979); Bézard (1986) du fait de sa simplicité à implémenter dans le modèle photochimique. La méthode proposée par Guerlet et al. (2014) vise à calculer si, pour un point quelconque sur Saturne, l'intersection entre le plan des anneaux et la droite, colinéaire à la direction subsolaire, partant de ce point, se situe dans un des anneaux considérés précédemment. Si cette condition est vérifiée, alors le flux solaire arrivant sur ce point est corrigé de la façon suivante :

$$F = F_0 \exp\left(-\frac{\tau}{\sin\theta}\right) \tag{2.1}$$

où F = flux solaire corrigé de l'atténuation des anneaux [photons $\mathrm{cm}^{-2}\,\mathrm{s}^{-1}\,\mathrm{cm}^{-1}$]

F_0 = flux solaire non-corrigé [photons $\mathrm{cm}^{-2}\,\mathrm{s}^{-1}\,\mathrm{cm}^{-1}$]

τ = opacité normale de l'anneau intersectant la ligne de visée

θ = déclinaison du soleil

Le modèle développé ici étant à 2 dimensions, nous avons négligé l'alternance du cycle diurne (voir partie 1.5). Par ailleurs, le modèle photochimique ayant une résolution en latitude finie, nous avons moyenné l'occultation des anneaux sur la taille de la cellule en latitude. Pour chaque cellule en latitude du modèle, celle-ci est sur-échantillonnée d'un facteur 100 sur la largeur de la cellule en latitude considérée. L'occultation du flux solaire incident est alors calculée pour chacun de ces 100 sous-échantillons. Une fois ceci effectué, la moyenne résultante de l'occultation de ces sous-échantillons est prise comme valeur pour la latitude considérée. Notons ici que nous utiliserons un angle minimum de 5° lors du calcul de l'atténuation du flux incident par les anneaux afin de s'affranchir de la divergence de l'argument de la fonction exponentielle de l'équation 2.1 à l'approche de l'équinoxe, i.e. lorsque θ tend vers 0.

La figure 2.4 représente les évolutions saisonnières des flux actiniques moyens journaliers ainsi que des insolations moyennes journalières en fonction de la latitude et de la longitude héliocentrique, et ceci avec et sans occultation des anneaux. Ces flux actiniques et insolations sont représentatifs des valeurs en haut de l'atmosphère de Saturne, à l'altitude maximale considérée dans le modèle, et ont été calculés en utilisant une constante solaire de 14,97 $\mathrm{W\,m}^{-2}$, pour une meilleure comparaison avec Moses and Greathouse (2005).

Le flux actinique, à la différence de l'insolation, représente le flux disponible pour la photochimie. Celui-ci n'inclut pas un effet de surface collectrice telle qu'il est pris en compte pour l'insolation. Les molécules sont en effet considérées ici comme n'ayant pas de surface préférentielle pour l'absorption du rayonnement solaire. L'insolation, en revanche, est corrigée du cosinus de l'angle zénithal, pour tenir compte de la quantité de rayonnement reçu par une surface horizontale. Le gradient de flux solaire reçu entre l'équateur et les régions polaires aux solstices est plus important dans le cas du flux actinique que pour l'insolation.

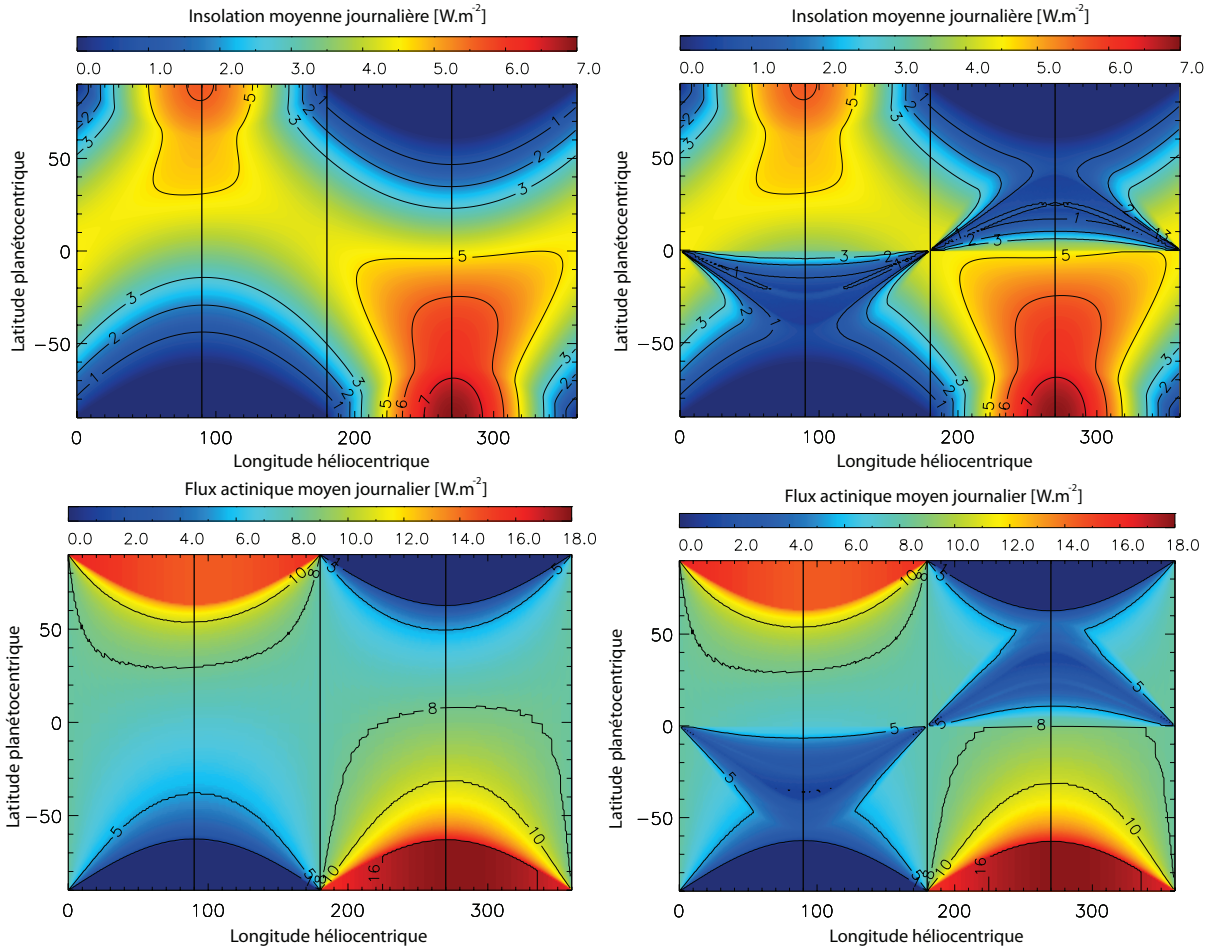

Figure 2.4 – Représentation des insolations moyennes journalières (en haut) et des flux actiniques moyens journaliers (en bas) en fonction de la latitude et de la longitude héliocentrique, en haut de l'atmosphère (à l'altitude maximale du modèle). Les calculs qui incluent l'occultation des anneaux sont présentés sur la droite. Les différents traits verticaux représentent les solstices et équinoxes de Saturne (voir figure 2.1).

2.2.3 Champ thermique

L'observation de l'atmosphère de Saturne par l'instrument Cassini/CIRS (*Composite Infrared Spectrometer*) a permis de mesurer l'évolution de sa température sur plus de 10 ans, soit un tiers de l'orbite saturnienne (Fletcher et al., 2010). Dans le cadre de ce modèle, nous allons évaluer la réponse photochimique résultant de la prise en compte d'un champ thermique saisonnier.

Pour cela et afin de (i) comparer nos résultats avec ceux obtenus par le modèle de Moses and Greathouse (2005) qui considère un champ thermique stationnaire (ii) voir l'effet induit par le forçage saisonnier des températures sur la photochimie, deux cas seront étudiés :

– Cas où le profil de température est uniforme en fonction de la latitude et de la

saison, noté (U)
– Cas où la température varie avec la latitude et la saison, noté (S)

Champ thermique uniforme dans l'espace et le temps

Pour le cas (U), nous avons utilisé un profil thermique observé par Cassini/CIRS à une latitude planétographique de 20°S. Le choix de ce profil thermique a été fait de façon à rester cohérent avec la procédure de réduction du réseau chimique (voir partie 1.7). Les températures sous le niveau de pression de 10^{-5} mbar ont directement été observées par Cassini/CIRS via la bande ν_4 du méthane à 1300 cm^{-1} (Fouchet et al., 2008). Plus haut dans l'atmosphère, Dobrijevic et al. (2011) ont interpolé la température suivant les observations de Smith et al. (1983). Ce profil sera comparé aux autres profils de température saisonniers dans un second temps.

Variation saisonnière de la température stratosphérique

Pour le cas (S), nous avons utilisé le champ thermique théorique calculé à l'aide du modèle radiatif de Greathouse et al. (2008). Ce modèle calcule l'équilibre radiatif saisonnier de l'atmosphère de Saturne en tenant compte du chauffage et du refroidissement atmosphérique par les composés chimiques majeurs, i.e. H_2, CH_4, C_2H_2, C_2H_6. Les profils verticaux d'abondance de ces composés proviennent d'observations Cassini/CIRS (Guerlet et al., 2009) à une latitude planétographique de 45°S. Ces abondances observées sont considérés homogènes en latitude et longitude héliocentrique. Ce choix peut être discutable et nous développerons plus ce point-ci dans le chapitre 3. De façon similaire au modèle photochimique présenté ici, le modèle radiatif prend en compte les variations des paramètres orbitaux de Saturne : distance héliocentrique, excentricité de l'orbite ou encore variation saisonnière de la déclinaison solaire. Ce modèle prend aussi en compte l'occultation des anneaux de Saturne. Nous présenterons ce modèle de façon plus détaillée dans la partie 3.2.2

La figure 2.5 représente l'évolution des champs de température prédite par le modèle radiatif à 0,1 mbar et 10 mbar. L'asymétrie dans les températures polaires à 0,1 mbar entre le solstice d'été dans l'hémisphère nord ($L_s = 90°$) et le solstice d'été dans l'hémisphère sud ($L_s = 270°$) est causée par l'excentricité de l'orbite de Saturne. Comme le périhélie de Saturne survient peu de temps après le solstice d'été dans l'hémisphère sud ($L_s = 270°$), le flux solaire reçu en ce point est plus important que celui reçu à $L_s = 90°$. Les protubérances bleues observées à 0,1 mbar dans les hémisphères d'hiver (sud autour de $L_s = 90°$ et nord autour de $L_s = 270°$) et qui s'étendent depuis l'équateur jusqu'à 40° dans ces hémisphères d'hiver, sont causées par l'occultation des anneaux. À 10 mbar, l'inertie thermique de l'atmosphère provoque un retard temporel dans l'évolution des températures par rapport à 0,1 mbar. Le décalage des pics de température aux pôles lors des solstices est de 50° en longitude héliocentrique.

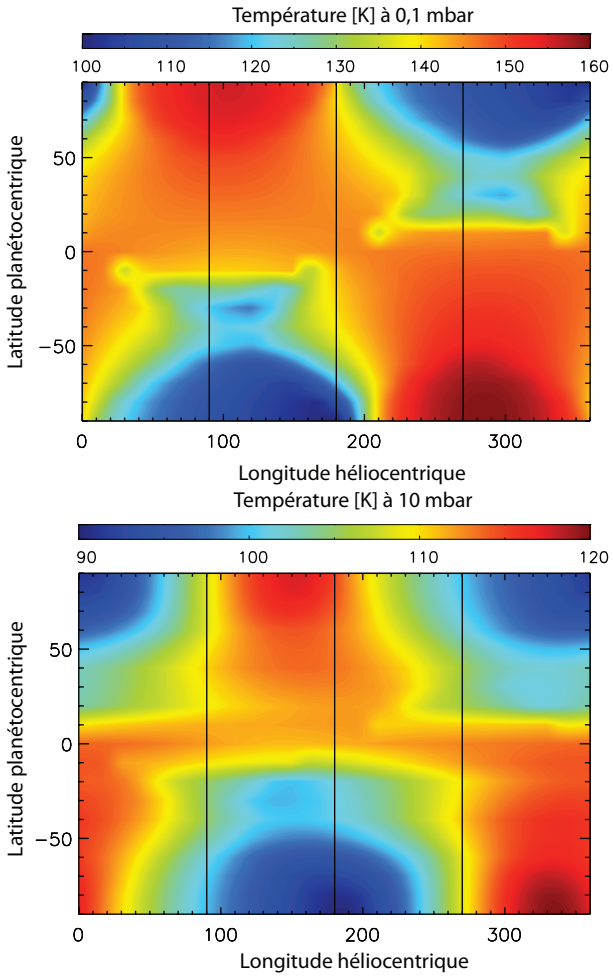

Figure 2.5 – Représentation des températures à 0,1 mbar (en haut) et 10 mbar (en bas) en fonction de la latitude planétocentrique et de la longitude héliocentrique calculées par le modèle d'équilibre radiatif de Greathouse et al. (2008). Les différents traits pleins noirs verticaux représentent les solstices et équinoxes de Saturne (voir figure 2.1)

Les températures prédites par le modèle de Greathouse et al. (2008) sont calculées de 500 mbar à 10^{-3} mbar. Ce modèle a pour but premier de reproduire l'évolution des températures stratosphériques à partir d'une composition chimique donnée. Ainsi, seules les températures stratosphériques de 10 mbar à 10^{-3} mbar sont valides. À de plus faibles altitudes, le modèle n'inclut pas l'absorption causée par les aérosols et ne prend pas en compte l'ajustement convectif. Les températures ainsi prédites s'écartent des observations de Cassini d'environ 5-15 K. Sous le niveau de pression de 500 mbar, les températures sont extrapolées suivant un gradient adiabatique sec, via une chaleur spécifique de $c_p = 10658$ J kg^{-1} K^{-1} (Irwin, 2006) ainsi qu'un champ de gravité ayant une dépendance latitudinale (voir partie 1.4.5). Au-dessus de 10^{-3} mbar, lorsque les effets hors-équilibre thermodynamique commencent à dominer, la température donnée par le modèle est prise constante. Nous négligerons la présence d'une thermosphère au dessus de la stratosphère du modèle.

Le niveau de pression inférieur du modèle photochimique a été défini afin d'assurer que l'opacité de chaque longueur d'onde en haut de l'atmosphère soit très inférieure à 1.

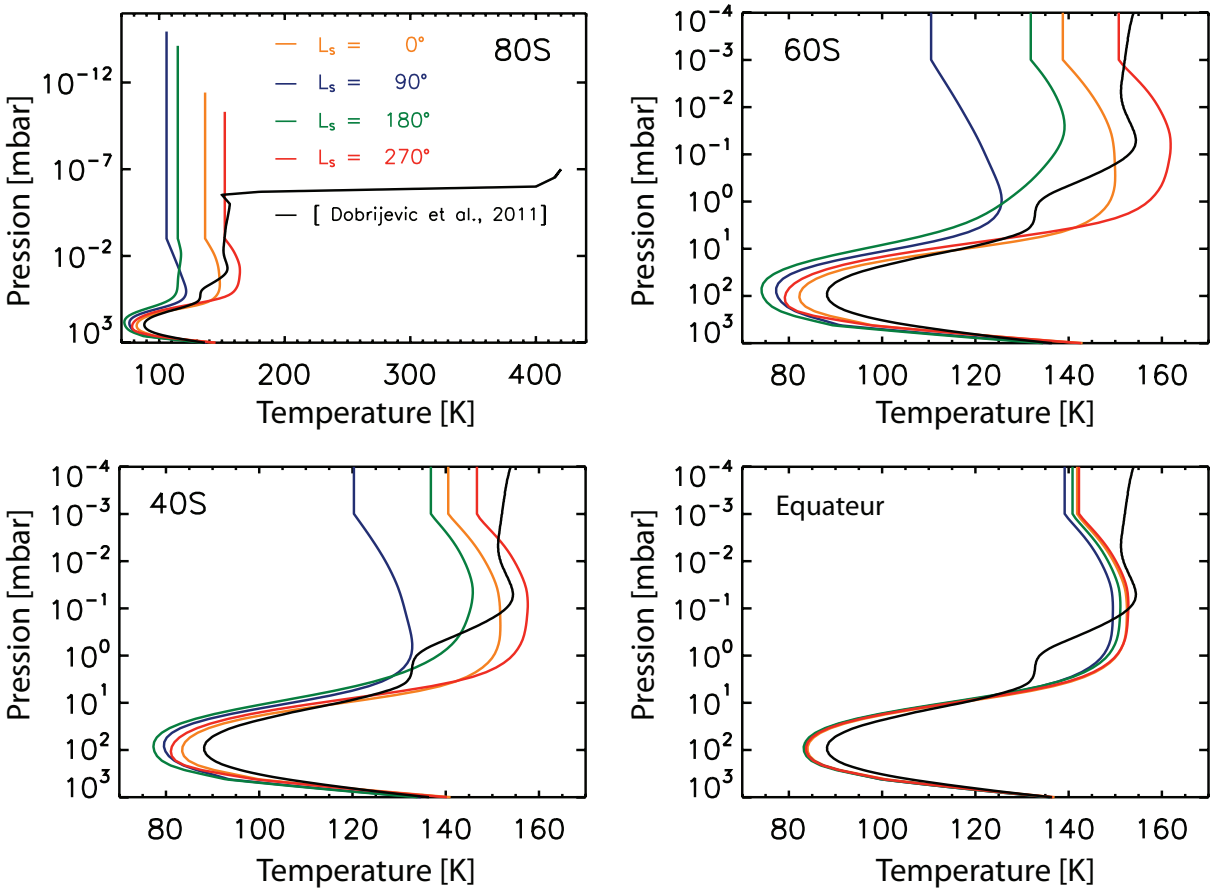

Figure 2.6 – Profils thermiques utilisés dans le modèle photochimique. En noir : profil observé par Cassini/CIRS (Fouchet et al., 2008), utilisé pour réduire le premier réseau chimique de Saturne par Dobrijevic et al. (2011) et correspondant ici au cas (U). En couleur : profils thermiques issus du modèle de Greathouse et al. (2008), pris constants au dessus du niveau de pression de 10^{-6} mbar et présentés aux différents solstices et équinoxes de Saturne (voir figure 2.1). Ces profils constituent le cas (S) de cette étude. Ils sont présentés à 4 latitudes planétocentriques différentes : 80°S (en haut à gauche), 60°S (en haut à droite), 40°S (en bas à gauche) et l'équateur (en bas à droite). Seul le graphique à 80°S présente ces profils sur l'ensemble de la gamme de pression considérée (voir texte).

En pratique, on distingue deux façons de gérer l'évolution thermique dans les modèles photochimiques :

- Soit la grille en altitude est prise constante et seule la pression varie avec la température
- Soit la grille en pression est prise constante et la grille en altitude varie avec la température (utilisé par Agúndez et al. (2014) par exemple)

Les approches sont cohérentes l'une avec l'autre, nous avons préféré utiliser la première car le modèle photochimique a été écrit en altitude-latitude. À partir des grilles en

pression-température du modèle de Greathouse et al. (2008), les grilles en altitude correspondantes ont été reconstruites par résolution de l'équation hydrostatique (voir partie 1.4.5). Une grille unique en altitude est alors définie, sur laquelle sont interpolées les grilles en température et pression du modèle radiatif.

Dans ce travail nous avons donc choisi de travailler avec une grille en altitude commune à toutes les latitudes planétocentriques et qui commencent à une origine commune (z = 58210 km (Guillot, 2005) et P = 1 bar). Ainsi, lorsque la température atmosphérique change, la grille de pression change également. Afin d'assurer la conservation de la matière, les fractions molaires des composés sont interpolées sur la nouvelle grille en pression.

Réseau chimique

Le réseau chimique utilisé dans ce travail est un réseau réduit que nous avons obtenu en suivant la méthodologie décrite dans la partie 1.7. Le réseau nominal utilisé avant la réduction est celui présenté par Loison et al. (2015) pour l'atmosphère de Titan. Celui-ci inclut initialement 124 composés, 1141 réactions ainsi que 172 photodissociations. Les composés chimiques sélectionnés dans la construction du réseau sont ceux observés par la sonde Cassini/CIRS et qui sont les principaux responsables de la structure thermique de Saturne : CH_4, C_2H_2 et C_2H_6.

Les principaux composés oxygénés observés dans l'atmosphère de Saturne (H_2O, CO, CO_2) ont aussi été inclus dans le réseau réduit. Nous serons donc en mesure, à moyen terme, de modéliser les distributions observées par Herschel des composés oxygénés (Hartogh et al., 2009, 2011).

Le réseau obtenu contient à présent 22 composés (listés dans la table 2.2), 33 réactions ainsi que 24 photodissociations. Les réactions chimiques du réseau sont listées dans la table 2.3, et les photodissociations dans la table 2.4.

Table 2.2 – Composés chimiques du réseau réduit de Saturne

He ; H ; H_2
CH ; C ; $^1CH_2$; $^3CH_2$; CH_3 ; CH_4
C_2H ; C_2H_2 ; C_2H_3 ; C_2H_4 ; C_2H_5 ; C_2H_6
O^3P ; O^1D ; OH ; H_2O
CO ; CO_2 ; H_2CO

Table 2.3 – Liste des réactions du réseau réduit (voir Loison et al. (2015) pour les références). $k(T) = \alpha \times (T/300)^{\beta} \times \exp(-\gamma/T)$ en cm^3 molecule^{-1} s^{-1} ou cm^6 molecule^{-1} s^{-1}. $k_{adduct} = (k_0\ [\mathrm{M}]\ F + k_r)\ k_\infty/k_0[\mathrm{M}] + k_\infty$ avec $\log(F) = \log(F_c)/1 + [\log(k_0[\mathrm{M}] + k_{capture})/N]^2$, $F_c = 0.60$ et $N = 1$. Voir Hébrard et al. (2013) pour les détails sur le modèle semi-empirique.

	Reactions		Constantes de vitesse cinétique
R1	H + CH	→ C + H_2	$1.24 \times 10^{-10} \times (T/300)^{0.26}$
R2	H + $^3CH_2$	→ CH + H_2	$2.2 \times 10^{-10} \times (T/300)^{0.32}$
R3	H + $^3CH_2$	→ CH_3	$k_0 = 3.1 \times 10^{-30} \times \exp(457/T)$ $k_\infty = 1.5 \times 10^{-10}$ $k_r = 0$
R4	H + CH_3	→ CH_4	$k_0 = 8.9 \times 10^{-29} \times (T/300)^{-1.8} \times \exp(-31.8/T)$ $k_\infty = 3.2 \times 10^{-10} \times (T/300)^{0.133} \times \exp(-2.54/T)$ $k_r = 1.31 \times 10^{-16} \times (T/300)^{-1.29} \times \exp(19.6/T)$
R5	H + C_2H_2	→ C_2H_3	$k_0 = 2.0 \times 10^{-30} \times (T/300)^{-1.07} \times \exp(-83.8/T)$ $k_\infty = 1.17 \times 10^{-13} \times (T/300)^{8.41} \times \exp(-359/T)$ $k_r = 0$
R6	H + C_2H_3	→ C_2H_2 + H_2	6.0×10^{-11}
R7	H + C_2H_3	→ C_2H_4	$k_0 = 3.47 \times 10^{-27} \times (T/300)^{-1.3}$ $k_\infty = 1.0 \times 10^{-10}$ $k_r = 0$
R8	H + C_2H_4	→ C_2H_5	$k_0 = 1.0 \times 10^{-29} \times (T/300)^{-1.51} \times \exp(-72.9/T)$ $k_\infty = 6.07 \times 10^{-13} \times (T/300)^{-5.31} \times \exp(174/T)$ $k_r = 0$
R9	H + C_2H_5	→ C_2H_6	$k_0 = 2.0 \times 10^{-28} \times (T/300)^{-1.5}$ $k_\infty = 1.07 \times 10^{-10}$ $k_r = 0$
R10	H + C_2H_5	→ CH_3 + CH_3	$k_0 = k_\infty - k_{adduct}$
R11	C + H_2	→ $^3CH_2$	$k_0 = 7.0 \times 10^{-32} \times (T/300)^{-1.5}$ $k_\infty = 2.06 \times 10^{-11} \times \exp(-57/T)$ $k_r = 0$
R12	CH + H_2	→ CH_3	$k_0 = 6.2 \times 10^{-30} \times (T/300)^{-1.6}$ $k_\infty = 1.6 \times 10^{-10} \times (T/300)^{-0.08}$ $k_r = 0$
R13	CH + CH_4	→ C_2H_4 + H	$1.05 \times 10^{-10} \times (T/300)^{-1.04} \times \exp(-36.1/T)$
R14	$^1CH_2$ + H_2	→ $^3CH_2$ + H_2	$1.6 \times 10^{-11} \times (T/300)^{-0.9}$
R15	$^1CH_2$ + H_2	→ CH_3 + H	$8.8 \times 10^{-11} \times (T/300)^{0.35}$
R16	$^3CH_2$ + H_2	→ CH_3 + H	$8.0 \times 10^{-12} \times \exp(-4500/T)$
R17	$^3CH_2$ + CH_3	→ C_2H_4 + H	1.0×10^{-10}
R18	$^3CH_2$ + C_2H_3	→ C_2H_2 + CH_3	3.0×10^{-11}
R19	$^3CH_2$ + C_2H_5	→ C_2H_4 + CH_3	3.0×10^{-11}
R20	CH_3 + CH_3	→ C_2H_6	$k_0 = 1.8 \times 10^{-26} \times (T/300)^{-3.77} \times \exp(-61.6/T)$ $k_\infty = 6.8 \times 10^{-11} \times (T/300)^{-0.359} \times \exp(-30.2/T)$ $k_r = 0$
R21	C_2H + H_2	→ C_2H_2 + H	$1.2 \times 10^{-11} \times \exp(-998/T)$
R22	C_2H + CH_4	→ C_2H_2 + CH_3	$1.2 \times 10^{-11} \times \exp(-491/T)$
R23	C_2H_3 + H_2	→ C_2H_4 + H	$3.45 \times 10^{-14} \times (T/300)^{2.56} \times \exp(-2530/T)$
R24	C_2H_3 + CH_4	→ C_2H_4 + CH_3	$2.13 \times 10^{-14} \times (T/300)^{4.02} \times \exp(-2750/T)$
R25	O(^{3}P) + CH_3	→ CO + H_2 + H	2.9×10^{-11}
R26	O(^{3}P) + CH_3	→ H_2CO + H	1.1×10^{-10}
R27	O(^{3}P) + C_2H_5	→ OH + C_2H_4	3.0×10^{-11}
R28	O(^{1}D) + H_2	→ OH + H	1.1×10^{-10}
R29	OH + H_2	→ H_2O + H	$2.8 \times 10^{-12} \times \exp(-1800/T)$
R30	OH + CH_3	→ H_2O + $^1CH_2$	3.2×10^{-11}
R31	OH + CH_3	→ H_2CO + H_2	8.0×10^{-12}
R32	OH + CO	→ CO_2 + H	1.3×10^{-13}
R33	H_2CO + C	→ CO + $^3CH_2$	4.0×10^{-10}

Table 2.4 – Processus de photodissociation (voir Loison et al. (2015) pour les références)

	Photodissociations	
R34	$OH + h\nu$	$\rightarrow O(^1D) + H$
R35	$H_2O + h\nu$	$\rightarrow H + OH$
R36		$\rightarrow H_2 + O(^1D)$
R37		$\rightarrow H + H + O(^3P)$
R38	$CO + h\nu$	$\rightarrow C + O(^3P)$
R39	$CO_2 + h\nu$	$\rightarrow C + O(^1D)$
R40		$\rightarrow CO + O(^3P)$
R41	$H_2 + h\nu$	$\rightarrow H + H$
R42	$CH_4 + h\nu$	$\rightarrow CH_3 + H$
R43		$\rightarrow {}^1CH_2 + H + H$
R44		$\rightarrow {}^1CH_2 + H2$
R45		$\rightarrow {}^3CH_2 + H + H$
R46		$\rightarrow CH + H_2 + H$
R47	$CH_3 + h\nu$	$\rightarrow {}^1CH_2 + H$
R48	$C_2H_2 + h\nu$	$\rightarrow C_2H + H$
R49	$C_2H_3 + h\nu$	$\rightarrow C_2H_2 + H$
R50	$C_2H_4 + h\nu$	$\rightarrow C_2H_2 + H_2$
R51		$\rightarrow C_2H_2 + H + H$
R52		$\rightarrow C_2H_3 + H$
R53	$C_2H_6 + h\nu$	$\rightarrow C_2H_4 + H_2$
R54		$\rightarrow C_2H_4 + H + H$
R55		$\rightarrow C_2H_2 + H_2 + H_2$
R56		$\rightarrow CH_4 + {}^1CH_2$
R57		$\rightarrow CH_3 + CH_3$

Coefficient de diffusion turbulente

Le coefficient de diffusion turbulente utilisé dans ce travail est identique à celui de Dobrijevic et al. (2011). Ce coefficient est présenté sur la fig 2.7 où il est comparé au coefficient de diffusion moléculaire du méthane. Il est défini comme :

- pour $p \leq 7 \times 10^{-4}\,\mathrm{mbar}$
  $K_{zz} = 1{,}3 \times 10^7\,\mathrm{cm^2\,s^{-1}}$
- pour $70\,\mathrm{mbar} \leq p \leq 7 \times 10^{-4}\,\mathrm{mbar}$
  $K_{zz}(p) = 1{,}3 \times 10^7 \left(\frac{7 \times 10^{-4}}{p}\right)^{0.82279}\,\mathrm{cm^2\,s^{-1}}$
- pour $p \geq 70$ mbar
  $K_{zz} = 1 \times 10^3\,\mathrm{cm^2\,s^{-1}}$

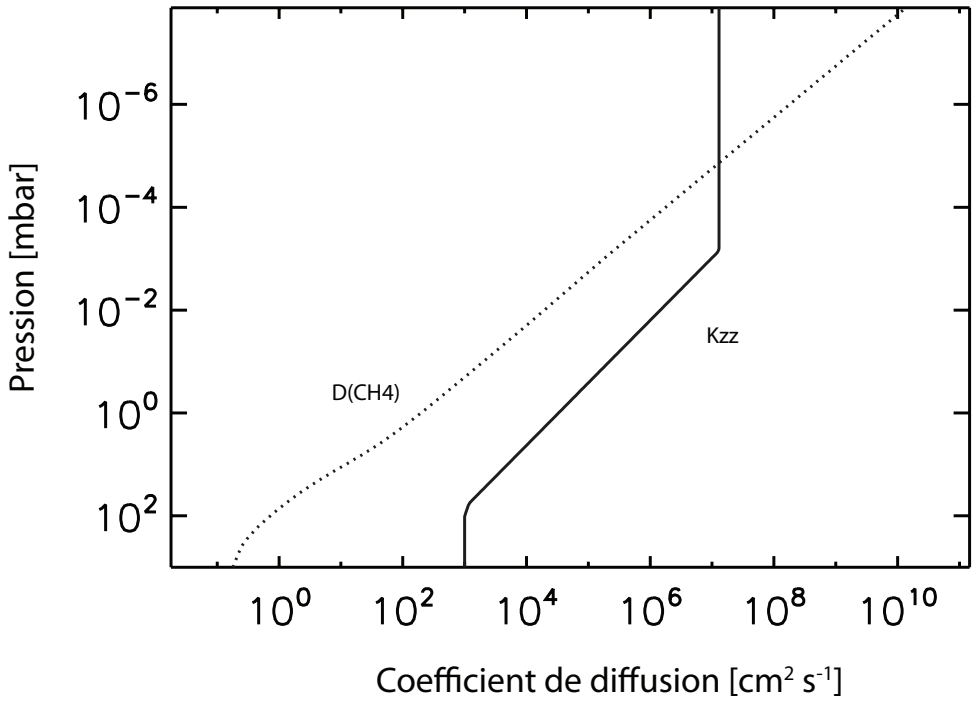

Figure 2.7 – Coefficient de diffusion turbulente K_{zz} (trait plein) et coefficient de diffusion de diffusion moléculaire du méthane (pointillés) utilisé dans cette étude.

Comparaison avec Moses and Greathouse (2005)

La figure 2.8 compare les résultats du modèle photochimique saisonnier de Saturne avec ceux du modèle de Moses and Greathouse (2005). Les principales différences sont notées sur le profils de CH_4 dans la stratosphère, de 1 mbar à 10^{-4} mbar. Plusieurs origines peuvent causer ces différences. Tout d'abord, les profils de K_{zz} utilisés dans ces deux études ne sont pas strictement identiques, ce qui provoque des écarts au niveau de l'homopause. De plus, les schémas numériques utilisés pour coder la partie advective de la diffusion moléculaire dans les deux modèles sont très probablement différents. En effet, le schéma numérique utilisé dans le modèle photochimique du Caltech/JPL (Allen et al., 1981), sur lequel est basé le modèle de Moses and Greathouse (2005) n'est pas détaillé. Les profils de C_2H_2 et C_2H_6 sont en relativement bon accord. Les principales différences dans les profils verticaux de ces deux composés peuvent provenir des différences dans les profils de K_{zz} dans la stratosphère moyenne. Il est ensuite difficile de comparer plus en détails les profils de ces deux composés car le modèle de Moses and Greathouse (2005) utilise un réseau chimique plus complet (66 espèces chimiques couplées par 501 réactions) que le réseau réduit utilisé ici, et le schéma réactionnel est différent.

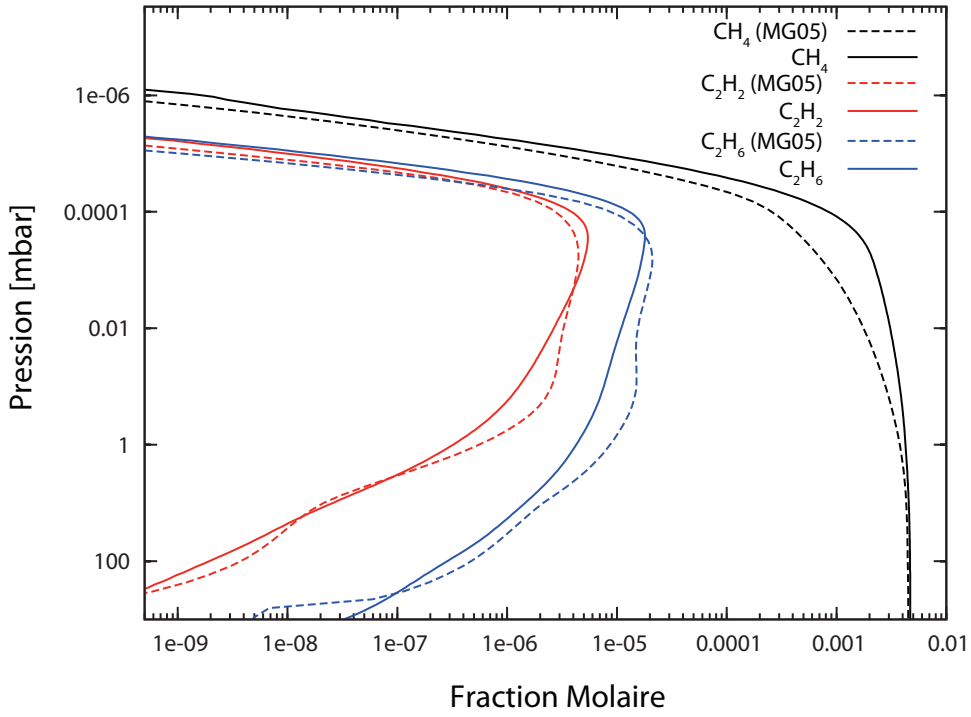

Figure 2.8 – Comparaison entre les profils verticaux de CH_4 (noir), C_2H_2 (rouge) et C_2H_6 (bleu) prédits par le modèle de Moses and Greathouse (2005), en pointillés, et le modèle développé ici, en traits pleins. Les sorties des deux modèles sont présentées à une latitude de 40° et au moment de l'équinoxe de printemps dans l'hémisphère nord ($L_s = 0°$). Les résultats du modèle photochimique saisonnier développé ici sont présentés dans le cas (U).

2.3 Résultats

Dans cette partie, nous décrivons d'abord les résultats de l'étude qui inclut un champ thermique uniforme, c'est à dire le cas (U). Ensuite, nous présenterons l'impact de la présence d'anneaux sur la photochimie saisonnière. Nous exposerons alors les différences observées sur la photochimie lorsqu'un champ thermique saisonnier est pris en compte, soit le cas d'étude (S). Enfin, nous confronterons les résultats obtenus avec les observations de Cassini/CIRS publiées par Guerlet et al. (2009)

2.3.1 Modélisation photochimique saisonnière : champ thermique uniforme

La photolyse des principaux composés par les photons solaires UV dans l'atmosphère de Saturne initie une chimie complexe. De nombreux radicaux, ayant une grande réactivité, sont produits. La chimie générée par ces radicaux conduit à la production d'hydrocarbures tels que C_2H_2, C_2H_4, C_2H_6. Nous focaliserons principalement notre attention sur

C_2H_6 et C_2H_2 car ce sont les molécules les plus abondantes et qui, de plus, jouent un rôle fondamental dans la régulation thermique de la stratosphère (voir chapitre 3).

Les évolutions saisonnières des profils verticaux de CH_4, C_2H_6 et C_2H_2 sont présentées sur la figure 2.9.

Méthane (CH_4)

Le méthane (figure 2.9, gauche) ne présente pas de fortes variations saisonnières car se sont les processus de diffusion turbulente et moléculaire qui contrôlent principalement sa distribution verticale (Romani and Atreya, 1988).

Éthane (C_2H_6)

L'éthane (figure 2.9, milieu) présente une importante variabilité saisonnière à des pressions inférieures à 0,1 mbar. Les figures 2.10 et 2.11 présentent respectivement les taux de production et de perte des principales réactions menant à la production ou à la destruction chimique de C_2H_6. Ces taux sont présentés pour trois latitudes différentes (80°S, 40°S et à l'équateur) ainsi que pour les différents solstices et équinoxes ($L_s = 0°$, $L_s = 90°$, $L_s = 180°$ et $L_s = 270°$, voir figure 2.1).

La forme du profil vertical de C_2H_6 est principalement contrôlée par la réaction ($CH_3 + CH_3 \xrightarrow{M} C_2H_6$) dans la stratosphère, à des pressions inférieures à 10 mbar. Le méthyle (CH_3) est produit via la photolyse du méthane, aux niveaux de pression de 10^{-4} mbar. Le pic de production de C_2H_6 se situe aussi à 10^{-4} mbar. Par ailleurs, C_2H_6 est principalement détruit par photolyse ($C_2H_6 + h\nu \rightarrow C_2H_4 + H_2$) et ($C_2H_6 + h\nu \rightarrow C_2H_2 + H_2 + H_2$). Lors du solstice d'été dans l'hémisphère nord ($L_s = 90°$), les taux de production de C_2H_6 à 80°S deviennent très faibles à cause de la nuit polaire à cette latitude et à ce moment de l'année.

Nous notons une asymétrie dans les taux de production et de perte de C_2H_6 à 80°S entre les deux équinoxes ($L_s = 0°$ et $L_s = 180°$). En effet, ces taux à 10^{-2} mbar sont plus importants à $L_s = 0°$ qu'à $L_s = 180°$. Cette asymétrie est causée par le fait qu'à l'équinoxe de printemps dans l'hémisphère nord ($L_s = 0°$), la latitude 80°S sort juste de la saison d'été. Ainsi, C_2H_6 et CH_3 sont plus abondants au niveau de pression de 10^{-2} mbar à $L_s = 0°$ qu'à $L_s = 180°$ ce qui, par conséquent, provoque des taux de production et de perte plus importants.

À cause de la faible variation annuelle d'insolation au niveau de l'équateur, les taux de production de C_2H_6 à cette latitude présentent seulement des variations de 10% au cours de l'année.

En-dessous de 0,1 mbar, là où les variations saisonnières ne sont plus notables, C_2H_6 est à l'équilibre diffusif et son profil vertical est contrôlé par la diffusion des molécules de C_2H_6 produites aux plus faibles niveaux de pression (Zhang et al., 2013). L'amplitude des variations saisonnières augmente avec la latitude car c'est la photolyse du CH_4 qui initie la production du C_2H_6. Ainsi, plus la latitude est importante, plus la variation saisonnière du

flux actinique sera importante, et plus les variations saisonnières des produits de photolyse du CH_4 seront importantes.

Acétylène (C_2H_2)

Bien que les processus de production de l'acétylène (C_2H_2, figure 2.9, droite) soient différents de ceux de C_2H_6, les mêmes variations saisonnières sont observées. Ces variations s'étendent toutefois à des niveaux de pression plus importants : elles sont en effet encore visibles à 1 mbar.

De façon identique à C_2H_6, les figures 2.12 et 2.13 présentent respectivement les taux de production et de perte des principales réactions qui mènent à la production ou à la destruction chimique de C_2H_2.

À 10^{-4} mbar, C_2H_2 est principalement produit par les réactions ($C_2H_4 + h\nu \rightarrow C_2H_2 + H_2$) et ($C_2H_4 + h\nu \rightarrow C_2H_2 + H + H$). Dans la stratosphère moyenne, à 10^{-3} mbar, la réaction ($H + C_2H_3 \rightarrow C_2H_2 + H_2$) domine la production chimique de ce composé. Plus bas dans la stratosphère, de 10^{-2} à 10 mbar, la réaction ($C_2H + H_2 \rightarrow C_2H_2 + H$) devient la principale source de production chimique de C_2H_2.

Dans ce modèle, C_2H_2 est détruit par deux réactions. À des pressions de 10^{-3} mbar, c'est la réaction ($H + C_2H_2 \overset{M}{\rightarrow} C_2H_3$) qui domine la destruction chimique de C_2H_2, alors qu'à des pressions supérieures à 10^{-2} mbar, la réaction de photolyse ($C_2H_2 + h\nu \rightarrow C_2H + H$) vient s'ajouter à la précédente pour dominer la destruction chimique de C_2H_2.

À l'instar de la situation observée pour C_2H_6, les taux des réactions photolytiques qui mènent à la production ou la perte de C_2H_2 deviennent très faibles à 80°S au solstice d'hiver dans cet hémisphère ($L_s = 90°$). De même, les taux de production des réactions qui impliquent les radicaux (CH, C_2H, $^3CH_2$) deviennent nuls à cette latitude et à ce moment de l'année.

L'asymétrie entre les deux équinoxes, précédemment observée pour C_2H_6, est aussi observée dans le cas du C_2H_2. En effet, le taux de production de C_2H_2 à 80°S et 10^{-2} mbar est augmenté d'un facteur 2,4 à $L_s = 0°$ par rapport à $L_s = 180°$.

2.3.2 Impact de l'occultation des anneaux sur la photochimie

Nous avons vu que la présence du système d'anneaux de Saturne provoquait une réduction localisée mais substantielle du flux solaire disponible pour la photochimie, et ce, à des latitudes d'autant plus élevées (jusqu'à 60°) dans l'hémisphère d'hiver, que l'on se rapproche du solstice (cf figure 2.4). La prise en compte de l'occultation des anneaux va réduire la quantité des produits issus de la photolyse du CH_4. Les figures 2.14 représentent respectivement les évolutions de C_2H_6 et C_2H_2 lorsque l'effet de l'occultation des anneaux est pris en compte.

L'impact de l'occultation des anneaux sur la chimie joue seulement un rôle pour des latitudes inférieures à 60° dans l'hémisphère d'hiver. À 10^{-4} mbar, l'impact des anneaux

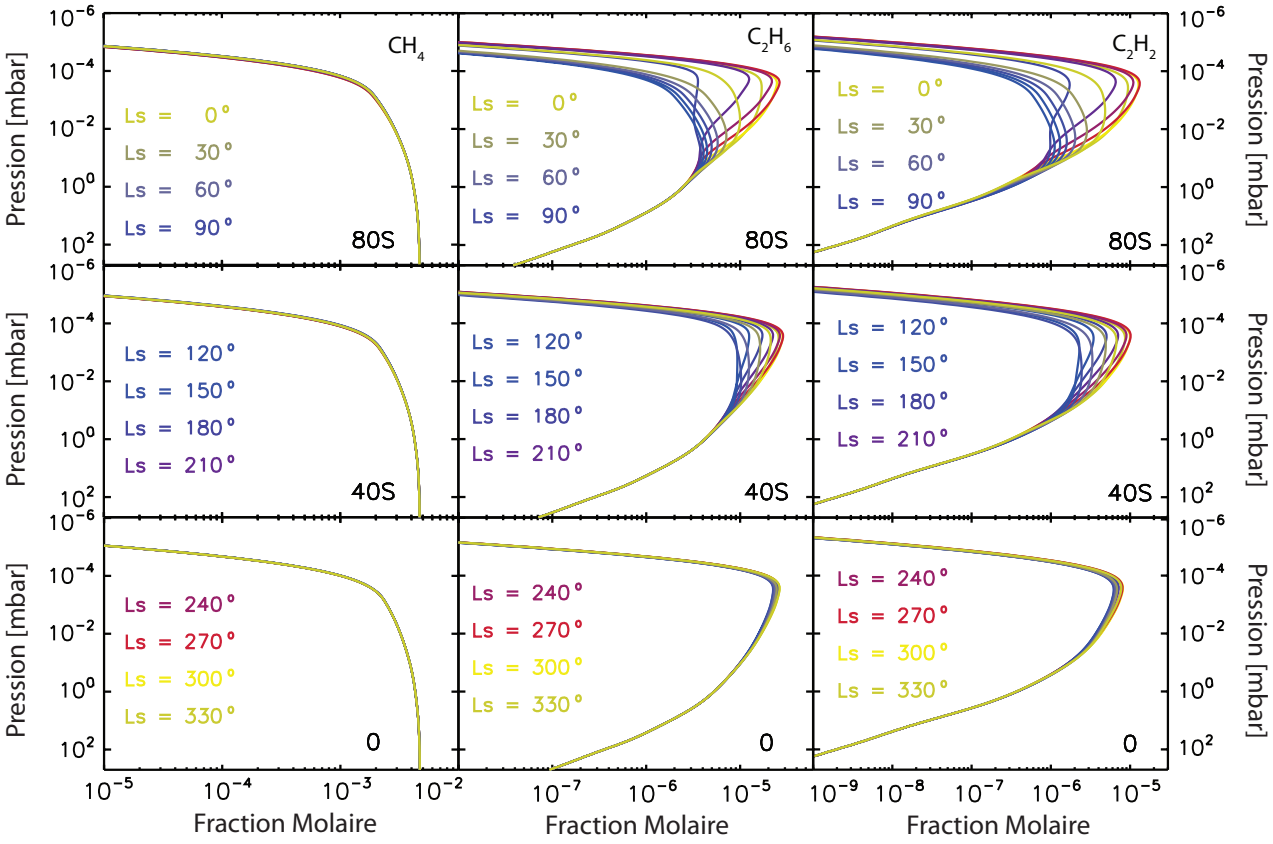

Figure 2.9 – Évolutions saisonnières de CH_4 (gauche), C_2H_6 (milieu) et C_2H_2 (droite) calculées sur une année saturnienne complète (360° en longitude héliocentrique, par pas de 30°). Ces évolutions sont présentées à trois latitudes : 80°S (en haut), 40°S (au milieu) et l'équateur (en bas). Le champ thermique utilisé pour ces calculs est le champ (U).

est plus localisé dans le temps à 40° qu'à 20° de latitude dans l'hémisphère d'hiver. En effet, à 20°, l'effet des anneaux est principalement localisé sur 140° de longitude héliocentrique, alors qu'à 40°, cet effet est localisé sur 80° de longitude héliocentrique seulement. À ces latitudes, c'est l'anneau B de Saturne qui contribue de façon prépondérante à la diminution du flux solaire incident.

À 10^{-2} mbar, l'effet de l'occultation des anneaux est plus étendue dans le temps qu'à 10^{-4} mbar. En effet, la fraction molaire des composés provient en partie de la diffusion des produits de la photolyse du méthane qui se produit à des niveaux de pression plus faibles. L'effet des anneaux se propageant à des niveaux de pressions importants, cet effet est encore visible plus de 90° en longitude héliocentrique après le solstice d'hiver dans l'hémisphère sud.

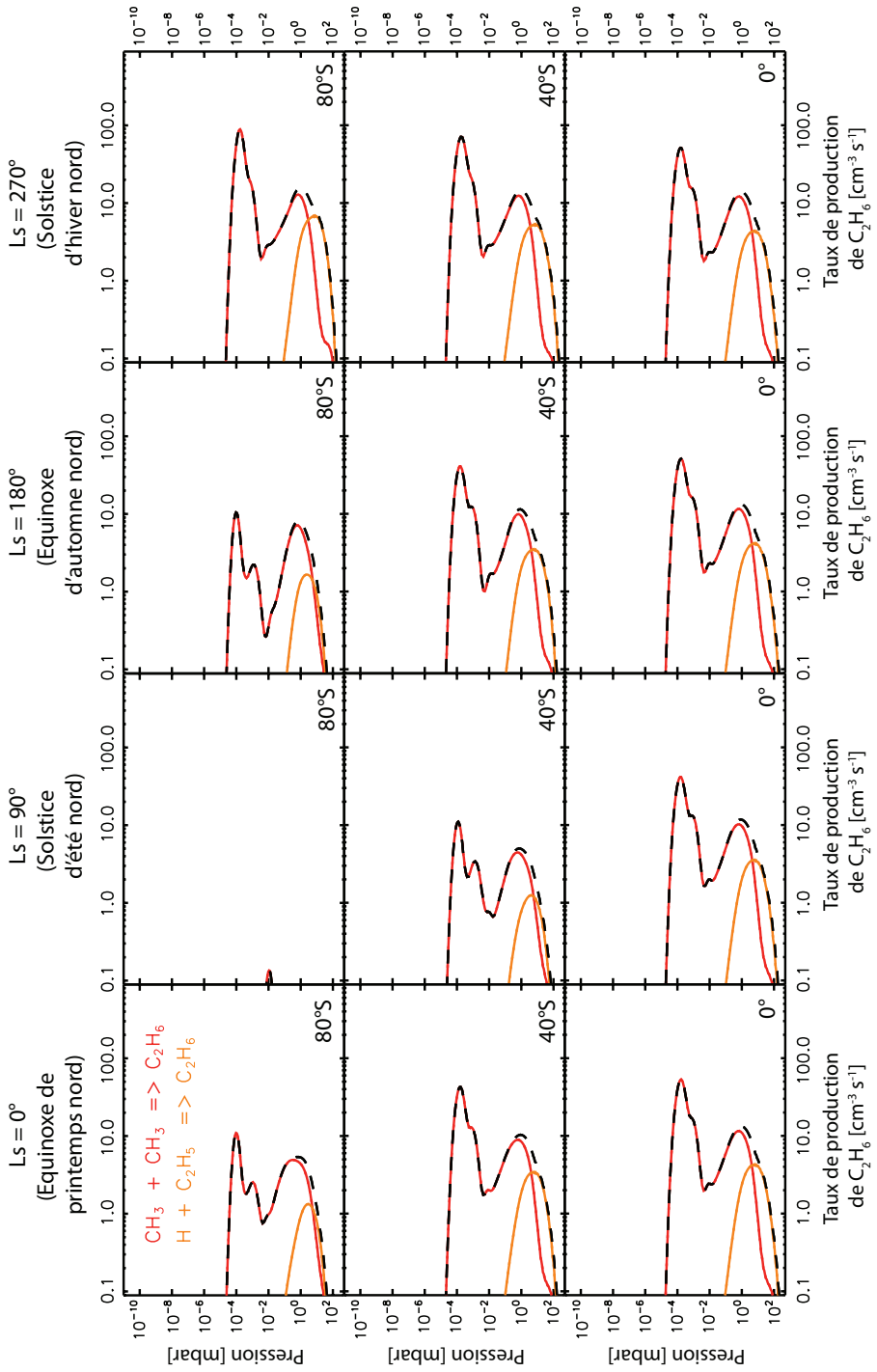

Figure 2.10 – Évolution des taux de production des réactions qui mènent à la production de C_2H_6. Les courbes en tirets représentent la somme des taux de production de l'ensemble de ces réactions. Ces taux sont présentés à 80°S (en haut), 40°S (au milieu) et l'équateur (en bas), ainsi qu'aux différents solstices et équinoxes : $L_s = 0°$ ($1^{\text{ère}}$ colonne), $L_s = 90°$ ($2^{\text{ème}}$ colonne), $L_s = 180°$ ($3^{\text{ème}}$ colonne) et $L_s = 270°$ ($4^{\text{ème}}$ colonne)

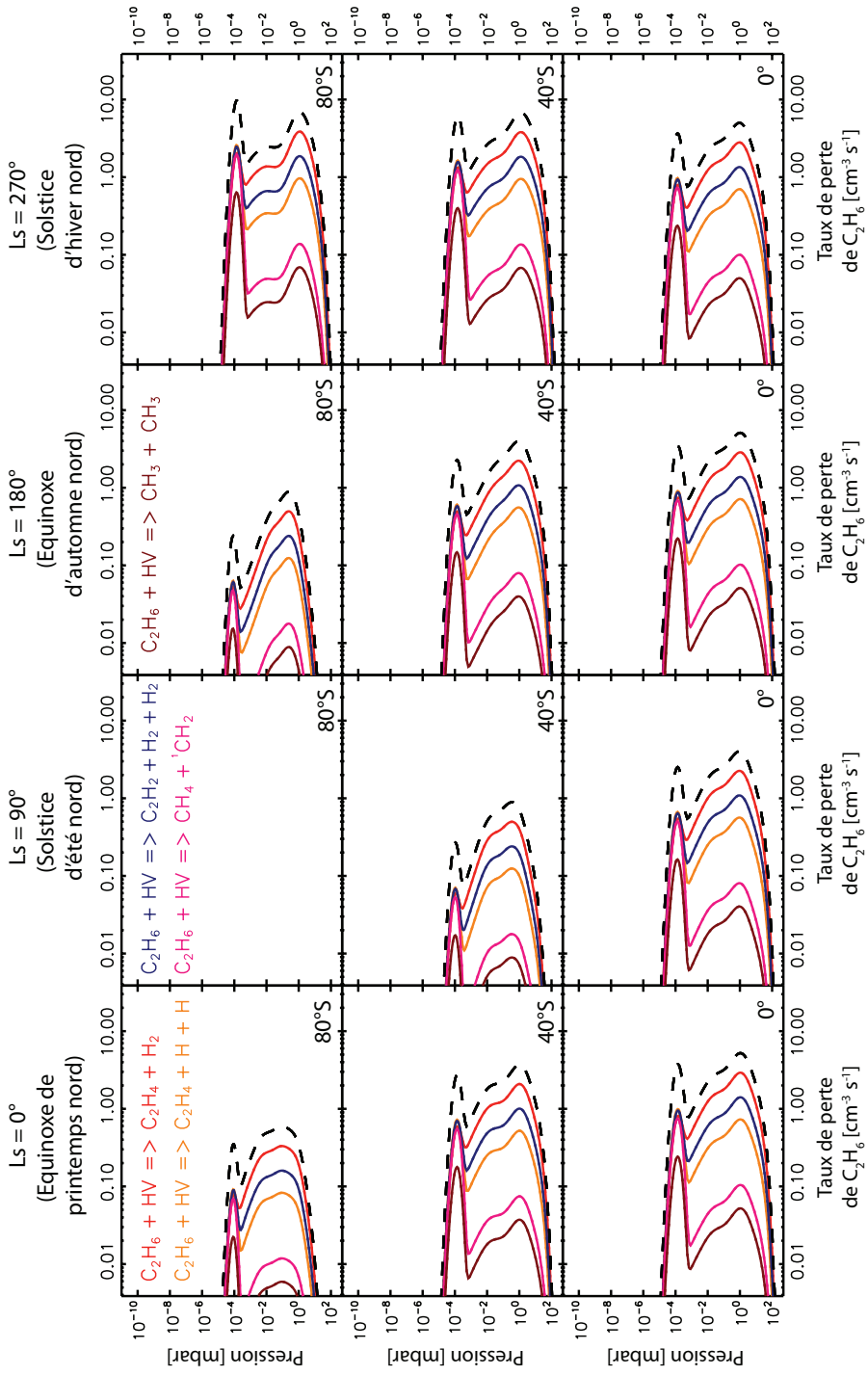

Figure 2.11 – Évolution des taux de perte des réactions qui mènent à la destruction de C_2H_6. Les courbes en tirets représentent la somme des taux de perte de l'ensemble de ces réactions. Ces taux sont présentés à 80°S (en haut), 40°S (au milieu) et l'équateur (en bas), ainsi qu'aux différents solstices et équinoxes : $L_s = 0°$ (1ère colonne), $L_s = 90°$ (2ème colonne), $L_s = 180°$ (3ème colonne) et $L_s = 270°$ (4ème colonne)

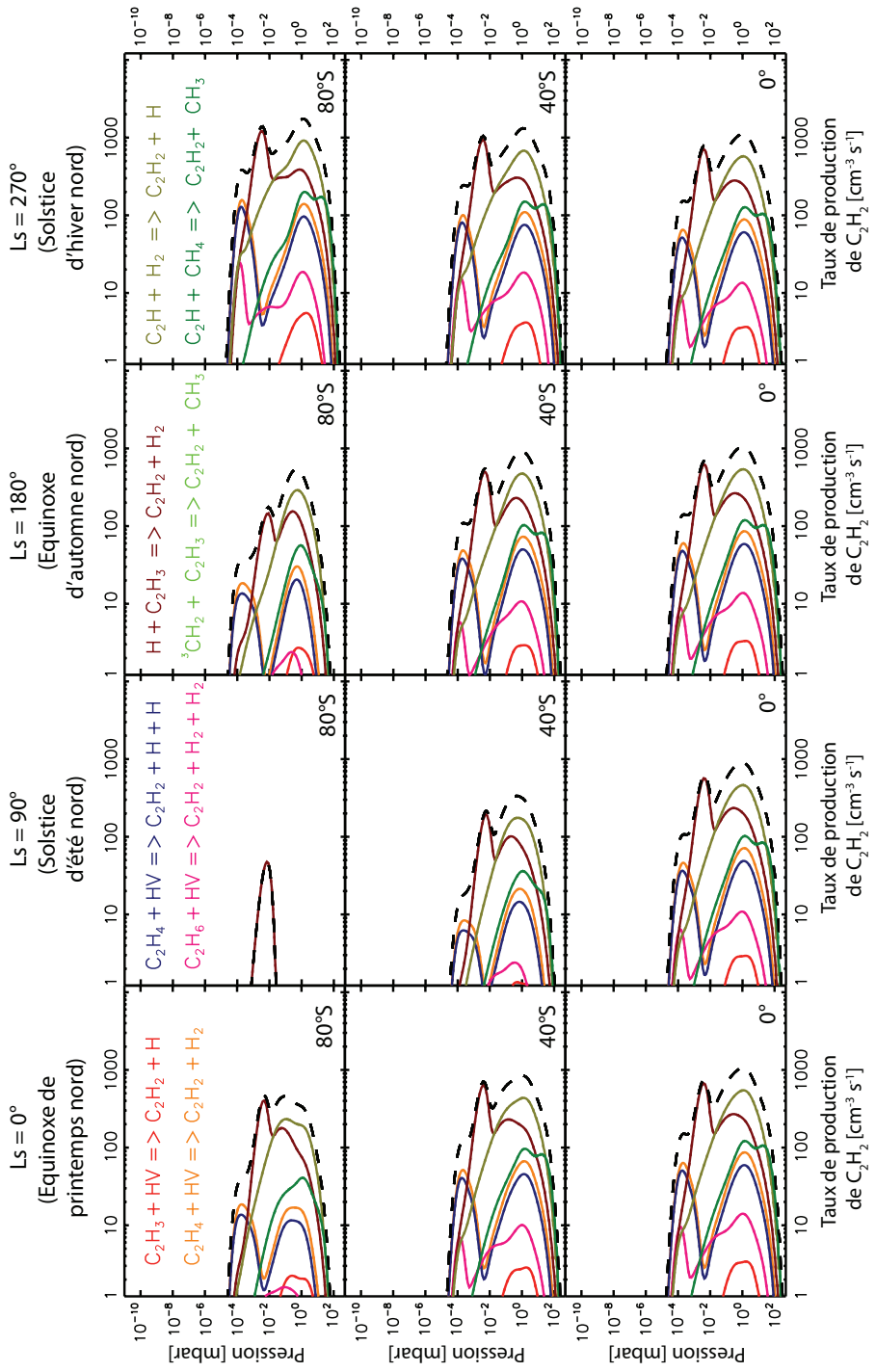

Figure 2.12 – Évolution des taux de production des réactions qui mènent à la production de C_2H_2. Les courbes en tirets représentent la somme des taux de production de l'ensemble de ces réactions. Ces taux sont présentés à 80°S (en haut), 40°S (au milieu) et l'équateur (en bas), ainsi qu'aux différents solstices et équinoxes : $L_s = 0°$ (1ère colonne), $L_s = 90°$ (2ème colonne), $L_s = 180°$ (3ème colonne) et $L_s = 270°$ (4ème colonne)

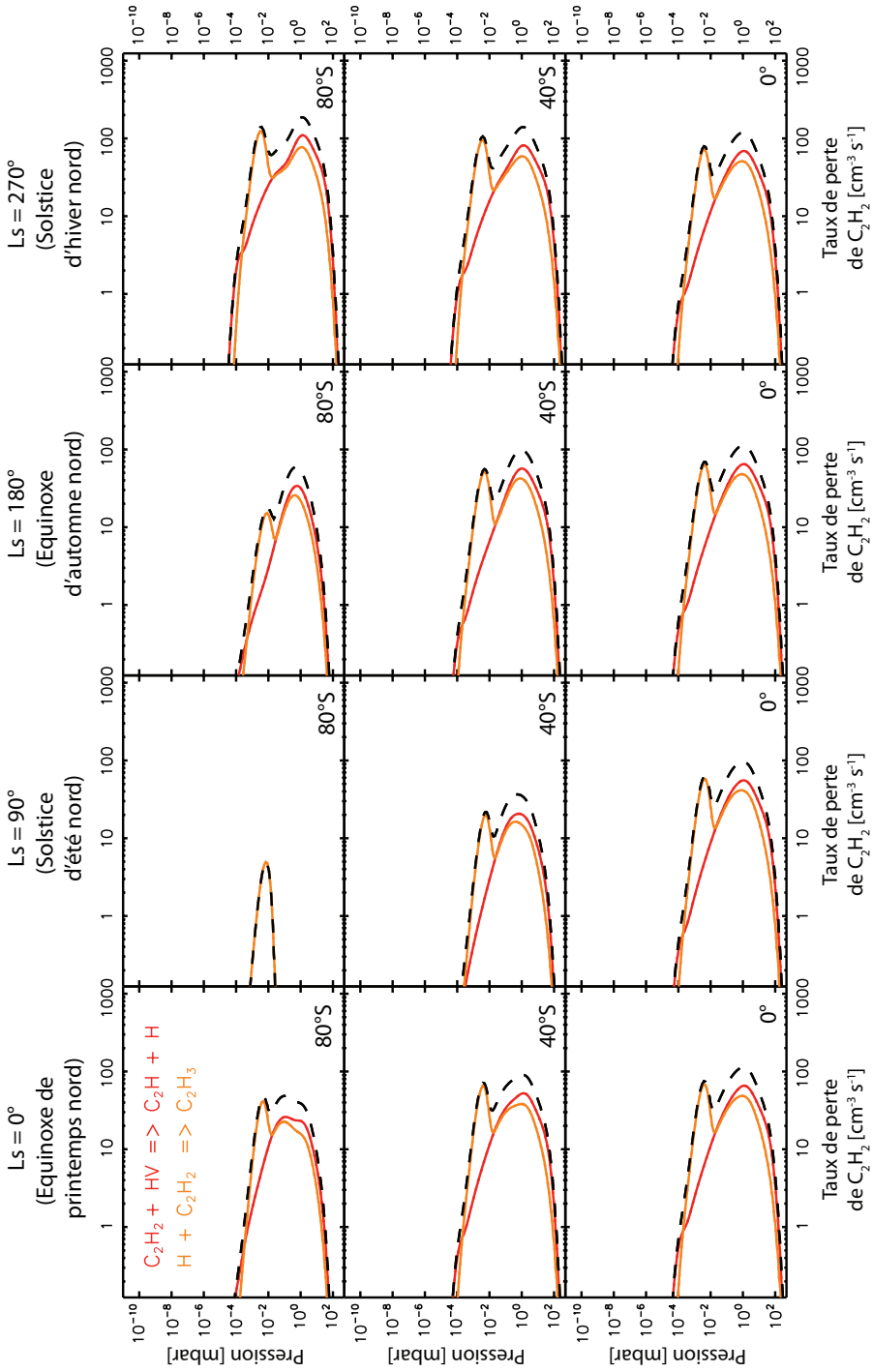

Figure 2.13 – Évolution des taux de perte des réactions qui mènent à la destruction de C_2H_2. Les courbes en tirets représentent la somme des taux de destruction de l'ensemble de ces réactions. Ces taux sont présentés à 80°S (en haut), 40°S (au milieu) et l'équateur (en bas), ainsi qu'aux différents solstices et équinoxes : $L_s = 0°$ ($1^{\text{ère}}$ colonne), $L_s = 90°$ ($2^{\text{ème}}$ colonne), $L_s = 180°$ ($3^{\text{ème}}$ colonne) et $L_s = 270°$ ($4^{\text{ème}}$ colonne)

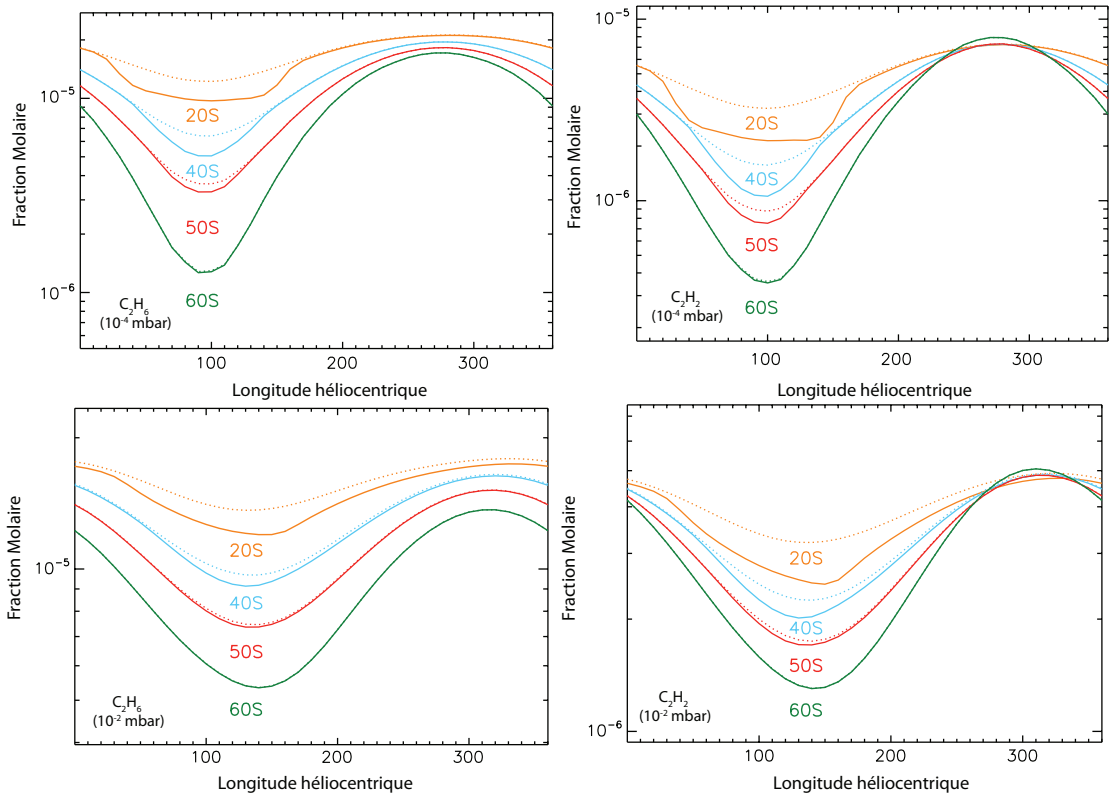

Figure 2.14 – Évolutions saisonnières des fractions molaires de C_2H_6 (gauche) et C_2H_2 (droite) à 10^{-4} mbar (en haut) et 10^{-2} mbar (en bas) en fonction de la longitude héliocentrique. Les traits pleins représentent ces évolutions saisonnières lorsque l'occultation des anneaux est prise en compte. Les pointillés représentent ces évolutions lorsque ces effets ne sont pas pris en compte. Le champ thermique (U) a été considéré ici.

2.3.3 Effet de l'évolution saisonnière de la température sur la photochimie

Dans cette partie, nous étudions l'effet de la prise en compte d'un champ thermique saisonnier (S) sur la photochimie de Saturne.

Les évolutions saisonnières des profils verticaux de CH_4, C_2H_6 et C_2H_2 sont présentées sur la figure 2.15.

La prise en compte de la variabilité saisonnière du champ thermique mène à une modification de l'amplitude des variations saisonnières d'abondance de C_2H_6 et C_2H_2 pour des niveaux de pression de 10^{-5} mbar à 1 mbar. En effet, C_2H_2 présente maintenant une certaine variation saisonnière pour des niveaux de pression de 0,5 à 10 mbar.

La position de l'homopause est maintenant variable du fait de la dépendance thermique du coefficient de diffusion moléculaire ($D_i = T^{1,75}/p$). L'utilisation du champ thermique (S) provoque un décalage de la position de l'homopause à de plus faibles niveaux de pression. En effet, le profil de température utilisé pour le champ thermique uniforme (U) est généralement plus chaud que les profils (S) car il correspond à des observations

effectuées à 20°S, en été.

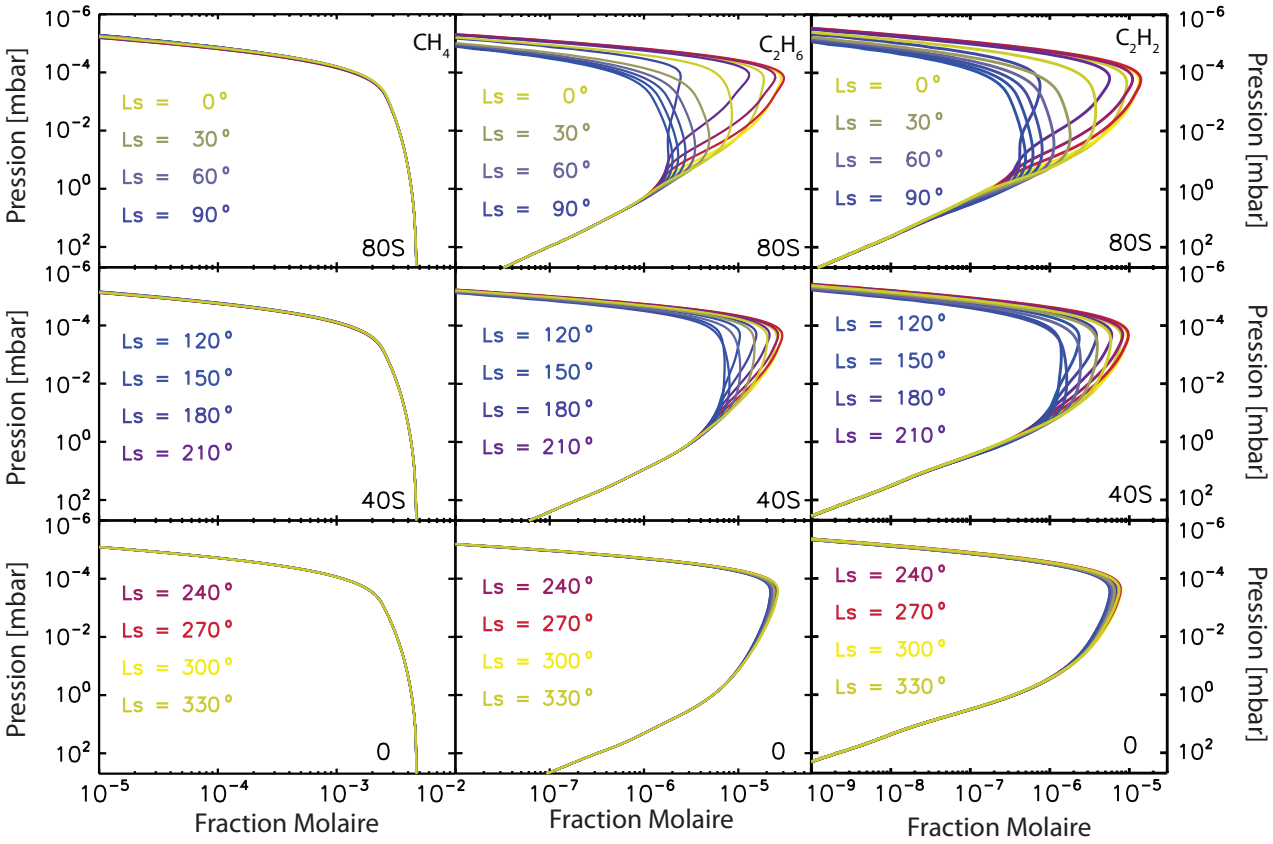

Figure 2.15 – Évolutions saisonnières de CH_4 (gauche), C_2H_6 (milieu) et C_2H_6 (droite) calculées sur une année saturnienne complète (360° en longitude héliocentrique, par pas de 30°). Ces évolutions sont présentées à trois latitudes : 80°S (en haut), 40°S (au milieu) et l'équateur (en bas). Le champ thermique utilisé pour ces calculs est le champ (S).

Nous allons maintenant comparer en détail les différences observées entre les cas (S) et (U), pour différents niveaux de pression. Les évolutions saisonnières de C_2H_2 et C_2H_6 aux niveaux de pression 10^{-4}, 10^{-2} et 1 mbar sont présentées sur les figures 2.16, 2.18 et 2.20, respectivement. Les évolutions des températures à ces mêmes niveaux de pressions sont présentées sur chacune de ces figures.

Nous présenterons ici seulement ces évolutions pour trois latitudes (80°S, 40°S, équateur) dans un seul hémisphère. En effet, des conclusions similaires peuvent être tirées dans l'hémisphère nord.

• **Figure 2.16** : À 10^{-4} mbar, les fractions molaires de C_2H_6 et C_2H_2 prédites par les champs thermiques (U) et (S) évoluent en phase. À l'approche du solstice d'été (L_s = 270°), les abondances de ces deux composés augmentent lorsque le champ thermique saisonnier (S) est pris en compte. Ces deux composés présentent maintenant un gradient d'abondance positif depuis l'équateur jusqu'au pôle Sud.

Les différences entre les deux champs thermiques dans les abondances prédites de ces deux composés ne dépassent jamais les 50%, hormis aux hautes latitudes (80°S), où les abondances de C_2H_6 et C_2H_2 sont respectivement augmentées d'un facteur 1,5 et 1,4. La bosse observée dans les abondances prédites à l'équateur et au moment des deux équinoxes ($L_s = 0°$ et $L_s = 180°$) est provoquée par l'absence d'occultation des anneaux à ce moment de l'année. Notons que la variation abrupte de la température prédite à 40°S pour des longitudes héliocentriques allant de 50° à 140° est causée par les différentes opacités des anneaux. La température du champ thermique (U) à ce niveau de pression est plus chaude de 1 K que celle du champ (S) pour une latitude de 80°S au moment du solstice d'été (L_s = 270°).

La figure 2.17 présente l'évolution des taux de production intégrés au-dessus de 10^{-4} mbar des principales réactions qui mènent à la production de C_2H_6 et C_2H_2. C_2H_6 est principalement produit par la réaction ($CH_3 + CH_3 \xrightarrow{M} C_2H_6$). Les taux de production intégrés au-dessus de 10^{-4} mbar de cette réaction dans le cas (S) sont toujours supérieurs à ceux du cas (U). Ceci est causé par la différence en température des deux champs thermiques, qui modifie la position de l'homopause et qui permet aux photons de pénétrer plus profondément dans l'atmosphère dans le cas (U). En effet, comme le champ thermique (U) est plus chaud que le champ thermique (S) à 10^{-4} mbar, les taux de production intégrés au dessus de 10^{-4} mbar des radicaux qui mènent à la production de C_2H_6 sont plus importants dans le cas (S). À 10^{-4} mbar, C_2H_2 est produit par les réactions ($C_2H_4 + h\nu \rightarrow C_2H_2 + H_2$) ainsi que ($C_2H_4 + h\nu \rightarrow C_2H_2 + H + H$). Les taux de production de ces deux réactions sont présentés sur la figure 2.17 (droite), et suivent une dynamique saisonnière similaire à celle de la réaction dominante menant à la production de C_2H_6 (voir figure 2.17, gauche). Nous notons que les différences entre les deux champs thermiques atteignent un minimum à 40°N proche du solstice d'hiver dans l'hémisphère nord ($L_s = 270°$) tandis qu'au même moment, la fraction molaire de C_2H_2 devient plus importante dans le cas (U) que dans le cas (S). Ces différences sont produites par la contraction de l'atmosphère, due au refroidissement de la colonne atmosphérique, qui s'opère dans le cas (S) dans l'hémisphère d'hiver, à l'approche du solstice d'hiver. Nous reviendrons ultérieurement en détail sur ce point.

• **Figure 2.18** : À 10^{-2} mbar, les maxima saisonniers de C_2H_6 et C_2H_2 adviennent plus tôt aux latitudes élevées qu'aux latitudes moyennes à cause de l'obliquité de Saturne. Le maximum saisonnier de C_2H_6 devient aussi abondant dans le cas (S) que dans le (U). C_2H_2 est maintenant moins abondant à toutes les latitudes dans le cas (S) que dans le cas (U) et son abondance décroit graduellement avec la latitude depuis l'équateur jusqu'aux pôles. On note un léger déphasage entre les cas (S) et (U) lorsque les abondances de C_2H_6 et C_2H_2 atteignent leurs valeurs minimales et maximales. À 80°S et durant la saison d'hiver dans cet hémisphère (L_s = 90° à 180°), les abondances de C_2H_6 et C_2H_2 sont maintenant respectivement diminuées d'un facteur 2,1 et 2,3 lorsque le champ (S) est pris en compte. À ce niveau de pression, les températures du champ (U) sont maintenant 2 K et 6 K plus chaudes que les températures équatoriales du champ (S) lors du solstice d'été et d'hiver, respectivement.

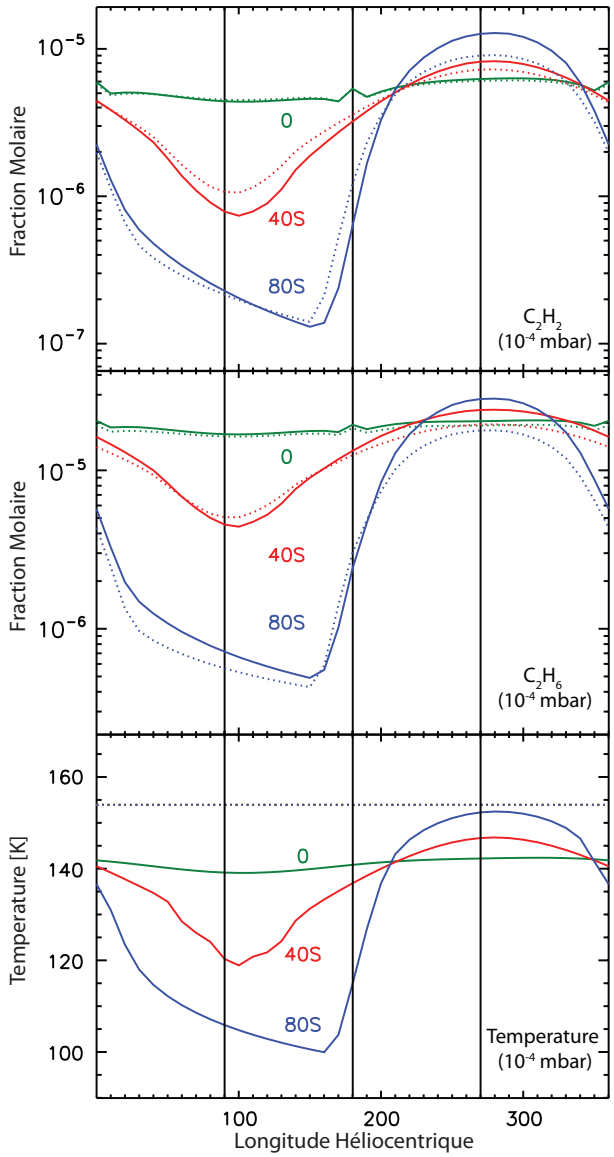

Figure 2.16 – Représentation graphique des évolutions saisonnières de C_2H_2 (en haut), C_2H_6 (au milieu) ainsi que de la température (en bas) au niveau de pression 10^{-4} mbar. Ces évolutions sont présentées pour les latitudes de 80°S (bleu), 40°S (rouge) ainsi qu'à l'équateur (vert). Les valeurs obtenues avec les champs thermique saisonnier (S) et uniforme (U) sont dénotées en traits pleins et pointillés, respectivement. Les traits verticaux noirs représentent les différents solstices et équinoxes (voir figure 2.1).

À 10^{-2} mbar, la production de C_2H_6 est contrôlée par la réaction ($CH_3 + CH_3 \xrightarrow{M} C_2H_6$). L'évolution saisonnière du taux de production de cette réaction est présentée sur la figure 2.19 (à gauche). Les taux de production intégrés au-dessus de ce niveau de pression sont très similaires entre les deux cas (S) et (U), excepté aux alentours du solstice d'hiver aux hautes latitudes. En effet, ils y deviennent alors moins importants dans le cas (S) que dans le cas (U).

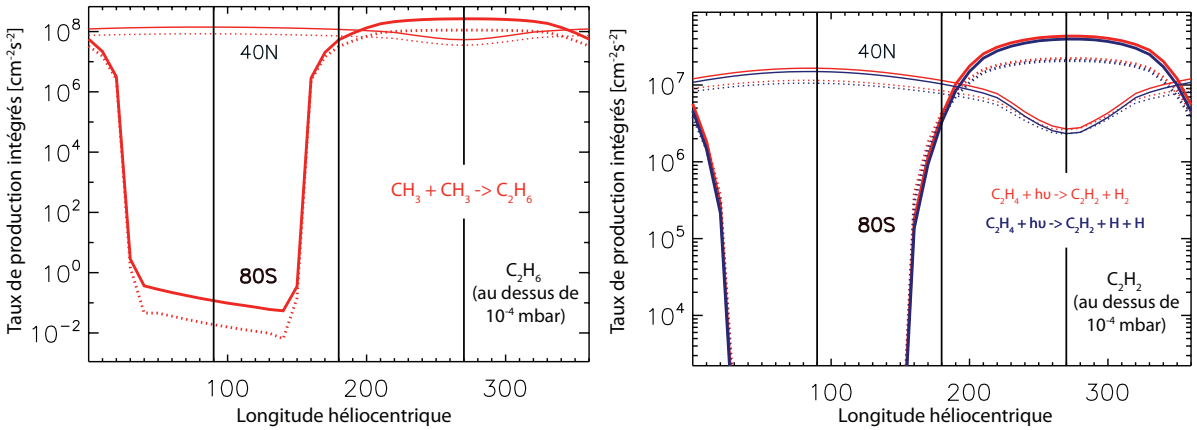

Figure 2.17 – Représentation des évolutions saisonnières des taux de production intégrés au dessus de 10^{-4} mbar des principales réactions menant à la production de C_2H_6 (à gauche) et C_2H_2 (à droite). Ces taux de production sont présentés à 80°S (traits épais) et 40°N (traits fins), ainsi que pour les champs thermiques (S) et (U), représentés en traits pleins et pointillés, respectivement.

La production de C_2H_2 à ce niveau de pression est maintenant principalement contrôlée par la réaction ($H + C_2H_3 \rightarrow C_2H_2 + H_2$). L'évolution du taux de production de cette réaction est présentée sur la figure 2.19 (à droite). Proche du solstice d'été ($L_s = 270°$ à 80°S et $L_s = 90°$ à 40°N), les taux de production intégrés de cette réaction sont très similaires pour les deux cas considérés, de façon cohérente avec les abondances prédites de C_2H_2 à 10^{-2} mbar. Proche du solstice d'hiver ($L_s = 90°$ à 80°S et $L_s = 270°$ à 40°N), les taux de production intégrés de cette réaction sont plus importants pour le cas (U) que pour le cas (S), de façon cohérente avec les abondances prédites de C_2H_2.

À ce niveau de pression, les abondances prédites de C_2H_6 et C_2H_2 sont contrôlées par deux quantités. Tout d'abord, des taux de production plus importants au-dessus de ce niveau de pression vont naturellement conduire à une plus grande quantité de ces molécules. Par ailleurs, la contraction de la colonne atmosphérique, causée par son refroidissement va accroire la vitesse de diffusion des molécules produites vers des niveaux de pression plus importants. Ce dernier effet est particulièrement visible pour C_2H_6 à 40°N proche du solstice d'hiver dans l'hémisphère nord ($L_s = 270°$), où le taux de production de ce composé pour le cas (S) est légèrement supérieur à celui du cas (U) alors que l'abondance prédite par le cas (S) est inférieure à celle du cas (U).

• **Figure 2.20** : À 1 mbar, C_2H_2 présente toujours une légère variabilité saisonnière pour les cas (U) et (S) alors que celle de C_2H_6 est maintenant négligeable dans le cas (U). En revanche, la variabilité saisonnière de ces composés persiste à des niveaux de pression plus importants dans le cas (S). Le déphasage qui était précédemment observé à 10^{-2} mbar dans le pic saisonnier d'abondance de C_2H_6 et C_2H_2 est maintenant renforcé. C_2H_6 est maintenant plus abondant à l'équateur dans le cas (S) et a un gradient latitudinal plus prononcé. La température saisonnière du champ thermique (U) à ce niveau de pression correspond maintenant à la température du champ thermique (S) à 40° lors du solstice d'hiver dans l'hémisphère sud.

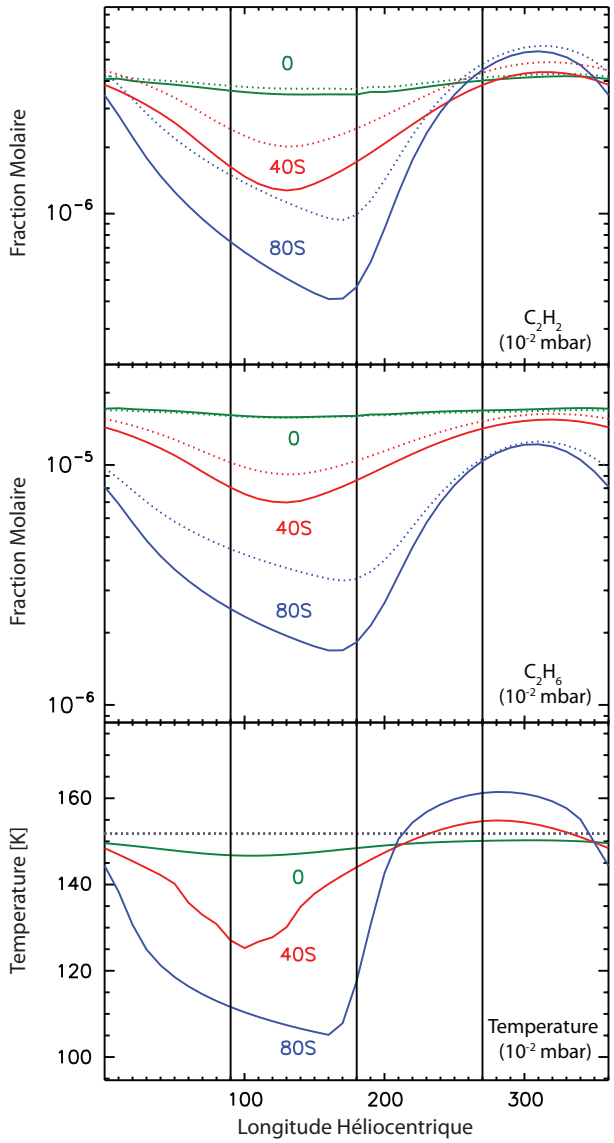

Figure 2.18 – Similaire à la figure 2.16, pour le niveau de pression de 10^{-2} mbar.

Nous voyons, d'après les figures 2.18 et 2.20, que lorsque le champ thermique (S) est pris en compte, un déphasage est observé dans les maxima et minima saisonniers des abondances prédites par le modèle entre les deux cas d'étude (S) et (U). Par ailleurs, C_2H_6 présente toujours une variabilité saisonnière à 1 mbar dans le cas (S), à la différence du cas (U). Les évolutions temporelles des maxima et minima saisonniers (appelés par la suite pic estival et creux hivernal) en fonction du niveau de pression sont présentées sur la figure 2.21. Une augmentation du déphasage entre les deux cas (S) et (U) est observée lorsque le niveau de pression augmente. À 1 mbar, le creux hivernal dans l'abondance de C_2H_6 se produit 90° de longitude héliocentrique plus tôt ($\sim$ 7 années terrestres) avec le champ thermique (S) qu'avec le champ thermique (U). De façon similaire, et toujours

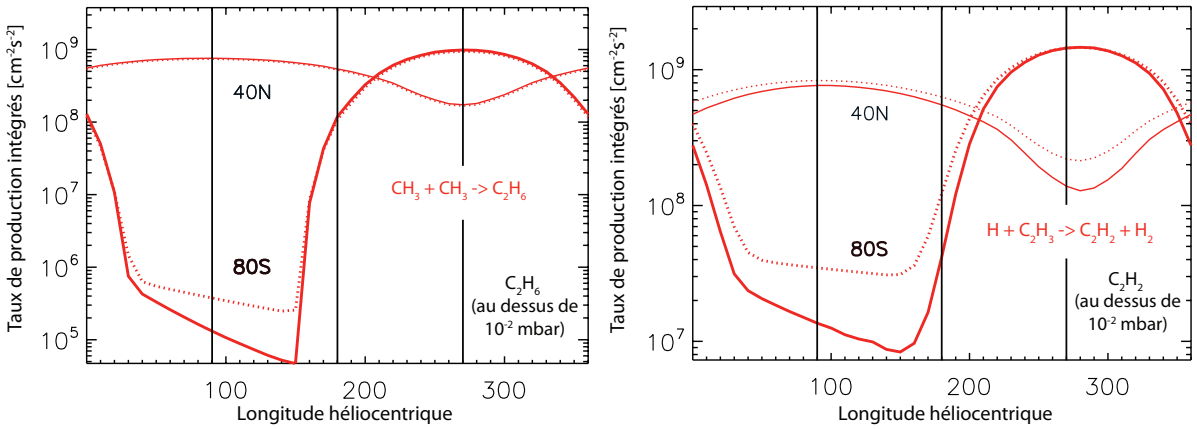

Figure 2.19 – Représentation des évolutions saisonnières des taux de production intégrés au dessus de 10^{-2} mbar des principales réactions menant à la production de C_2H_6 (à gauche) et C_2H_2 (à droite). Ces taux de production sont présentés à 80°S (traits épais) et 40°N (traits fins), ainsi que pour les champs thermiques (S) et (U), représentés en traits pleins et pointillés, respectivement.

à 1 mbar, l'augmentation estivale de l'abondance de C_2H_6 se produit maintenant 40° de longitude héliocentrique plus tôt ($\sim$ 4 années terrestres) avec le champ thermique (S).

Ainsi, le temps caractéristique de diffusion est diminué lorsque le champ thermique varie de façon saisonnière, par rapport au cas uniforme. Par conséquent, cela décale vers des niveaux de pression plus importants la limite en pression pour laquelle les variations saisonnières des composés chimiques persistent. Notons que cet effet est corrélé avec le gradient thermique saisonnier, il est donc maximal au niveau des pôles et minimal à l'équateur.

Nous allons maintenant présenter une comparaison entre les abondances des composés prédites par les champs thermiques (S) et (U) reproduisent les observations Cassini/CIRS.

2.3.4 Comparaison avec les observations Cassini/CIRS

Observations des hydrocarbures

Après l'arrivée de la sonde Cassini dans le système de Saturne, les observations des hydrocarbures tels que CH_4, C_2H_6 ou encore C_2H_2 ont été réalisées par l'instrument CIRS avec une couverture spatiale (latitude) et temporelle jusqu'ici inégalée. Ces composés ont été observés dans 2 modes d'observations différents : en observation au nadir (Howett et al., 2007; Hesman et al., 2009; Sinclair et al., 2013), ou au limbe (Fouchet et al., 2008; Guerlet et al., 2009, 2010).

L'instrument CIRS est un spectromètre à transformée de Fourier qui comprend trois plans focaux différents, appelés FP1, FP3 et FP4 et qui couvrent, respectivement, les gammes spectrales suivantes : 10-600 cm^{-1} (17 μm-1 mm), 600-1100 cm^{-1} (9-17 μm) et

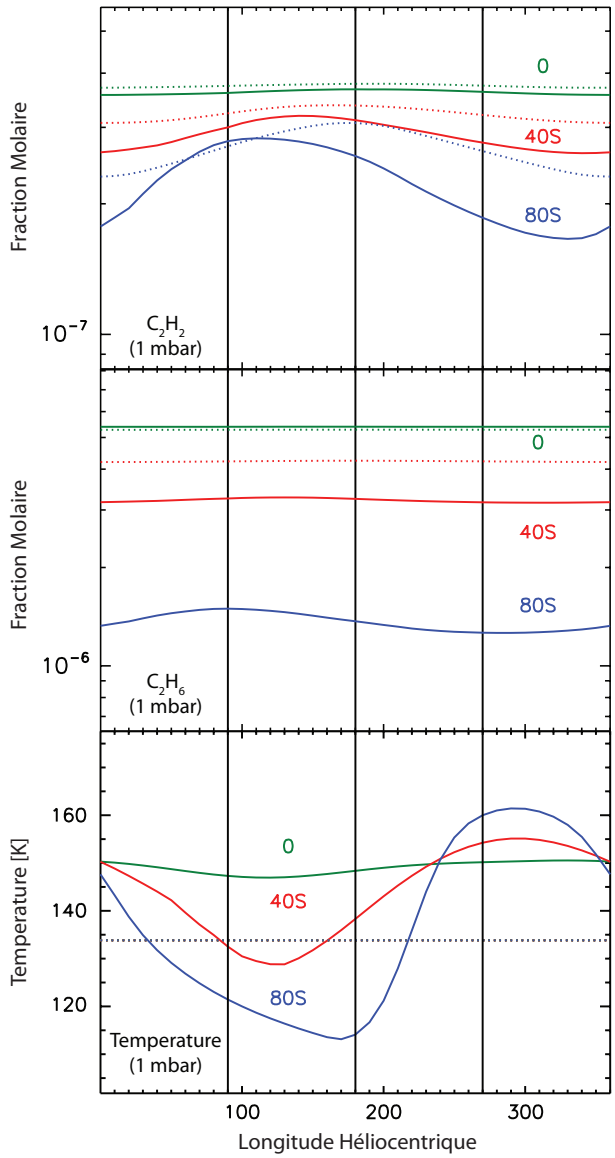

Figure 2.20 – Similaire à la figure 2.16, pour le niveau de pression de 1 mbar.

1100-1400 cm^{-1} (7-9 μm). Ces plans focaux sont constitués de deux séries linéaires de dix détecteurs, chacun ayant son propre champ de vision (Flasar et al., 2004).

Le mode d'observation au nadir suppose une observation où l'angle entre la direction du zénith d'un point donné et la position de la sonde (appelé angle d'émission) est faible. Pour un angle d'émission nul par exemple, l'observation s'effectue au zénith du point visé. Plus l'angle d'émission augmente, plus la quantité d'atmosphère traversée devient importante et plus l'opacité de la raie atmosphérique observée augmente à une pression donnée. Il en résulte que, dans le cas d'une raie optiquement épaisse, l'altitude à laquelle cette raie se forme augmente légèrement avec l'angle d'émission. Le mode d'observation au limbe tire parti de l'augmentation de l'altitude sondée pour des grands angles d'émission

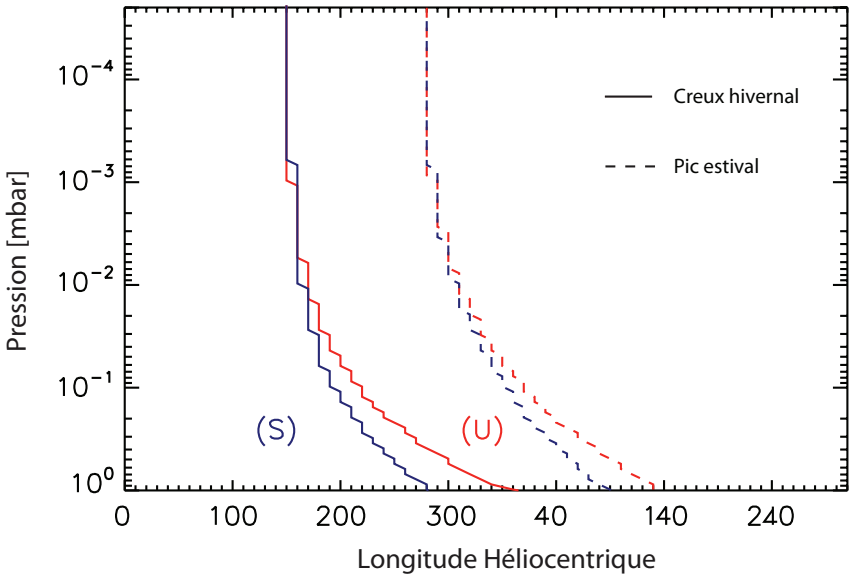

Figure 2.21 – Évolution temporelle de la position des pic estivaux (tirets) et creux hivernaux (traits pleins) des abondances prédites de C_2H_6 en fonction de la pression à 80°S. Les cas d'étude des champs thermiques saisonnier (S) et uniforme (U) sont représentés en bleu et rouge, respectivement.

et permet donc d'obtenir des informations sur les molécules émettrices à des altitudes plus importantes.

La différence principale entre les deux modes d'observation réside dans l'utilisation des différents détecteurs qui composent les plans focaux. Pour le mode d'observation au nadir, ces détecteurs sont utilisés pour scanner les différentes latitudes lorsque le plan focal est parallèle au méridien de la planète. En revanche, les observations au limbe placent les plans focaux perpendiculairement au limbe et ainsi les différents détecteurs peuvent être utilisés pour sonder des altitudes différentes. Cela permet, par composition de chacun de ces détecteurs, d'avoir une gamme de sensibilité verticale dans les observations des hydrocarbures (Guerlet et al., 2009).

Les observations au limbe publiées par Guerlet et al. (2009) permettent de contraindre les distributions verticales de C_2H_6 et C_2H_2 de 5 mbar à 5 μbar. Les profils latitudinaux de C_2H_6 et C_2H_2 à 1 mbar sont présentés sur la figure 2.22. Les erreurs systématiques ($\sim$ 20%) ont été omises dans la présentation de ces résultats car on s'intéresse ici aux profils latitudinaux ; ces erreurs étant identiques pour chaque latitudes observées. Les sorties du modèle photochimique n'ont pas été corrigées d'un facteur multiplicatif, comme ils sont parfois présentés dans la littérature afin de mieux superposer les modèles avec les observations. En effet, Dobrijevic et al. (2003) et Dobrijevic et al. (2010) ont montré que la prise en compte des incertitudes sur les réactions du réseau chimique menait à une barre d'erreur d'environ un ordre de grandeur dans l'abondance des composés C_2H_x à 1 mbar. Par la suite, les améliorations récentes sur la chimie des hydrocarbures (Hébrard et al., 2013; Dobrijevic et al., 2014; Loison et al., 2015) ont permis de réduire ces incertitudes d'un facteur 1,8 pour C_2H_6 et 4,2 pour C_2H_2. Ainsi, les différences absolues observées entre

les prédictions des modèles photochimiques et les observations sont tolérables lorsqu'elles restent dans les barres d'erreurs du modèle (induites par les incertitudes sur les constantes de réaction).

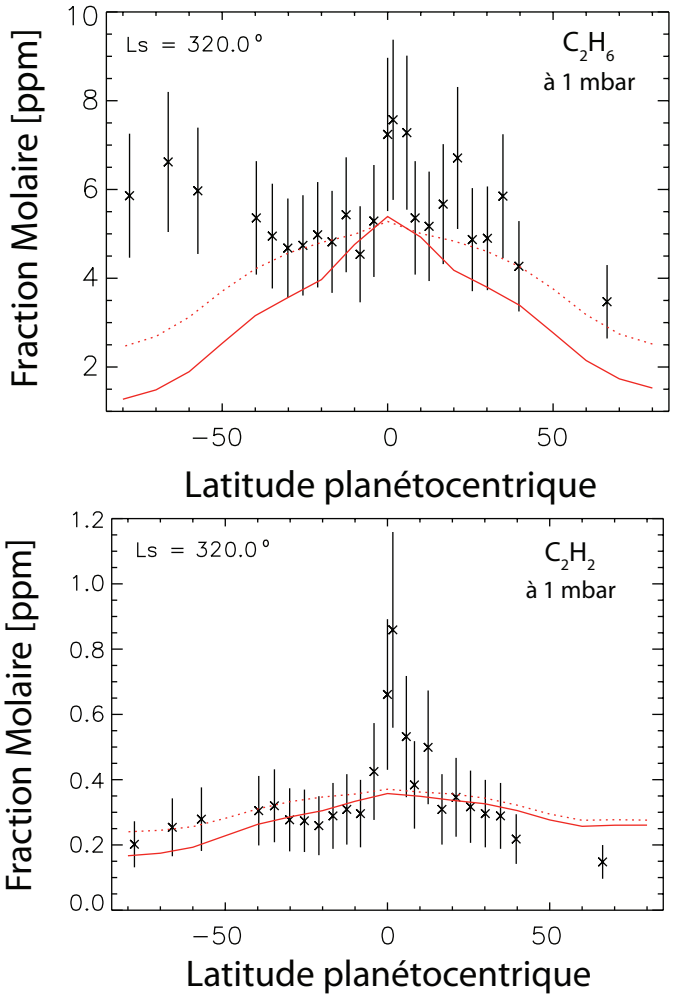

Figure 2.22 – Comparaison entre les profils latitudinaux à 1 mbar de C_2H_6 (en haut) et C_2H_2 (en bas) observés par Cassini/CIRS (Guerlet et al., 2009) pour des longitudes héliocentriques de L_s = 300° à 340° avec les prédictions du modèle photochimique. Ces prédictions sont présentées à une longitude héliocentrique de L_s = 320°. Les traits pleins et pointillés dénotent les cas des champs thermiques (S) et (U), respectivement.

Les observations au limbe effectuées par Cassini permettent à la fois d'avoir des informations sur la structure verticale des composés observés, ainsi que des informations sur les variations latitudinales de ceux-ci. La figure 2.23 présente les différences relatives entre les observations Cassini/CIRS de C_2H_6 et C_2H_2 et les prédictions du modèle photochimique dans le cas (S) sur une échelle logarithmique. La quantité $\log(y_i^{CIRS}/y_i^{MP})$ y est tracée sur une échelle de couleur en fonction de la gamme de sensibilité en pression de CIRS ainsi que de la latitude planétrocentrique (i représente le composé chimique considéré et MP représente les sorties du modèle photochimique). Les valeurs positives et négatives dénotent

donc les régions où le modèle photochimique sous-estime ou sur-estime les abondances de ces composés, respectivement. Les lignes verticales représentent les différentes latitudes observées par la sonde Cassini et les portions en traits épais de ces lignes représentent les zones où les prédictions photochimiques sont comprises dans les barres d'erreur des observations.

Éthane : C_2H_6

Moses and Greathouse (2005) ont montré que la variabilité saisonnière de ce composé à des pressions supérieures à 0,8 mbar devenait négligeable car le temps caractéristique qui régit l'abondance de ce composé à ces niveaux de pression devenait plus grand que l'année saturnienne.

Les temps caractéristiques d'évolution chimiques de C_2H_6 sont globalement plus longs que ceux de C_2H_2. Ainsi, lorsque les temps d'évolution dynamiques de ces composés deviennent comparables en ordre de grandeur aux temps chimiques, C_2H_6 est plus sensible aux processus de transport que C_2H_2. Par ailleurs, les incertitudes quant aux différentes voies chimiques de production de C_2H_2 conduisent à une plus grande incertitude sur le profil vertical de C_2H_2 par rapport à C_2H_6. Ainsi, nous accorderons plus d'importance aux écarts dans les abondances prédites de C_2H_6 par rapport à C_2H_2.

C_2H_6 est raisonnablement reproduit depuis l'équateur jusqu'à $\pm$ 40° et à des pressions supérieures à 0,1 mbar (figure 2.23, en haut). Dans la région équatoriale, les différences entre les prédictions du modèle photochimique et les observations Cassini évoluent rapidement sur 5-10° de latitude, et le modèle échoue à reproduire les pics d'abondance de C_2H_6 observés à 5°S ainsi que 8°N au niveau de pression de 1 mbar (figure 2.22). Ces pics semblent être produits par l'oscillation semi-annuelle saturnienne (Orton et al., 2008; Fouchet et al., 2008; Guerlet et al., 2009, 2011). Le but du modèle présenté dans sa forme actuelle, c'est-à-dire sans transport latitudinal, est de poser les bases d'un modèle photochimique apte à inclure la dynamique dans un second temps. Celui-ci permettra alors de mieux reproduire les observations en incluant divers schémas de circulation atmosphérique.

De 40°S jusqu'au pôle Sud, les abondances de C_2H_6 sont sous-estimées par le modèle à des pressions supérieures à 0,1 mbar. Inversement, de 10°S à 40°S, les abondances de C_2H_6 sont sur-estimées par le modèle à des pressions inférieures à 0,1 mbar. De façon similaire à ce qui a été proposé dans la littérature par Guerlet et al. (2009, 2010) et Sinclair et al. (2013), les zones de sous-/sur-estimation dans l'hémisphère sud tendent à suggérer la présence d'une cellule de circulation atmosphérique, affectant les distributions verticales et latitudinales des composés.

À 1 mbar (figure 2.22, en haut), le modèle prédit un gradient latitudinal plus important pour C_2H_6 dans le cas d'étude (S). En effet, la prise en compte du champ (S) provoque une diffusion plus rapide des composés atmosphériques vers les niveaux de pression plus importants. Cette diffusion est d'autant plus rapide que la latitude est élevée, ce qui explique l'augmentation du gradient latitudinal par rapport au cas (U).

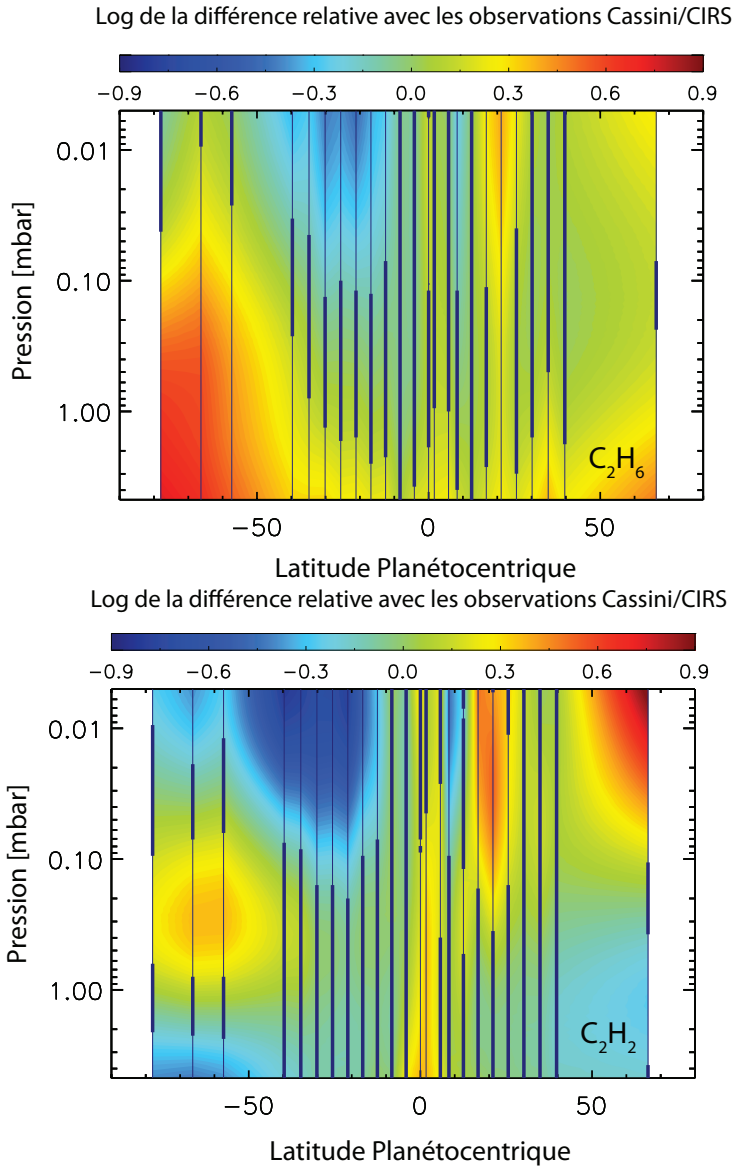

Figure 2.23 – Comparaison entre les observations Cassini/CIRS (Guerlet et al., 2009) et les prédictions du modèle photochimique en fonction de la gamme de sensibilité en pression des observations au limbe ainsi que de la latitude planétocentrique. C_2H_6 et C_2H_2 sont respectivement présentés en haut et en bas. La période d'observation va de $L_s = 300°$ à $L_s = 340°$. Ces observations sont comparées au modèle photochimique à $L_s = 320°$. L'échelle de couleur représente le logarithme de la différence entre les observations et les prédictions du modèle. Les valeurs positives/négatives de celles-ci représentent donc des sous-/sur-estimations de l'abondance de ces composés par le modèle photochimique. Les lignes verticales représentent les latitudes auxquelles les observations ont été effectuées, et les portions en trait épais de ces lignes représentent les régions où les prédictions du modèle sont comprises dans les barres d'erreurs des observations.

Acétylène : C_2H_2

À 1 mbar (figure 2.22, en bas), les prédictions du modèle sont en accord avec les observations au nadir. La décroissance de l'abondance observée de l'équateur aux pôles

est reproduite par le modèle, de façon similaire à ce qui a été reporté par Guerlet et al. (2009, 2010) et Sinclair et al. (2013). À l'instar de C_2H_6, des différences sont notées de l'équateur à ± 15°, ainsi qu'à partir de 35°N en direction du pôle Nord.

À des pressions supérieures à 0,1 mbar (figure 2.23, en bas), les prédictions du modèle sont dans les barres d'erreurs des observations reportées par Guerlet et al. (2009), de l'équateur jusqu'à ± 40°.

Dans la zone équatoriale, et de façon identique à C_2H_6, l'oscillation équatoriale de Saturne cause un écart entre les prédictions du modèle et les observations.

Dans l'hémisphère sud, de 10°S à 40°S, les abondances de C_2H_2 sont sur-estimées par le modèle à des pressions inférieures à 0,1 mbar. Cette particularité a aussi été observée pour C_2H_6 et est discutée dans la section 2.4.

Reproduction des observations avec un champ thermique saisonnier

Rappelons que la figure 2.23 comparait les prédictions du modèle dans le cas du champ thermique saisonnier (S) par rapport aux observations de Cassini/CIRS. La figure 2.24 présente l'évolution du facteur χ^2 de C_2H_6 et C_2H_2 pour les deux cas d'étude (S) et (U). Pour chacun de ces deux cas, les facteurs χ^2 ont été calculés à chaque latitude observée puis sommés sur l'ensemble des latitudes. Ce facteur est calculé de la façon suivante :

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_{PM} - y_{obs}}{\Delta y_{Obs}} \right)^2 \tag{2.2}$$

où y_{PM} = abondances chimiques calculées à l'aide du modèle photochimique
y_{obs} = abondances chimiques observées
Δy_{obs} = erreurs sur les abondances chimiques observées
N = nombre de latitudes observées

Bien que les différences ne soient pas clairement significatives lorsqu'elles sont rapportées aux barres d'erreur des observations, l'utilisation du champ thermique (S) améliore légèrement la prédiction de l'abondance de C_2H_6 à des pressions inférieures à 0,1 mbar. Les observations sont toutefois mieux reproduites avec un champ thermique uniforme dans la basse stratosphère, typiquement de 0,2 à 5 mbar. C_2H_2 est mieux reproduit avec un champ thermique saisonnier sur l'ensemble de la gamme de pression considérée.

2.4 Discussion

Nous avons pu observer que les abondances de C_2H_6 et C_2H_2 étaient sur-estimées aux latitudes moyennes dans l'hémisphère sud à des pressions inférieures à 0,1 mbar alors que

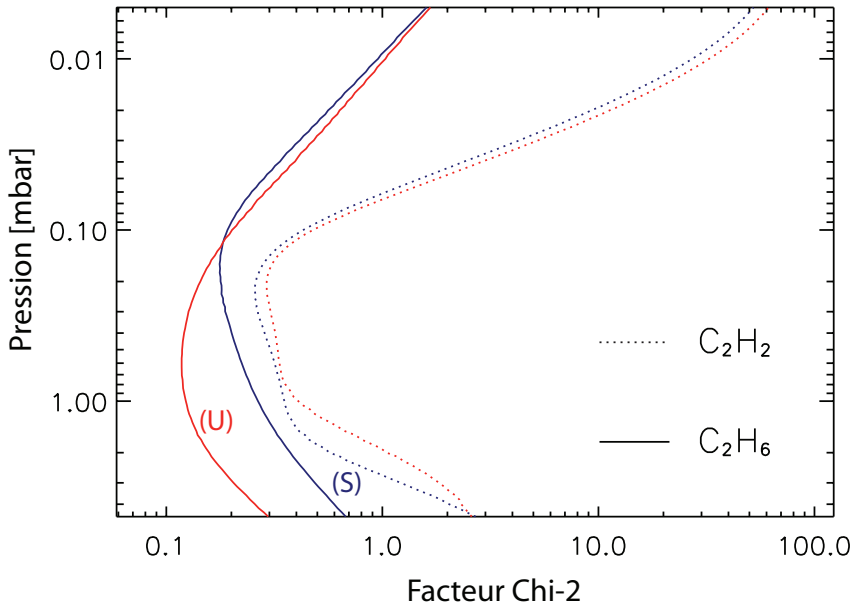

Figure 2.24 – Évolution du facteur χ^2 de C_2H_6 (traits pleins) et C_2H_2 (pointillés) pour les deux cas d'étude des champs thermiques saisonnier (S) et uniforme (U) en fonction de la gamme de sensibilité en pression des observations de Cassini/CIRS aux limbes (Guerlet et al., 2009), effectuées à $L_s = 320°$. Les cas d'étude (S) et (U) sont représentés en rouge et vert, respectivement. Ces facteurs sont sommés sur l'ensemble des latitudes observées par Cassini/CIRS.

l'abondance de C_2H_6 était sous-estimée aux plus hautes latitudes dans l'hémisphère sud, à des pressions supérieures à 0,1 mbar (voir figure 2.23). Quatre possibilités différentes semblent potentiellement envisageables pour expliquer les écarts observés :

- un choix de coefficient de diffusion turbulent inadapté
- la présence d'une cellule de transport stratosphérique
- la présence de processus de mélange latitudinal
- un effet de la chimie ions-neutres sur les espèces neutres

Nous allons maintenant discuter de chacune de ces possibilités.

2.4.1 Coefficient de diffusion turbulente

L'un des paramètres clés et faiblement contraint des modèles photochimiques est le choix du coefficient de diffusion turbulente verticale. À ce stade de l'étude il peut être souligné que ce choix n'était pas forcément optimal pour toutes les latitudes, et qu'un coefficient différent aurait pu améliorer la reproduction des observations Cassini dans l'hémisphère sud.

Le coefficient de diffusion turbulente choisi pour cette étude permet de reproduire de façon satisfaisante le profil vertical du méthane observé à deux latitudes différentes contraint par les observations Voyager/UVS et Cassini/CIRS (Smith et al., 1983; Dobrijevic et al., 2011). Smith et al. (1983) observèrent en effet une occultation solaire à 29,5°N

et une occultation stellaire à 3,8°N, mais ne déduisirent aucune contrainte évidente sur la variation de ce profil à ces deux latitudes. En l'absence de contraintes plus fortes sur ce coefficient, nous avons supposé que celui-ci était invariable avec la latitude.

Nous avons procédé à une étude de sensibilité sur la valeur de ce coefficient afin d'évaluer la possibilité d'une meilleure reproduction des abondances de C_2H_6 et C_2H_2 dans l'hémisphère sud. Nous avons testé plus d'une vingtaine de coefficients de diffusion turbulente dans le modèle saisonnier, toujours en supposant une invariance de ceux-ci avec la latitude. Plusieurs de ces coefficients permettent de mieux reproduire les observations Cassini dans l'hémisphère sud. Cependant, du fait de l'invariance latitudinale supposée du coefficient, l'accord dans l'hémisphère nord se dégrade en même temps.

La reproduction exacte des observations Cassini semble être possible avec des coefficients de diffusion turbulente différents pour chaque latitude. Nous n'avons pas exploré une telle possibilité. La sensibilité du modèle photochimique à un tel coefficient nécessite avant toute chose de valider ce coefficient via une reproduction des profils observés de CH_4. Le niveau de l'homopause du CH_4 nous donne la contrainte principale sur ce coefficient. Sa dépendance en altitude peut ensuite être affinée à partir des profils verticaux de C_2H_2 et C_2H_6.

Les occultations stellaires dans l'UV permettent de contraindre le profil de CH_4 proche de l'homopause (voir par exemple Festou and Atreya (1982) et Smith et al. (1983)). Récemment, Shemansky and Liu (2012) démontrèrent la dépendance latitudinale de ce coefficient. À l'aide d'occultations stellaires, ils mirent en évidence la variation de la structure verticale de CH_4 à 3 latitudes différentes, prouvant ainsi la variation latitudinale du K_{zz}. Ces événements restent toutefois rares et plus de mesures sont nécessaires pour contraindre le K_{zz} sur une gamme latitudinale et temporelle plus importante. Par ailleurs, les observations de fluorescence de CH_4 à 3 μm (voir Drossart et al. (1999) et Encrenaz et al. (1999) par exemple) impliquent des modèles de transfert radiatif comportant des paramètres faiblement contraints, comme le taux de relaxation vibrationnelle, ou la dépendance en température de ces taux (Kim et al., 2014)) et ne posent ainsi pas de contraintes fortes sur le profil de CH_4 proche de l'homopause.

2.4.2 Circulation stratosphérique dans Saturne

Une autre possibilité afin d'expliquer les désaccords observés dans l'hémisphère sud est d'invoquer l'existence d'une cellule de circulation stratosphérique. En effet, les mouvements atmosphériques associés à une telle circulation sont censés modifier les abondances des composés atmosphériques d'une solution photochimique pure (Moses and Greathouse, 2005; Guerlet et al., 2009, 2010; Friedson and Moses, 2012; Sinclair et al., 2013).

Plusieurs cellules de circulation dans Saturne ont été proposées dans la littérature, bien que celles-ci ne soient pas toujours cohérentes entre elles. Conrath et al. (1990) ont prédit, à l'aide d'un modèle radiatif dynamique 2D (altitude-latitude), la présence d'une cellule de circulation pôle-à-pôle aux solstices, de 1 bar à 0,1 mbar. Celle-ci implique des mouvements ascendants au niveau du pôle d'été et des mouvements descendants au

niveau du pôle d'hiver. À l'équinoxe, leur modèle prédit en revanche une double cellule de circulation, avec des mouvements ascendants à l'équateur et descendants aux niveaux des pôles. Leur modèle, bien que prenant en compte l'opacité des composés atmosphériques CH_4, C_2H_6 et C_2H_2, ne prend cependant pas en compte l'opacité des aérosols. Cette source additionnelle de dépôt énergétique a été, par la suite, prise en compte par West et al. (1992) pour une planète de type Jupiter. Ils ont montré que la prise en compte de l'opacité des aérosols altère la circulation atmosphérique à des pressions inférieures à 100 mbar, avec à l'équinoxe, contrairement aux prédictions de Conrath et al. (1990), des mouvements descendants à l'équateur et ascendants au niveau des pôles.

C_2H_2 et C_2H_6 présentent un gradient d'abondance positif avec l'altitude. De par une analyse qualitative de la figure 2.23, il semble qu'une cellule stratosphérique qui possède des mouvements atmosphériques descendants vers 25°S, de 0,1 mbar à 0,01 mbar, pourrait augmenter l'abondance prédite de ces composés à une altitude donnée. Inversement, des mouvements atmosphériques ascendants vers 65°S, de 1 mbar à 0,1 mbar, pourraient augmenter ces abondances à une altitude donnée.

Friedson and Moses (2012) montrèrent, dans le cadre d'un GCM à 3D, que l'atmosphère de Saturne semble être dominée par une cellule de Hadley se renversant de façon saisonnière. Cette circulation implique des mouvements ascendants à l'équateur et des mouvements descendants aux latitudes moyennes dans l'hémisphère d'hiver. À une longitude héliocentrique de 308°, ils prédisent des mouvements descendants prononcés dans l'hémisphère nord, à $\sim$ 20°N, et ce, de façon plus prononcée lorsque l'altitude augmente. Dans l'hémisphère sud, à 1 mbar, Friedson et al. prédisent des mouvements ascendants d'air à 10°S et descendants à 25°S. Ces derniers sont prédits durant la saison d'été dans l'hémisphère sud, c'est à dire au moment des observations CIRS publiées par Guerlet et al. (2009). Cette circulation, bien que ne correspondant pas exactement à celle nécessaire afin de mieux reproduire les observations de C_2H_2 et C_2H_6, pourrait toutefois aller dans le sens des observations si la position en latitude des mouvements ascendants/descendants prédits par Friedson et al. étaient décalée à plus hautes latitudes. Notons par ailleurs que le modèle de Friedson et al. ne permet pas de résoudre de façon précise la circulation aux moyennes et hautes latitudes à cause de la résolution de leur grille en latitude.

Rappelons encore une fois que l'effet d'une cellule de circulation ne peut être appréhendé aisément de par le couplage complexe entre la chimie et le transport vertical.

2.4.3 Diffusion latitudinale

Les récentes observations de Cassini/CIRS effectuées en 2010 et 2012 (Sylvestre et al., 2015) ont montré que les températures stratosphériques mesurées évoluent globalement de façon cohérente avec les prédictions des modèles radiatifs, c'est à dire que l'hémisphère sud de Saturne s'est refroidi depuis son solstice d'été en 2002, et que l'hémisphère nord se réchauffe peu-à-peu avec son avancée dans sa saison de printemps. La structure fine des variations latitudinales de température reste toutefois mal reproduite par les modèles radiatifs, notamment dans la région équatoriale et sous l'ombre des anneaux.

En revanche, ces récentes observations montrent que les abondances de C_2H_2 et C_2H_6 sont restées très stables dans le temps. À 1 mbar ces observations semblent cohérentes avec le modèle photochimique qui ne prédit pas de variations saisonnières d'abondance. À plus faibles niveaux de pression, là où les variations saisonnières de composition chimique prédites par le modèle photochimique sont relativement importantes, les observations suggèrent que leur abondances sont restées très stables. Notons toutefois les barres d'erreurs importantes sur ces mesures qui rendent difficiles toute conclusion directe. Si les abondances sont restées aussi stables, cela pourrait mettre en évidence des processus de mélange latitudinal. Les prochaines observations CIRS à l'approche du solstice d'été dans l'hémisphère nord permettront donc de conclure sur l'existence de ces processus, ou, au moins, de poser une limite supérieure sur leur importance.

2.4.4 Chimie ion-neutre

Le modèle photochimique développé ici ne prend pas en compte les réactions chimiques ions-neutres. Les espèces neutres peuvent en effet réagir avec les ions et électrons produits dans la haute atmosphère. La production de ces particules chargées résulte de photoionisations par des radiations de courte longueur d'onde ou par les impacts de particules chargées (ions, électrons) (Nagy et al., 2009; Yelle and Miller, 2004). Cette production pourrait être plus importante dans les zones aurorales où les lignes de champ magnétique convergent.

Moses and Bass (2000) développèrent un modèle photochimique 1D couplant la chimie des ions et des espèces neutres afin d'expliquer les profil verticaux de densité électronique observés par les sondes Voyager et Pioneer. Leur modèle inclut les taux de réactions ions-neutres de Kim and Fox (1994), utilisés pour la haute atmosphère de Jupiter. Nous rentrerons plus dans les détails concernant les travaux de Kim et al. dans le chapitre 4. Le modèle de Moses et Bass n'inclut pas les processus d'ionisation provoqués par les impacts électroniques. D'après leur travaux, l'inclusion des réactions ions-neutres cause une diminution de l'abondance de CH_4 dans la haute atmosphère ainsi qu'une augmentation de l'abondance des hydrocarbures possédant deux atomes de carbones ou plus.

La chimie des ions-neutres pourrait donc affecter les abondances des espèces neutres dans la stratosphère moyenne. Un calcul plus sophistiqué en ce qui concerne les ionisations par impact électronique serait en revanche nécessaire afin d'estimer l'effet de cette chimie aux hautes latitudes de la planète. Un tel modèle nécessiterait par exemple de calculer les flux d'électrons qui précipitent dans les régions aurorales à l'aide d'un modèle simulant la magnétosphère.

2.5 Conclusion / ouverture

Dans cette étude, nous avons développé un modèle photochimique à 2D (altitude-latitude) et saisonnier. Ce modèle couple la photochimie et le transport vertical et prend

en compte l'obliquité de Saturne ainsi que les paramètres saisonniers variables comme l'évolution du point subsolaire, la variation de la distance héliocentrique et l'occultation des anneaux. Pour la présente étude, le transport horizontal (advectif et diffusif) n'a pas été pris en compte. Le modèle présenté dans ce chapitre peut être donc vu comme une succession de modèles photochimiques à 1D, bien que le transfert radiatif UV soit calculé à 3D. Ce chapitre se focalise sur l'impact de la prise en compte d'un champ thermique variable de façon saisonnière.

Les principaux éléments clés et résultats de l'étude sont les suivants :

2.5.1 Variations saisonnières de C_2H_6 et C_2H_2

Les variations saisonnières des abondances de C_2H_6 et C_2H_2 deviennent importantes à des pressions inférieures à 0,1 mbar et sont maximales à $\approx 10^{-4}$ mbar, i.e. où ils sont produits. Ces composés sont connus pour se comporter comme les principaux refroidisseurs atmosphériques (Yelle et al., 2001) et nous avons donc, dans ce travail, souligné leurs variabilités saisonnières. La chimie qui mène à leur production est initiée par la photolyse du méthane, et donc dépend fortement des conditions d'insolation. La prise en compte de l'occultation des anneaux mène à la réduction de l'abondance de ces hydrocarbures sous l'ombre des anneaux. Cette réduction est légèrement plus marquée pour C_2H_2 que pour C_2H_6. L'influence des anneaux sur la photochimie diminue lorsque de la pression augmente.

2.5.2 Prise en compte du champ thermique saisonnier

Nous avons observé que la prise en compte d'un champ thermique saisonnier affecte la photochimie des hydrocarbures de deux façons. Tout d'abord, ce champ thermique affecte la position de l'homopause et par conséquent affecte les taux de production intégrés au dessus de 10^{-4} mbar.

Par ailleurs, prendre en compte un champ thermique saisonnier modifie l'efficacité du mélange vertical des composés atmosphériques via les contractions et dilatations saisonnières des colonnes atmosphériques. Ces contractions et dilatations vont affecter les distributions verticales des composés atmosphériques et vont augmenter l'efficacité de la diffusion de ces composés vers des niveaux de pression plus importants. Cet effet est corrélé avec les variations saisonnières de température, il est donc maximum aux niveaux des pôles.

À 10^{-4} mbar, les gradients saisonniers d'abondance de C_2H_6 et C_2H_2 sont généralement augmentés lorsque le champ thermique saisonnier est pris en compte. À ce niveau de pression et durant la saison estivale, C_2H_6 présente un gradient d'abondance positif, augmentant depuis l'équateur jusqu'au pôle d'été (Nord ou Sud). À 10^{-2} mbar, les gradients d'abondance saisonniers sont aussi augmentés : les abondances de C_2H_6 et C_2H_2

sont diminuées par rapport au cas (U) d'un facteur 2,1 et 2,3 à 80° dans l'hémisphère d'hiver ($L_s = 90°$ pour 80°S et L_s pour 80°N).

2.5.3 Comparaison avec les observations Cassini/CIRS

Notre modèle reproduit de façon satisfaisante les distributions d'abondance latitudinales de C_2H_6 et C_2H_2 observées à 1 mbar depuis l'équateur jusqu'aux latitudes moyennes en l'absence de transport latitudinal. Il ne reproduit cependant pas l'augmentation générale de l'abondance de C_2H_6 observée à 1 mbar depuis le pôle Nord jusqu'au pôle Sud. On note toutefois une caractéristique intéressante dans la distribution observée de C_2H_6 dans l'hémisphère sud. En effet, notre modèle sous-estime son abondance entre 40° et le pôle Sud pour des pressions de 5 - 0,1 mbar, tandis qu'il la sur-estime de 10° à 40° à des niveaux de pression de 5×10^{-3} - 0,1 mbar. Ces résultats sont cohérents avec ceux de Guerlet et al. (2009, 2010); Sinclair et al. (2013). Ils sont aussi observés pour C_2H_2 bien que moins prononcés. Quatre possibilités seraient à même d'expliquer les différences avec les observations : (i) la présence d'une circulation stratosphérique, (ii) un coefficient de diffusion turbulente qui varie avec la latitude, (iii) la présence de diffusion latitudinale, (iv) la chimie des ions et des neutres.

2.5.4 Implication pour les modèles radiatifs

La prise en compte des variations saisonnières d'abondance de C_2H_6 et C_2H_2 prédites par le modèle photochimique ont des implications importantes pour les modèles radiatifs ainsi que pour les GCMs. En effet, les températures prédites par ces modèles sont très sensibles aux variations d'abondance de ces composés. De 0,1 à 10^{-4} mbar et aux hautes latitudes, lorsque leurs variabilités saisonnières sont importantes, l'augmentation de l'abondance de ces refroidisseurs atmosphériques va contrebalancer l'augmentation de la quantité de rayonnement reçue à l'approche du solstice d'été. En fonction du rapport relatif entre les temps caractéristiques de production chimique par rapport au temps caractéristique radiatif, le pic de température associé au solstice d'été pourrait être décalé plus tôt, durant la saison de printemps, par rapport aux prédictions d'un modèle radiatif qui supposerait une distribution temporellement fixe d'abondance de ces composés. L'étude des rétroactions entre température et composition fait l'objet du chapitre 3 de cette thèse.

Chapitre 3

Couplage entre la composition chimique et la structure thermique de Saturne

Sommaire

3.1 Introduction 114
3.1.1 Structure thermique des planètes géantes 114
3.1.2 Régulation thermique stratosphérique 115
3.1.3 Abondances des régulateurs thermiques stratosphériques 116
3.2 Couplage des modèles photochimiques et radiatifs saisonniers 117
3.2.1 Modèle photochimique 117
3.2.2 Modèle radiatif 118
3.2.3 Couplage des modèles photochimique et radiatif 124
3.3 Rétroaction chimie-structure thermique 125
3.3.1 Effet du couplage à 10^{-2} mbar 127
3.3.2 Effet du couplage à 1 mbar 130
3.4 Comparaison avec les observations de Cassini/CIRS 133
3.4.1 Observations au nadir 134
3.4.2 Observations au limbe 137
3.4.3 Discussions 139
3.5 Conclusion 140

3.1 Introduction

3.1.1 Structure thermique des planètes géantes

Les structures thermiques des troposphères et stratosphères des planètes géantes ne sont pas contrôlées par les mêmes processus physiques. La basse troposphère est en effet opaque au rayonnement infrarouge interne des planètes. Ce rayonnement ne peut donc s'échapper de l'atmosphère de façon radiative et le système constitué par des cellules d'air chauffées à la base de la troposphère est instable vis-à-vis des cellules d'air, plus froides, situées au-dessus. Les cellules d'air situées au niveau inférieur s'élèvent en réponse à cette instabilité. Si cette ascension est considérée comme adiabatique et sans changement de phase, alors, et d'après le premier principe de la thermodynamique, l'expansion adiabatique des cellules de gaz ascendantes stabilise le système. Ainsi, le profil thermique troposphérique est déterminé par la capacité thermique du système, à savoir :

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}z} = -\frac{\bar{m}g}{C_p} \tag{3.1}$$

$$= -\Gamma_d \tag{3.2}$$

où g = gravité [$\mathrm{cm\,s^{-2}}$]
$\bar{m}$ = poids moléculaire moyen [$\mathrm{g\,mol^{-1}}$]
C_p = capacité thermique à pression constante [$\mathrm{erg\,mol^{-1}\,K^{-1}}$]
Γ_d = gradient adiabatique sec [$\mathrm{K\,cm^{-1}}$]

La troposphère est donc la région de l'atmosphère où le profil thermique décroît de façon monotone avec l'altitude suivant un gradient adiabatique sec (*dry adiabatic lapse rate*). Notons que la présence de composés condensables dans la composition chimique atmosphérique à des conditions de pression et température données peut modifier ce gradient de température. En effet, l'ascension des cellules de gaz atmosphériques peut s'accompagner d'une libération de chaleur latente associée à leur condensation, ce qui altère le bilan énergétique.

À des altitudes plus importantes, l'opacité atmosphérique vis-à-vis du rayonnement infrarouge diminue, et la convection n'est plus le mécanisme dominant de redistribution de chaleur. La transition entre la zone convective et la zone purement radiative (*radiative-convective boundary*), s'effectue au niveau de la haute troposphère et proche de la tropopause où le profil de température s'écarte progressivement d'un gradient purement adiabatique. Au dessus de cette région, dans la stratosphère, l'atmosphère peut être donc considérée comme étant à l'équilibre radiatif et son profil de température, en l'absence de sources de chaleur additionnelles, est constant (Irwin, 2009).

Les observations des températures stratosphériques des planètes géantes montrent une déviation par rapport à ce comportement (Greathouse et al., 2005; Guerlet et al., 2009). Des sources additionnelles d'énergie expliquent ces déviations par rapport à un profil isotherme. Dans le cas des planètes géantes, plusieurs sources additionnelles altèrent la structure thermique stratosphérique :

- absorption de rayonnement solaire par les molécules atmosphériques
- photodissociation de composés atmosphériques par absorption de rayonnement solaire UV
- absorption de rayonnement solaire par des aérosols stratosphériques
- émission de rayonnement infrarouge des molécules atmosphériques
- dissipation d'ondes atmosphériques se propageant verticalement dans l'atmosphère
- précipitations de particules énergétiques depuis la haute stratosphère

Nous allons considérer ici l'altération de la structure thermique des planètes géantes par la présence de molécules dans leur stratosphère.

3.1.2 Régulation thermique stratosphérique

La présence de molécules qui absorbent et émettent dans l'infrarouge modifie le budget radiative de la stratosphère des planètes géantes suivant (i) les conditions physiques qui y règnent (profil de pression-température, type de rayonnement reçu), et (ii) les caractéristiques spectroscopiques de ces constituants atmosphériques.

Les émissions infrarouges moléculaires impliquent des désexcitations de type vibrationnel et rotationnel. Le nombre de degrés de liberté vibrationels internes d'une molécule dépend du nombre de ses constituants. Plus celui-ci est élevé et plus la molécule a de modes de vibrations possibles. Une molécule qui contient N atomes a, par exemple, 3N-6 degrés de liberté vibrationnels si la molécule n'est pas linéaire et 3N-5 si elle l'est. Au spectre vibrationnel vient s'ajouter un spectre rotationnel, associé aux différents modes de rotation de celles-ci. Les écarts en énergie entre deux niveaux rotationnels successifs sont moins importants que les écarts en énergie entre deux niveaux successifs vibrationnels. La figure 3.1 illustre une partie du spectre rotationnel-vibrationnel de la molécule d'acétylène (C_2H_2). Les branches P, Q et R du spectre de C_2H_2 centré autour de $730\,cm^{-1}$ (mode de vibration ν_5) sont présentées sur cette figure. Ces différentes branches correspondent à différentes règles de transition entre ses niveaux rotationnels-vibrationnels.

Le refroidissement stratosphérique dû à l'émission infrarouge de certains composés fut initialement prédit par Cess and Chen (1975) pour Jupiter. Ceux-ci montrèrent que les émissions thermiques des molécules C_2H_2 ainsi que C_2H_6 permettaient à la fois de supplanter l'émission thermique de CH_4 ainsi que de diminuer de 20 K la température stratosphérique par rapport au cas où les émissions de C_2H_2 et C_2H_6 ne sont pas prises en compte.

Ces émissions infrarouges vont par ailleurs dépendre de l'abondance des molécules émettrices. Nous allons maintenant voir comment ces abondances sont prises en compte

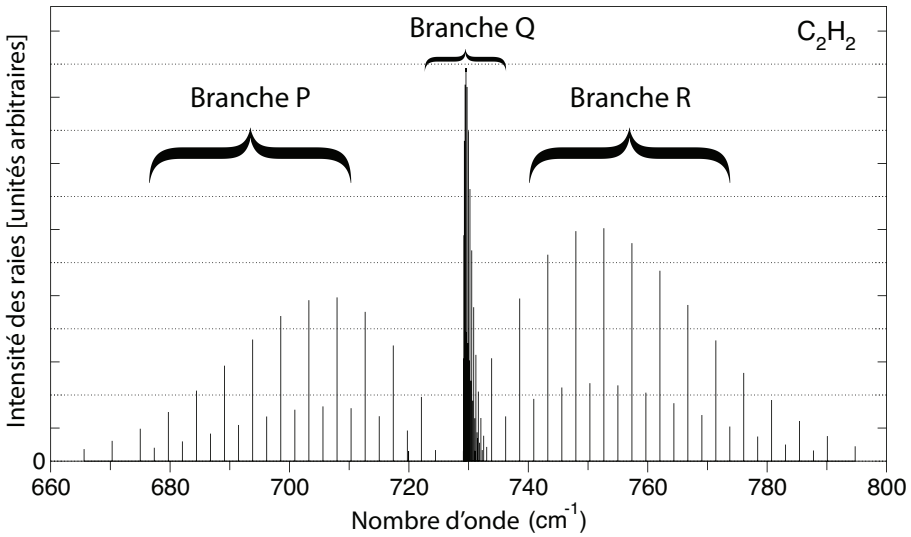

Figure 3.1 – Spectre rotationnel-vibrationnel de C_2H_2 autour de $730\,cm^{-1}$. Tiré de *www.spectralcalc.com*.

dans les modèles radiatifs. Nous nous restreindrons, dans la suite de ce chapitre, à l'étude de la stratosphère de Saturne.

3.1.3 Abondances des régulateurs thermiques stratosphériques

Plusieurs modèles radiatifs ont, avant la mission Cassini, tenté de prédire le profil stratosphérique de Saturne. Cess and Caldwell (1979) et Carlson et al. (1980) prirent en compte les variations annuelles d'ensoleillement dans un modèle radiatif saisonnier. Ils y inclurent l'absorption du rayonnement solaire en tenant compte des opacités de CH_4 et C_2H_6 via un terme de refroidissement newtonien (relaxation de la température vers une température donnée). Leur modèle permit de prédire des variations saisonnières importantes de température aux hautes latitudes. Par la suite, Appleby and Hogan (1984) développèrent un modèle radiatif pour Jupiter et Saturne en y incluant les opacités de CH_4, C_2H_2 et C_2H_6, à la fois pour le rayonnement solaire ainsi que pour le flux thermique des planètes. Bézard and Gautier (1985) prirent en compte ces mêmes opacités, tout en ajoutant les variations saisonnières d'ensoleillement ainsi que l'occultation des anneaux de Saturne et montrèrent que ces anneaux avaient un effet non-négligeable sur les températures stratosphériques.

L'ensemble de ces modèles radiatifs suppose une distribution constante en latitude et avec la saison des composés qui affectent la budget radiative stratosphérique. Ces distributions sont généralement contraintes par les observations et prises constantes sur

la gamme de pression considérée. Plus récemment, Greathouse et al. (2008), Friedson and Moses (2012) et Guerlet et al. (2014) ont développé des modèles radiatifs saisonniers de Saturne, dans lesquels ils ont inclus les processus physiques suivants :

- variations saisonnières d'ensoleillement
- occultation des anneaux
- profils verticaux observés par Cassini de CH_4, C_2H_2 et C_2H_6
- opacité des aérosols (seulement prise en compte par Friedson and Moses (2012) et Guerlet et al. (2014))

Dans le chapitre 2, nous avons vu que la variation saisonnière d'ensoleillement à une latitude donnée avait un effet important sur la photochimie de Saturne. Par ailleurs, la sonde Cassini a montré que cette variation saisonnière d'ensoleillement était aussi responsable d'une asymétrie nord-sud dans sa température stratosphérique (Fletcher et al., 2010).

Bien que les modèles à deux dimensions de Greathouse et al. (2008), Friedson and Moses (2012) et Guerlet et al. (2014) tiennent compte de l'évolution de l'ensoleillement en fonction de la latitude, ils ne prennent pas en compte les évolutions temporelles et latitudinales des abondances des molécules responsables de la régulation thermique stratosphérique. Tandis que CH_4 peut être considéré comme étant mélangé de façon homogène (Greathouse et al., 2005; Fletcher et al., 2007b), il en est autrement pour C_2H_2 et C_2H_6, car

- ces molécules présentent des variations saisonnières stratosphériques importantes (voir chapitre 2)
- elles contribuent de façon prépondérante au refroidissement de la stratosphère (voir les modèles de Cess and Chen (1975) et Yelle et al. (2001) pour Jupiter et Bézard and Gautier (1985) et Greathouse et al. (2008) pour Saturne)

Dans ce chapitre, nous allons coupler notre modèle photochimique avec le modèle radiatif saisonnier de Greathouse et al. (2008). Notre objectif est d'évaluer l'importance des rétroactions entre les variations spatio-temporelles des distributions de C_2H_2 et C_2H_6 et le champ thermique. Dans un premier temps, nous présenterons ces deux modèles ainsi que la façon dont ils ont été couplés. Dans un second temps, nous exposerons les résultats de ce couplage. Enfin, nous comparerons les résultats obtenus avec les observations de Cassini/CIRS.

3.2 Couplage des modèles photochimiques et radiatifs saisonniers

3.2.1 Modèle photochimique

Les abondances des composés atmosphériques ont été calculées à l'aide du modèle photochimique saisonnier de Saturne présenté dans le chapitre 2 de cette thèse. Les ca-

ractéristiques principales de ce modèle sont les suivantes :
- modèle 2D (altitude-latitude)
- transport latitudinal désactivé
- évolution saisonnière de la latitude subsolaire et de la distance héliocentrique
- occultation par les anneaux
- réseau chimique réduit présenté dans la partie 1.7.1
- champ thermique saisonnier qui provient du modèle radiatif présenté ci-dessous

3.2.2 Modèle radiatif

Dans cette partie, nous présenterons tout d'abord les caractéristiques générales du modèle radiatif de Greathouse et al. (2008). Nous exposerons alors les différentes sources d'opacité qui sont prises en compte dans ce modèle. Nous introduirons brièvement la méthode utilisée pour calculer le transfert de rayonnement. Enfin, nous présenterons quelques résultats issus d'une simulation nominale du modèle radiatif.

Caractéristiques générales

Le champ thermique est calculé à l'aide du modèle radiatif de Greathouse et al. (2008). De façon cohérente avec le modèle photochimique présenté dans le chapitre 2, il prend en compte les processus physiques suivants :
- évolution saisonnière de la latitude subsolaire et la distance héliocentrique
- occultation par les anneaux
- abondances des composés majoritaires cohérentes avec le modèle photochimique (H_2, He, CH_4, C_2H_2, C_2H_6)

La prise en compte de l'occultation des anneaux se fait par la méthode proposée par Bézard (1986), et les opacités considérées proviennent de mesures effectuées par Voyager/UVS et Voyager/PPS (Moses and Greathouse, 2005). Une différence notable entre le modèle photochimique et le modèle radiatif est que ce dernier n'inclut pas les diffusions Rayleigh multiples. Par ailleurs, le modèle radiatif néglige la présence des aérosols, contrairement aux modèles de Cess and Caldwell (1979), Bézard and Gautier (1985), Friedson and Moses (2012) et Guerlet et al. (2014). Négliger l'opacité de ces aérosols cause un écart dans la prédiction des températures troposphériques de l'ordre de 5-10 K par rapport aux observations Cassini (Fletcher et al., 2007b, 2010). Rappelons ici que le but initial du modèle radiatif est de reproduire les températures stratosphériques, typiquement à des pressions inférieures à 10 mbar. Ainsi, négliger les aérosols impacte les températures stratosphériques au-dessus de 30 mbar d'environ 1 K aux niveaux des pôles et d'environ 0.1 K à l'équateur. Par ailleurs, ce modèle suppose que l'atmosphère est à l'équilibre thermodynamique local (LTE). Les effets non-LTE commencent à devenir importants à des pressions inférieures à 10^{-3} mbar (Appleby, 1990). Ainsi, le domaine de validité des températures s'étend de 30 mbar à 10^{-3} mbar.

L'évolution de la température à un niveau de pression et une latitude donnés est régie par l'équation suivante (Bézard and Gautier, 1985) :

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = \frac{\bar{m}g}{C_p}\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}p} \tag{3.3}$$

où F = flux lumineux aux pression et latitude correspondantes [$\mathrm{J\,s^{-1}\,cm^{-2}}$]
p = pression[mbar]

Le flux lumineux considéré dans l'équation 3.3 correspond au flux lumineux solaire arrivant des couches plus hautes de l'atmosphère ainsi qu'au flux thermique de la planète, de sorte que :

$$F = F_{solaire} + F_{IR} \tag{3.4}$$

Les sources d'opacité à prendre en compte dépendent des flux considérés dans le problème. L'émission thermique de Saturne peut être, en première approximation, modélisée par une fonction de corps noir à une température de 95 K (Irwin, 2009). La figure 3.2 représente les courbes de corps noirs de Saturne et du Soleil à 9,5 ua. Le flux thermique émis par Saturne devient supérieur au flux solaire reçu par cette planète pour des nombres d'onde inférieurs à $900\,\mathrm{cm^{-1}}$ (11,1 μm).

Les principales sources d'opacité pour le flux thermique de Saturne qui sont responsables du refroidissement de cette planète sont situées entre l'infrarouge moyen et l'infrarouge lointain. C'est sur cet intervalle que la fonction de Planck du rayonnement de corps noir de Saturne est supérieure à celle du Soleil à 9,5 ua.

Au-delà de cette limite, lorsque le rayonnement de corps noir solaire devient supérieur au rayonnement thermique de Saturne, seules les sources d'opacité pour le rayonnement solaire sont considérées.

Nous présentons maintenant les sources d'opacité prises en compte dans le modèle radiatif pour chacune des composantes thermiques et solaires.

Sources d'opacité

Nous différencierons ici les sources d'opacité suivant leur interaction avec le flux thermique ou avec le flux solaire.

• *Sources d'opacité du flux thermique*

Les sources d'opacité dans l'infrarouge moyen, de $600\,\mathrm{cm^{-1}}$ (16,7 μm) à $1600\,\mathrm{cm^{-1}}$ (6,25 μm), considérées ici sont les transitions rotationnelles-vibrationnelles de CH_4, C_2H_2 et C_2H_6. La figure 3.3 présente les spectres de ces molécules ainsi que l'évolution des flux

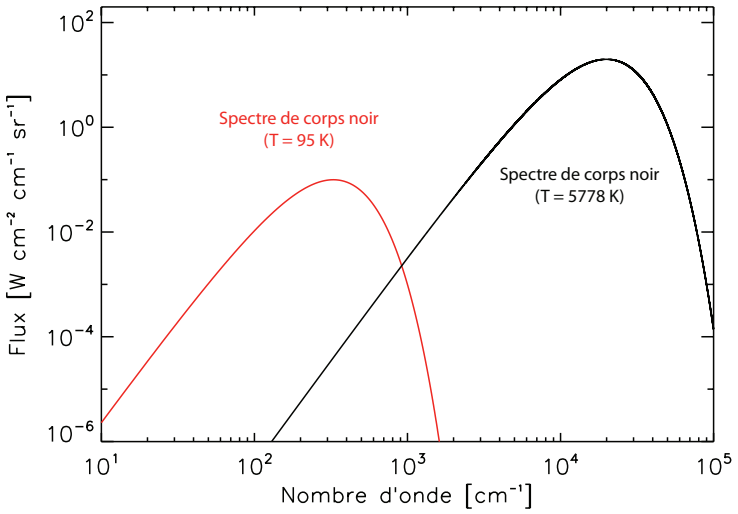

Figure 3.2 – Spectre de corps noir de Saturne (courbe rouge) et du soleil à 9,5 ua (courbe noire) en fonction du nombre d'onde.

solaires et thermiques dans l'infrarouge moyen. Les données spectroscopiques sont tirées de la base de données HITRAN 2004 (Rothman et al., 2005).

Sur cet intervalle spectral, seules sont considérées les sources d'opacité de CH_4, centrées autour de 1300,cm^{-1} (7,7 μm) ainsi que celles de C_2H_2 et C_2H_6, respectivement centrées autour de 730 cm^{-1} (13,7 μm) et de 821 cm^{-1} (12,2 μm). L'opacité des raies de C_2H_2, centrées autour de 1320 cm^{-1} (7,6 μm) ne sera pas prise en compte car :

- le flux thermique de Saturne est plus faible de plus de deux ordres de grandeur à 1320 cm^{-1} par rapport à 730 cm^{-1}
- l'abondance de C_2H_2 est globalement plusieurs ordres de grandeurs inférieures à celle de CH_4

Les données spectroscopiques des transitions rotationnelles-vibrationnelles proviennent des sources suivantes :

- CH_4 : base de données spectroscopiques HITRAN 2004 (Rothman et al., 2005)
- C_2H_6 : (Vander Auwera et al., 2007)
- C_2H_2 : base de données spectroscopiques GEISA 2003 (Jacquinet-Husson et al., 1999)

Notons que les opacités de la phosphine (PH_3) ainsi que de l'ammoniac (NH_3), qui présentent de nombreuses raies rotationnelles-vibrationnelles dans l'infrarouge moyen, ne sont pas prises en compte dans ce modèle. En effet, ces molécules sont seulement présentes dans la troposphère de Saturne (Fletcher et al., 2007a; Fletcher et al., 2009).

Des sources d'opacité additionnelles sont à considérer dans l'infrarouge. Elles proviennent des interactions entre les composés majoritaires. En effet, les interactions H_2-H_2, H_2-He ainsi que H_2-CH_4 génèrent des dipôles induits et donc des spectres de transitions rotationnelles-vibrationnelles et rotationnelles-translationnelles (Birnbaum et al., 1996). Jusqu'à 600 cm^{-1} (16,7 μm), la source d'opacité est l'absorption induite par les collisions

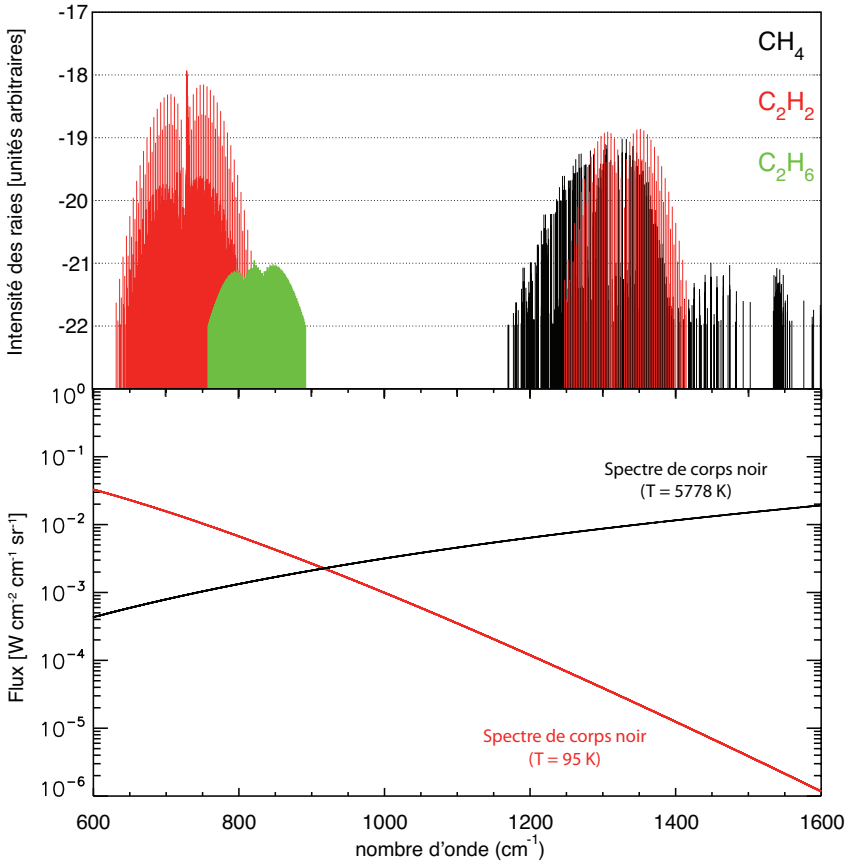

Figure 3.3 – En haut : spectres rotationnels-vibrationnels de CH_4, C_2H_2 et C_2H_6 dans l'infrarouge moyen, de 600 cm^{-1} (16,7 μm) à 1600 cm^{-1} (6,25 μm), tiré de *www.spectralcalc.com*. En bas : évolution des flux thermique de Saturne (en rouge) et solaire reçut à 9,5 ua (en noir) sur le même interval spectral.

(CIA) de H_2-H_2 (Borysow et al., 1985), H_2-He (Borysow et al., 1988) et H_2-CH_4 (Borysow and Frommhold, 1986). Notons que les temps de vie des niveaux d'énergie généralement peuplés par les phénomènes d'absorption induite par collisions sont extrêmement brefs (inférieurs à 10^{-12} s). D'après le principe d'incertitude, les largeurs de bande correspondantes sont de l'ordre de la dizaine de cm^{-1} (Frommhold, 2006).

• *Sources d'opacité du flux solaire*

Pour des nombres d'onde de 2000 cm^{-1} (5 μm) à 10^5 cm^{-1} (100 nm), le flux solaire est plus important que le flux thermique de Saturne.

Dans l'infrarouge proche, de 2000 cm^{-1} (5 μm) à 9500 cm^{-1} (1,05 μm), ainsi que dans le visible, de 9523 cm^{-1} (1 μm) à $3{,}3\times10^4$ cm^{-1} (300 nm), les principales sources d'opacité sont CH_4 dans la stratosphère, et les CIA de H_2-H_2 dans la troposphère (Greathouse et al., 2008).

Dans le domaine ultraviolet, de 4×10^4 cm^{-1} (250 nm) à 1×10^5 cm^{-1} (100 nm), les opacités viennent de CH_4, C_2H_2 et C_2H_6.

Le chauffage stratosphérique est majoritairement contrôlé par l'absorption du rayonnement proche-infrarouge par CH_4. Il est complété par une composante troposphérique, qui est due aux CIA de H_2-H_2.

Transfert radiatif

La prise en compte exacte du calcul du spectre d'émission thermique se fait théoriquement à l'aide des méthodes raies-par-raies (*line-by-line*). Cette méthode permet de calculer le coefficient d'absorption dû aux composés considérés à chaque longueur d'onde. Ce calcul dans l'infrarouge est une opération très couteuse en temps de calcul du fait de la présence de nombreuses transitions dans cette gamme du spectre. Des méthodes approchées, telles que les modèles de bandes permettent de calculer les spectres d'absorption/d'émission sur une largeur de bande donnée, qui comprend plusieurs transitions. Suivant les caractéristiques spectrales des composés atmosphériques considérés, deux types de modèles de bandes existent ; les modèles de bandes réguliers (*Elsasser Band Model*, (Elsasser, 1942)), ou les modèles de bandes aléatoires (tels que celui utilisé par Bézard and Gautier (1985)).

Un autre moyen efficace pour prendre en compte les nombreuses transitions dans l'infrarouge est d'utiliser la méthode des k-corrélés (Goody et al., 1989; Lacis and Oinas, 1991). Elle consiste à grouper, à l'intérieur d'un intervalle spectral, les coefficients d'absorption par ordre de grandeur. Typiquement, sur un intervalle spectral donné, le nombre de transitions augmente inversement avec l'intensité des transitions, i.e. il y a de nombreuses transitions de faibles intensités et peu de transitions de fortes intensités. À l'aide de cette méthode, le calcul de la transmission spectrale atmosphérique ne s'effectue pas dans l'espace des fréquences, où la distribution des transitions est très éparse (voir figure 3.3 par exemple), mais plutôt dans l'espace de la distribution cumulée des coefficients d'absorption, où celle-ci est monotone. Cette méthode permet un gain de temps de calcul considérable, tout en assurant une précision raisonnable et est donc utilisée dans ce modèle de transfert.

Le calcul de la déposition du flux solaire depuis l'infrarouge proche jusqu'au domaine ultraviolet s'effectue suivant une loi d'atténuation de Beer-Lambert (méthode *Direct-Beam*).

La figure 3.4 représente le spectre émis de Saturne en sortie du modèle radiatif, depuis l'infrarouge lointain jusqu'au domaine UV. Les CIA affectent le spectre infrarouge à des nombres d'onde inférieurs à $200\,\mathrm{cm}^{-1}$ ainsi qu'au nombre d'onde $500\,\mathrm{cm}^{-1}$. Dans l'infrarouge moyen, les émissions atmosphériques causées par CH_4, C_2H_2 et C_2H_6 sont identifiables à 1300,cm^{-1} (7,7 μm), $730\,\mathrm{cm}^{-1}$ (13,7 μm) ainsi que $821\,\mathrm{cm}^{-1}$ (12,2 μm), respectivement. Pour comparaison, le spectre solaire (Tobiska et al., 2000) reçu par Saturne est présenté sur cette figure.

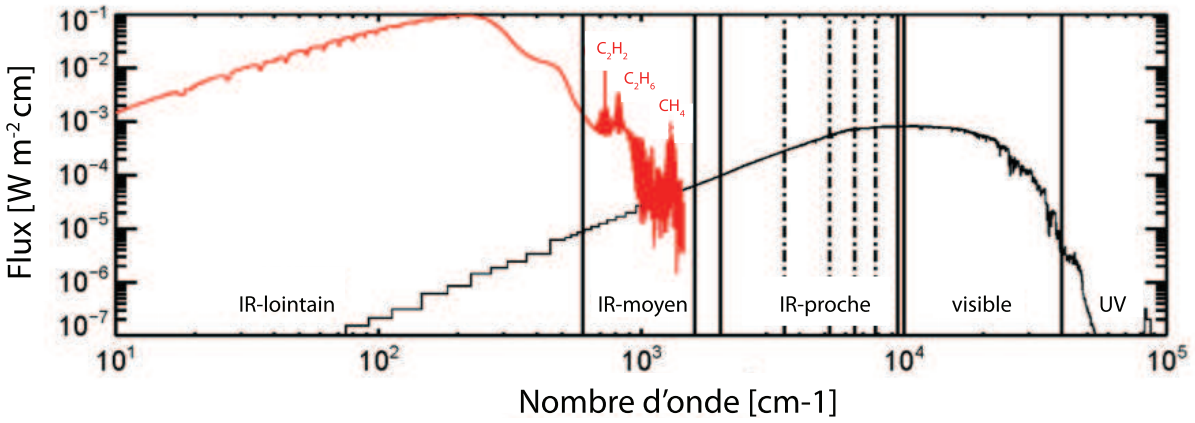

Figure 3.4 – Représentation du flux thermique émis par Saturne (en rouge) tenant compte de l'ensemble des sources d'opacité dans l'infrarouge lointain (10 cm^{-1} à 600 cm^{-1}) ainsi que l'infrarouge moyen (600 cm^{-1} à 1600 cm^{-1}). Le spectre solaire reçu par Saturne, à 9,5 unités astronomiques est représenté en noir. Les différents traits verticaux représentent les régions du spectre discutées dans le texte. Tiré de Greathouse et al. (in prep.), avec permission.

Variations saisonnières des taux de refroidissement atmosphérique

Nous présentons ici les résultats qui correspondent au modèle initial de Greathouse et al. (2008). Celui-ci inclut des profils verticaux de CH_4, C_2H_2 et C_2H_6 qui ont été soit observés, soit calculés de façon théorique. Le profil vertical de CH_4 provient du modèle photochimique de Moses and Greathouse (2005). Les profils verticaux de C_2H_2 et C_2H_6 sont tirés des observations de Cassini/CIRS (Guerlet et al., 2009). Dans cette première simulation, les variations latitudinales et temporelles des profils verticaux de ces trois composés sont négligées. Ces profils de C_2H_2 et C_2H_6 utilisés dans le modèle radiatif sont ceux observés à une latitude planétographique de 45°. Notons que le champ thermique prédit par cette simulation initiale est identique à celui utilisé dans le cas d'étude (S) présenté dans le chapitre 2. Par la suite, nous nommerons l'ensemble des profils de température produit par cette simulation initiale *champ thermique initial*.

Les taux de refroidissement causés par les différentes sources d'opacité du flux thermique de la planète à une latitude planétocentrique de 87°S sont présentés sur la figure 3.5 aux différents solstices et équinoxes (L_s = 0°, 90°, 180°, 270°, voir figure 2.1). Ces taux sont présentés à une latitude de 87°S, là où les variations saisonnières d'ensoleillement et donc les variations de ces taux sont importantes. Dans la haute stratosphère, à des pressions inférieures à 7×10^{-2} mbar, C_2H_2 est le principal responsable du refroidissement atmosphérique. Dans la stratosphère moyenne, de 7×10^{-2} mbar à 3-5 mbar, C_2H_6 domine le refroidissement atmosphérique, hormis à l'équinoxe de printemps dans l'hémisphère sud (L_s = 180°). En effet, à ce moment de l'année, les températures atmosphériques à cette latitude sont très faibles, et C_2H_6 est le principal refroidisseur à des pressions de 7×10^{-2} mbar à 0,4 mbar. Enfin, dans la basse stratosphère, à des pressions supérieures à 3-5 mbar, les absorptions induites par collisions (CIA) sont les principaux processus de

refroidissement, hormis à $L_s = 180°$, où ce processus devient dominant à des pressions supérieures à 0,4 mbar. En revanche, le refroidissement causé par la bande du CH_4 à 1300,cm^{-1} (7,7,μm) reste minoritaire par rapport aux refroidissements causés par C_2H_2 et C_2H_6.

3.2.3 Couplage des modèles photochimique et radiatif

Nous allons maintenant exposer comment a été effectué le couplage entre les deux modèles qui viennent d'être présentés. L'ensemble des calculs radiatifs ont été effectué par T. Greathouse. L'auteur de cette thèse a effectué les calculs photochimiques lors d'une collaboration avec T. Greathouse de plusieurs mois au *Southwest Research Institute*. Les résultats de cette étude ont été soumis à la revue Icarus (Hue et al., 2015b)

Dans un premier temps, le modèle radiatif est exécuté avec, comme conditions initiales pour les profils en altitude de C_2H_2 et C_2H_6, ceux observés par Cassini/CIRS à 45°S (Guerlet et al., 2009).

Dans un second temps, le modèle photochimique saisonnier est exécuté avec ce champ thermique initial. Les champs d'abondance de CH_4, C_2H_2 et C_2H_6 en fonction de l'altitude, de la latitude et de la saison alors calculés sont identiques aux champs d'abondance présentés dans le cas d'étude (S) du chapitre 2.

Ces champs d'abondance sont ensuite utilisés comme a priori dans la distribution de CH_4, C_2H_2 et C_2H_6 du modèle radiatif saisonnier, qui est intégré sur 3 orbites, et ceci afin que les températures atteignent une convergence saisonnière. Cette deuxième simulation du modèle radiatif prédit un nouveau champ thermique. Celui-ci est alors utilisé dans le modèle photochimique qui est alors intégré jusqu'à atteindre la convergence saisonnière. Celle-ci est atteinte en ~ 30 orbites. Nous avons procédé par itérations successives jusqu'à ce que les différences dans le champ thermique d'une itération à l'autre soient inférieures à 0,5 K. À chaque itération, le temps de calcul nécessaire au modèle radiatif pour intégrer sur 3 orbites est de 3 jours. Le temps de calcul nécessaire au modèle photochimique pour intégrer sur 30 orbites est d'environ 5 jours. Le modèle radiatif considère 63 niveaux verticaux et 19 niveaux latitudinaux. Le modèle photochimique considère 118 niveaux verticaux et 17 niveaux latitudinaux.

Un schéma qui représente le couplage entre les deux modèles discutés ci-dessus est présenté sur la figure 3.6. Dans la présentation des champs d'abondance et thermique obtenus par la suite, nous utiliserons les mêmes styles de courbe pour le champ thermique ainsi que pour les champs d'abondance ayant permis de calculer ce champ thermique.

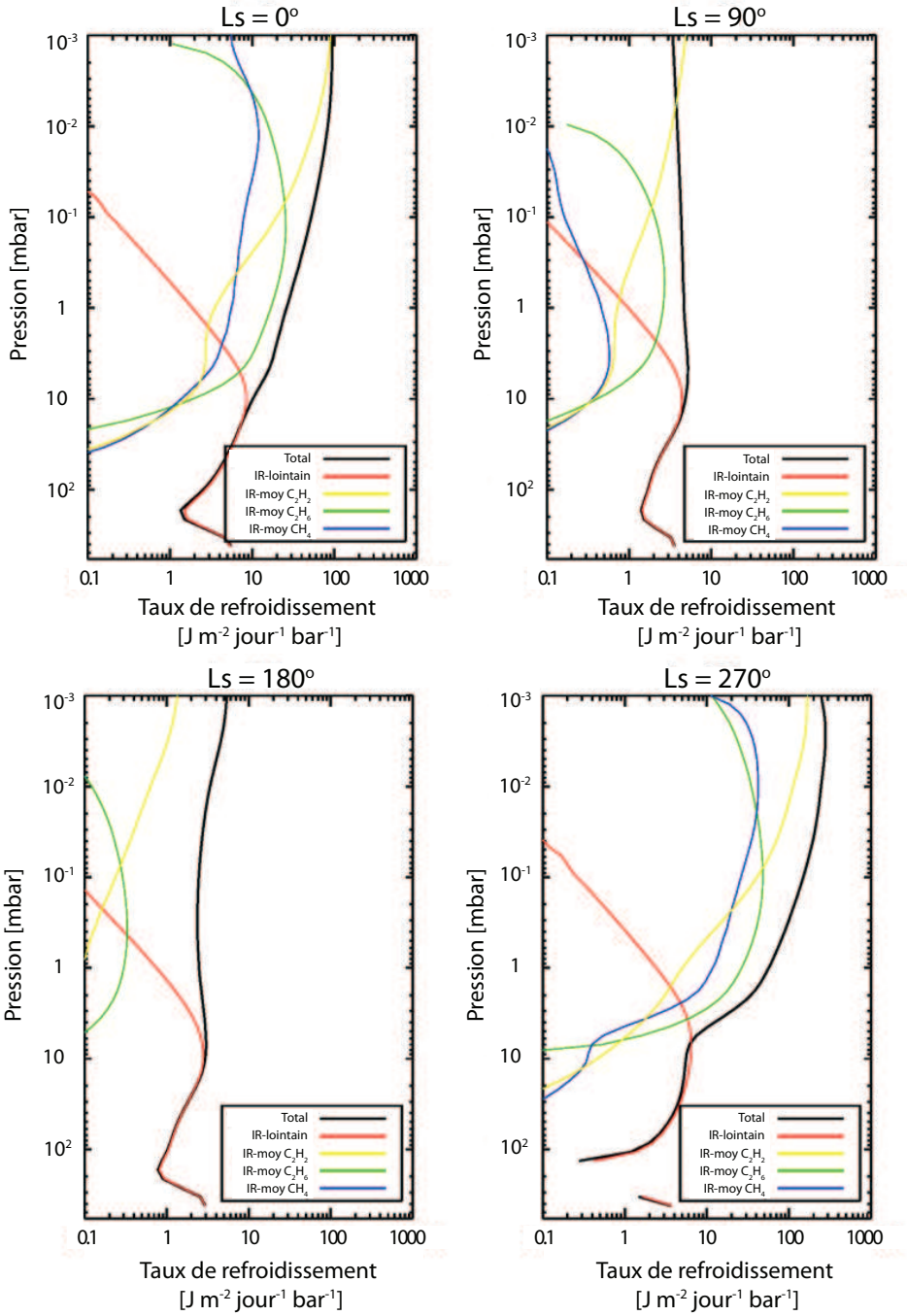

Figure 3.5 – Représentations graphiques des taux de refroidissement causés par CH_4 (bleu), C_2H_2 (jaune) et C_2H_6 (vert) ainsi que par les absorptions induites par collisions (rouge). La somme de l'ensemble de ces contributions est représentée en noir. Ces taux sont présentés à une latitude planétocentrique de 87°S aux moments des différents solstices et équinoxes : $L_s = 0°$ (haut à gauche), $L_s = 90°$ (haut à droite), $L_s = 180°$ (bas à gauche) et $L_s = 270°$ (bas à droite).

3.3 Rétroaction entre la composition chimique et la température stratosphérique

Nous avons précédemment montré que, suivant le niveau de pression et la saison considérés, différentes molécules contrôlaient les taux de refroidissement stratosphériques. Nous

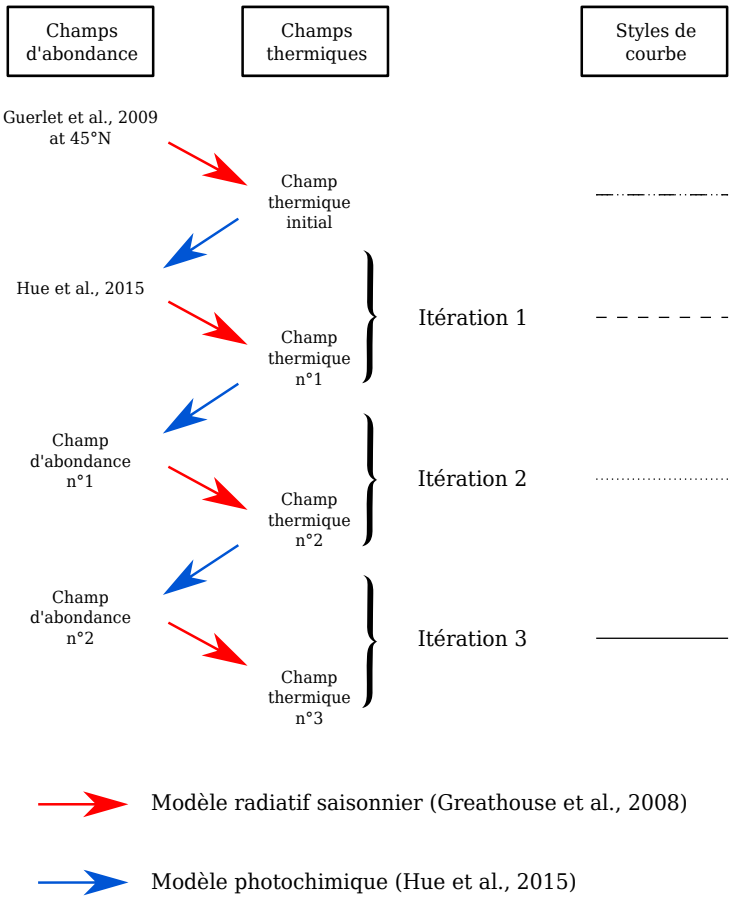

Figure 3.6 – Représentation du couplage entre les modèles radiatif saisonnier de Greathouse et al. (2008) et photochimique de Hue et al. (2015a). L'utilisation du champ thermique initial dans le modèle photochimique mène au champ d'abondance présenté dans le chapitre 2 de cette thèse. Les flèches rouges et bleues représentent respectivement l'utilisation des modèles radiatif et photochimique saisonniers.

allons donc maintenant présenter l'évolution des champs thermique et d'abondance aux différentes itérations, pour deux niveaux de pression : 10^{-2} mbar (figure 3.7) et 1 mbar (figure 3.10), i.e. là où C_2H_2 et C_2H_6 contrôlent le refroidissement stratosphérique.

Par ailleurs, Moses and Greathouse (2005), Hue et al. (2015a) ainsi que Greathouse et al. (2008) ont montré que l'obliquité de 26,7° de Saturne causait des effets saisonniers forts sur les champs d'abondance ainsi que sur le champ de température, et ce, de façon d'autant plus importante que la latitude est grande. Dans ce qui suit, nous allons présenter les résultats du couplage aux latitudes de 80°S et 40°N, là où ce dernier est important. Notons que, dans ce qui suit, les différentes saisons nommées feront références aux saisons de l'hémisphère sud.

3.3.1 Effet du couplage à 10^{-2} mbar

À 10^{-2} mbar (figure 3.7), la simulation initiale du modèle radiatif (i.e. champ thermique initial), prédit que le pic de température (graphique du haut) se produit proche du solstice d'été à 80°S. Dans cette simulation initiale, les abondances de C_2H_2 et C_2H_6 ne varient ni avec la saison, ni avec la latitude. Seuls l'angle zénithale et la distance héliocentrique contrôlent la position temporelle de ce pic.

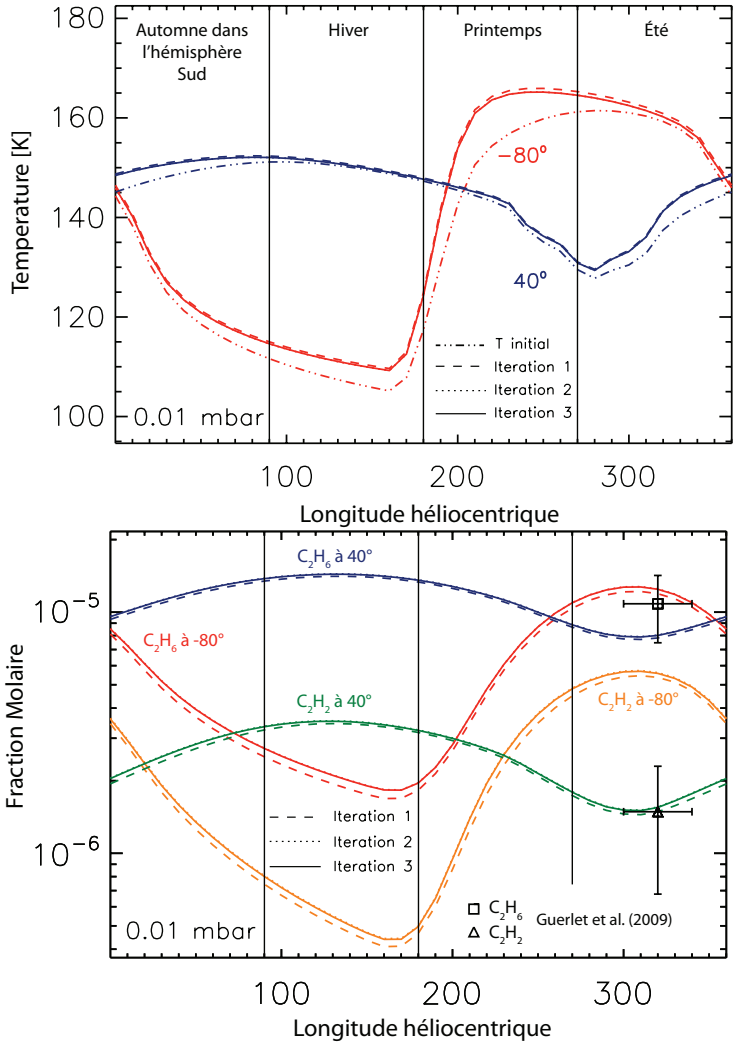

Figure 3.7 – Évolution saisonnière de la température (en haut) et des abondances de C_2H_2 et C_2H_6 (en bas) à 10^{-2} mbar et aux latitudes de 80°S et 40°N. Les différentes itérations sont représentées par les différentes types de traits (voir figure 3.6). À 40°N, C_2H_2 et C_2H_6 sont respectivement représentés en vert et bleu, alors qu'à 80°N, ils sont représentés en orange et rouge. Les données illustrées par un carré et un triangle représentent les abondances observées par Cassini (Guerlet et al., 2009) et utilisées pour calculer le champ thermique initial. L'incertitude horizontale sur ces données provient de la fenêtre temporelle sur laquelle elles ont été mesurées.

Après la première itération avec le modèle photochimique, la température stratosphé-

rique à 80°S subit des changements importants par rapport au champ thermique initial. En effet, le modèle radiatif saisonnier suppose maintenant une distribution latitudinalement et temporellement variable. Le pic de température à 10^{-2} mbar et 80°S est décalé plus tôt dans le temps, avant le solstice d'été dans l'hémisphère sud. L'origine de ce pic provient des plus faibles quantités de C_2H_2 et C_2H_6 prédites par le modèle photochimique au moment du printemps par rapport aux abondances initiales (illustrés par les symboles carré et triangle). Ainsi, au début du printemps, l'augmentation de la température, principalement causée par l'absorption des photons solaires proche-infrarouge par CH_4 dont l'abondance est supposée constante, est moins efficacement contre-balancée par les refroidissements dus à C_2H_2 et C_2H_6, tous deux moins abondants qu'à l'itération précédente. Plus tard, durant le printemps, lorsque la photolyse du CH_4 a mené à la production d'une quantité importante de C_2H_2 et C_2H_6, la température montre une tendance opposée et décroit à partir de la mi-printemps ($L_s = 230°$).

Par ailleurs, durant l'automne et l'hiver, les abondances de C_2H_2 et C_2H_6 prédites par le modèle photochimique à l'itération 1 sont globalement plus faibles que les abondances observées et utilisées comme a priori pour calculer le champ thermique initial. Les températures prédites par le modèle radiatif à l'itération 1 sont plus chaudes que celles prédites par le champ thermique initial. Les différences atteignent jusqu'à 6,9 K à la fin de l'hiver, à $L_s = 180°$.

Les évolutions saisonnières des champs thermiques aux itérations 2 et 3 sont très proches de celles prédites à l'itération 1, même au printemps, où des différences inférieures à 1 K sont notées. La convergence entre les deux modèles est atteinte à l'itération 2 à ce niveau de pression.

Le moment de l'année pour lequel les champs thermiques initial et couplé (itération 3) atteignent leurs valeurs maximales saisonnières est présenté sur la figure 3.8. À 80°S, le pic de température saisonnier du champ thermique initial est décalé temporellement par rapport à celui du champ thermique couplé. Le pic de température à l'itération 3 se produit maintenant 37° de longitude héliocentrique plus tôt que dans le champ thermique initial. À cette latitude, ce décalage correspond à $\sim$ 2,8 années terrestres. Notons qu'à 80°N, du fait de l'orbite excentrique de Saturne, le pic de température est décalé de 47° de longitude héliocentrique, correspondant à 4,2 années terrestres. À des niveaux de pression plus importants, ce décalage temporel décroit, pour finalement devenir très faible à des pressions supérieures à 1 mbar.

La modification du champ thermique dans le modèle photochimique affecte les champs d'abondance des espèces de deux manières (Hue et al., 2015a). Tout d'abord, cette modification affecte la position de l'homopause, et la décale à des niveaux de pression plus faibles si le champ thermique devient plus chaud. Ce décalage dans la position de l'homopause va alors affecter les taux de production des radicaux chimiques issus de la photolyse du CH_4, ce qui affecte par conséquent la production des hydrocarbures. Ensuite, une augmentation du gradient saisonnier de température affecte la diffusion des produits de la photolyse du CH_4 vers des niveaux de pression plus importants, via une contraction/dilatation saisonnière plus importante des colonnes atmosphériques. En effet, Hue et al. (2015a) ont

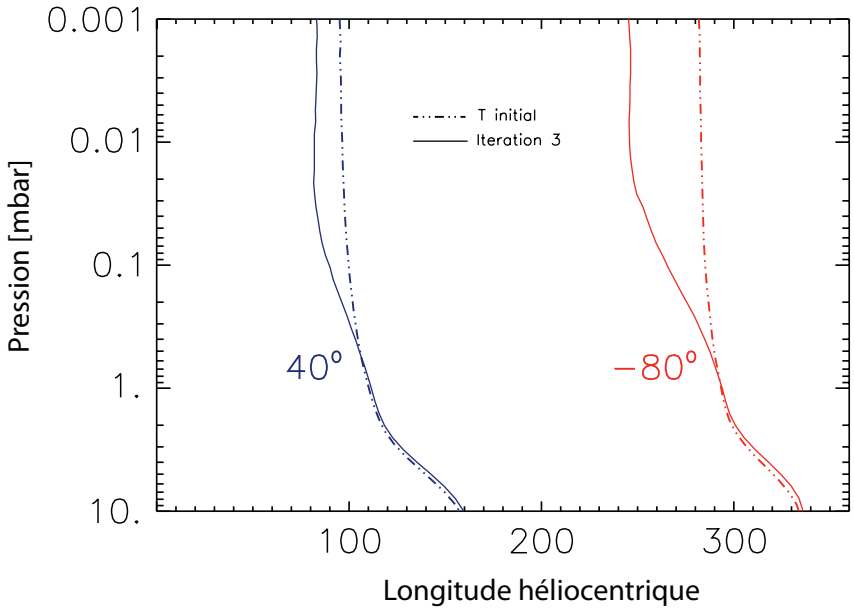

Figure 3.8 – Évolution de la position temporelle du pic de température à 80°S (rouge) et 40°N (bleu) en fonction du niveau de pression. Les champs thermiques initial et couplé sont représentés par les traits en tirets-double points et par les traits pleins, respectivement.

montré que lorsque l'atmosphère se contracte durant l'hiver, le gradient vertical altitudinal de fraction molaire augmente et provoque une augmentation de la diffusion de ces composés vers des niveaux de pression plus importants.

Ce dernier effet est observé durant l'hiver bien que celui-ci ne soit pas significatif lorsqu'il est comparé aux barres d'erreur des observations de Cassini/CIRS. Les températures prédites par le modèle radiatif saisonnier à l'itération 3 sont en effet plus grandes que celles prédites par le champ thermique initial. Ainsi, la contraction de la colonne atmosphérique à cette période de l'année est moins importante. Ceci réduit la diffusion provoquée par cette contraction/dilatation et provoque des abondances légèrement plus importantes de C_2H_2 et C_2H_6 aux itérations 2 et 3 par rapport à l'itération 1.

Par ailleurs, le pic saisonnier prématuré qui est prédit par le champ thermique couplé provoque des abondances de C_2H_2 et C_2H_6 plus importantes aux itérations 2 et 3 par rapport à l'itération 1. Notons que cet effet reste très faible, largement sous les barres d'erreur observationnelles. En effet, le décalage de l'homopause à des pressions plus faibles, causé par le champ thermique plus chaud de l'itération 2 par rapport à l'initial déclenche la production d'une quantité légèrement plus importante de C_2H_2 et C_2H_6 au-dessus de ce niveau de pression. À ce niveau de pression, C_2H_2 est principalement produit par la photolyse de l'éthylène (C_2H_4), alors que C_2H_6 est produit via la réaction méthyle-méthyle (CH_3). À 10^{-2} mbar, les différences dans les champs d'abondance de C_2H_2 et C_2H_6 entre le champ thermique couplé et le champ thermique initial ne dépassent jamais 11% et 9%, respectivement.

Un comportement identique a été noté à 40°N (figure 3.7, traits bleus et verts). Les rétroactions entre les champs d'abondance et le champ thermique sont similaires à celles

observées à 80°S, bien que moins prononcées à cette latitude. Le pic de température prématuré du printemps dans l'hémisphère nord est aussi noté, bien que plus faible qu'à 80°S.

Les évolutions saisonnières des champs thermiques initial et couplé à 10^{-2} mbar sont présentées sur la figure 3.9. Les formes caractéristiques bleues aux latitudes moyennes et aux alentours des solstices d'hiver ($L_s = 90°$ pour l'hémisphère sud et $L_s = 270°$ pour l'hémisphère nord) sont causées par l'occultation du rayonnement solaire par les anneaux de Saturne. Ils renforcent ainsi l'asymétrie dans le flux solaire reçu entre les deux hémisphères. À l'instar de la figure 3.8, le décalage temporel en longitude héliocentrique du pic de température du champ thermique couplé aux printemps augmente avec la latitude.

À 10^{-2} mbar, les rétroactions entre les champs d'abondance et les champs thermiques sont relativement importantes à cause des variations saisonnières importantes dans les abondances de C_2H_2 et C_2H_6 prédites par le modèle photochimique. Cependant, cette situation n'est plus vraie à des niveaux de pression plus importants.

Nous allons maintenant présenter la rétroaction entre les modèles radiatif et photochimique saisonniers à 1 mbar.

3.3.2 Effet du couplage à 1 mbar

Le décalage du pic saisonnier de température diminue progressivement dans la basse stratosphère : à 1 mbar celui-ci est négligeable (voir figures 3.8 et 3.10, haut). Le pic saisonnier de température du champ thermique couplé se produit peu de temps après le solstice d'été dans l'hémisphère sud, de façon similaire au champ thermique initial.

À ce niveau de pression, la variabilité saisonnière de C_2H_6 reste relativement faible par rapport à celle de C_2H_2. En effet, les abondances de C_2H_2 et C_2H_6 à 80°S présentent respectivement des variations saisonnières de l'ordre de 87% et 16%. C_2H_6 est le composé principalement responsable du refroidissement atmosphérique à ce niveau de pression, excepté durant l'hiver, où le refroidissement dû aux CIAs domine. Ainsi, à cause de la faible variabilité saisonnière de C_2H_6, la rétroaction des champs d'abondance sur le champ thermique n'est pas aussi importante qu'à plus faibles niveaux de pressions.

Les abondances de C_2H_6 prédites par le modèle photochimique à 1 mbar des latitudes moyennes jusqu'aux latitudes polaires sont plus faibles que la valeur observée par Cassini qui est utilisée comme à priori pour le calcul du champ thermique initial. Dans le cas le moins favorable, pour une longitude héliocentrique de 260° par exemple, les abondances de C_2H_6 sont sous-estimées d'un facteur 4 par rapport à celles observées par Cassini. La figure 3.11 présente le logarithme de la différence entre les abondances de C_2H_6 à 1 mbar prédites à l'itération 3 avec celles observées par Cassini/CIRS à 45° qui furent utilisées afin de calculer le champ thermique initial. À l'itération 3, les abondances équatoriales sont légèrement sur-estimées par le modèle d'un facteur 1,3 et graduellement sous-estimées avec la latitude jusqu'à atteindre un facteur 4 à $\pm$ 80°. Les champs thermiques calculés par le modèle radiatif aux itérations ultérieures (à partir de l'itération 1) prédisent donc naturellement un champ thermique plus chaud que le champ thermique initial.

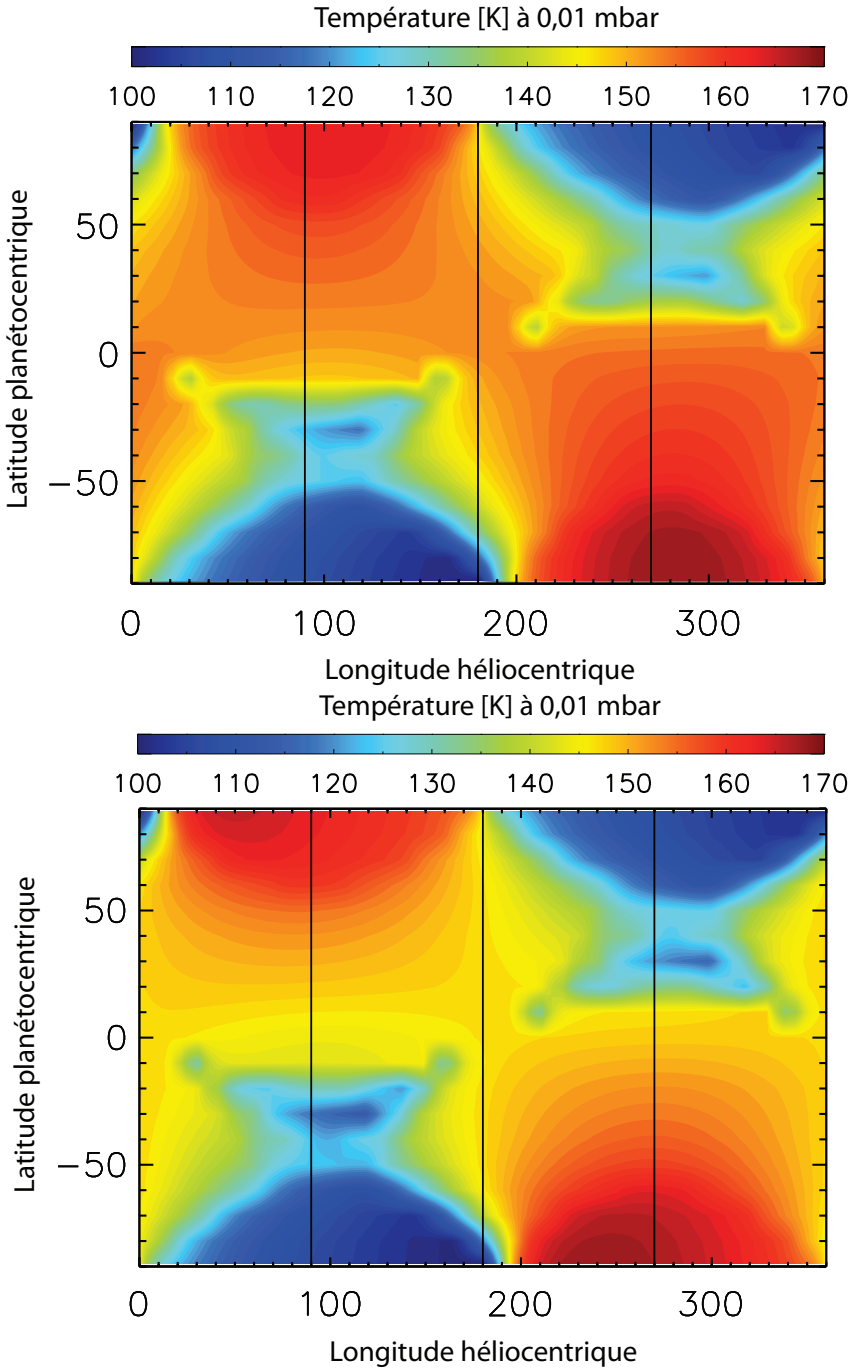

Figure 3.9 – Représentation des champs thermiques initial (haut) et couplé (en bas) à 10^{-2} mbar en fonction de la latitude planétocentrique ainsi que de la longitude héliocentrique.

C_2H_6 est principalement produit par la réaction CH_3+CH_3 à des pressions de l'ordre de 10^{-4} mbar et diffuse ensuite vers des niveaux de pression plus importants. Les variations saisonnières de ce composé dans la basse stratosphère sont donc initialement reliées aux variations saisonnières à 10^{-4} mbar. Une corrélation claire est notée dans les évolutions

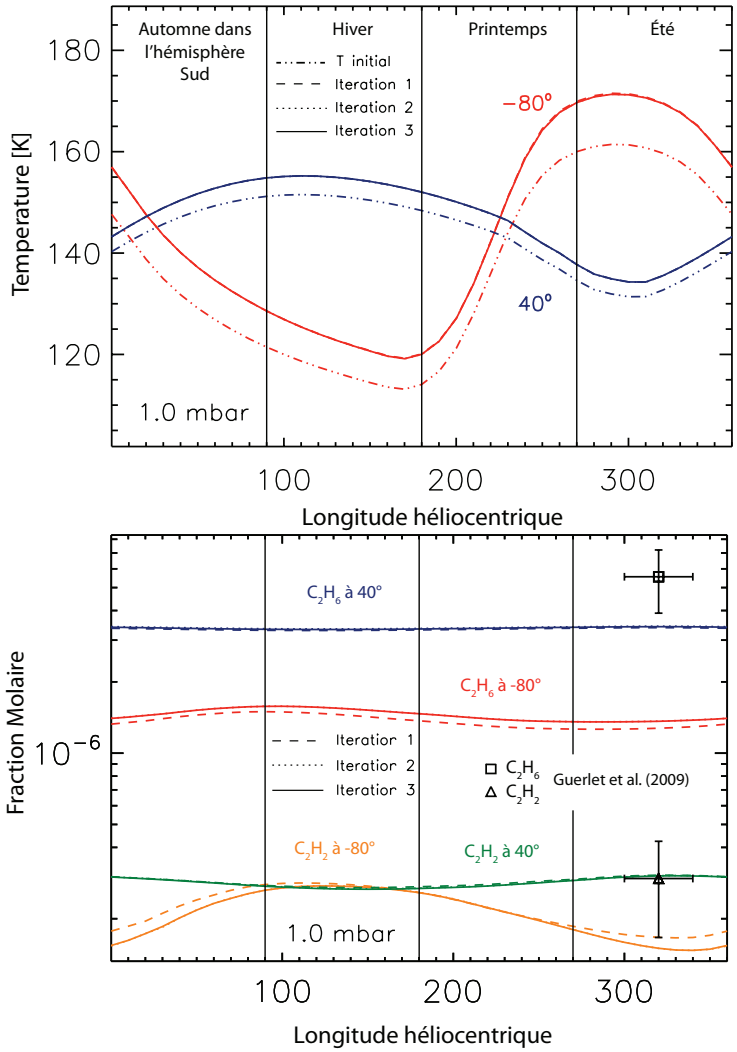

Figure 3.10 – Similaire à la figure 3.7 à 1 mbar. Une fois encore, les données illustrées par le carré et le triangle représentent respectivement les abondances observées de C_2H_2 et C_2H_6 par Cassini (Guerlet et al., 2009). Celles-ci ont été utilisées en tant qu'a priori pour calculer le champ thermique initial.

saisonnières d'abondance de ce composé entre 10^{-2} et 1 mbar. La rétroaction du champ thermique sur le champ d'abondance de C_2H_6 affecte son abondance de 7% durant le printemps.

Par ailleurs, C_2H_2 est principalement produit à 10^{-2} mbar et 1 mbar. À ces deux niveaux de pression, l'impact du champ thermique sur les constantes de vitesse qui mènent à la production de ce composé est négligeable. Par conséquent, l'impact du champ thermique sur son abondance se fait principalement via la diffusion plus rapide des composés chimiques lorsque les variabilités saisonnières du champ thermique sont augmentées via contraction-dilatation de la colonne atmosphérique (Hue et al., 2015a). C_2H_2 est plus sensible à cet effet que C_2H_6 car son gradient vertical d'abondance est plus important. La

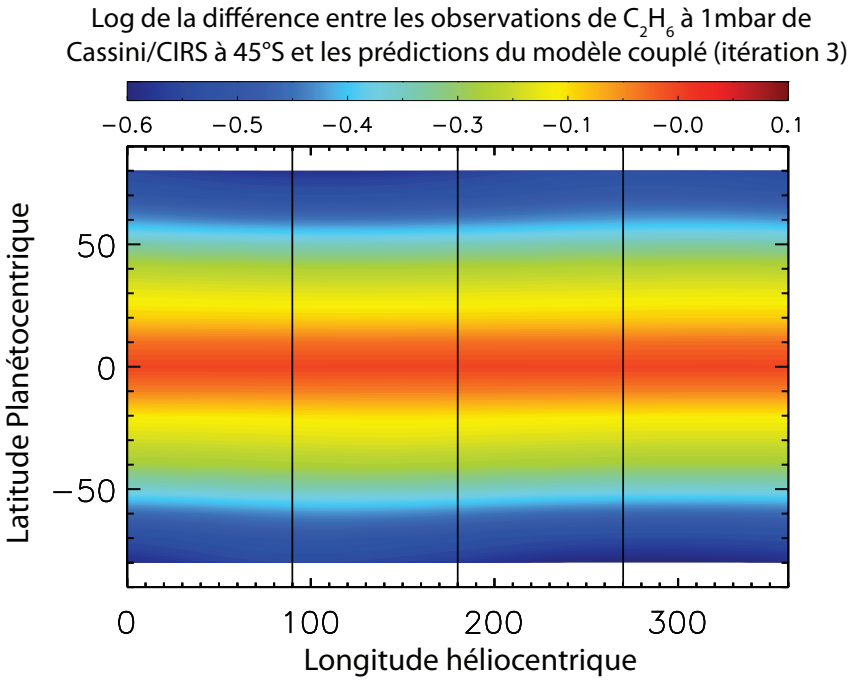

Figure 3.11 – Logarithme de la différence entre les abondances de C_2H_6 prédites à l'itération 3 avec celles observées par Cassini/CIRS à 45° à 1 mbar. Ces différences sont représentées en fonction de la latitude planétocentrique et la longitude héliocentrique. Les solstices et équinoxes sont indiquées par les traits noirs verticaux. Les valeurs positives de cette différence dénotent une sur-estimation de l'abondance à l'itération 3 par rapport aux observations Cassini alors que les valeurs négatives correspondent à une sous-estimation.

rétroaction du champ thermique sur C_2H_2 affecte son abondance de 13% à l'approche de l'équinoxe d'automne dans l'hémisphère sud ($L_s = 360°$).

3.4 Comparaison avec les observations de Cassini/CIRS

Grâce à la mission Cassini, l'évolution de la température stratosphérique de Saturne ainsi que sa composition atmosphérique ont pu être mesurées avec des couvertures spatiales et temporelles jusqu'ici inégalées. L'instrument Cassini/CIRS (Flasar et al., 2005) a pu mesurer ces évolutions à la fois dans des géométries d'observation au nadir (Sinclair et al., 2013; Fletcher et al., 2010) ou au limbe (Fouchet et al., 2008; Guerlet et al., 2009, 2010).

Nous avons montré que la rétroaction du champ thermique sur les champs d'abondance de C_2H_2 et C_2H_6 est très faible, i.e. les changements dans les distributions d'abondance d'une itération sur l'autre ne sont pas significatifs comparativement aux barres d'erreur observationnelles (voir les panneaux inférieurs des figures 3.7 et 3.10). Ainsi, dans cette partie nous comparerons seulement les températures prédites par le modèle radiatif saisonnier et les températures observées par Cassini. La comparaison complète entre les

distributions d'abondance prédites par le modèle photochimique à l'itération 1 avec les observations de Cassini/CIRS a été présentée au chapitre 2.

Nous comparerons ici les températures prédites par le champ thermique couplé et les observations de la température pour une géométrie d'observation au nadir dans un premier temps, puis aux limbes dans un second temps.

3.4.1 Observations au nadir

Les observations au nadir de Saturne effectuées par l'instrument CIRS permettent de suivre l'évolution de sa température stratosphérique à des pressions de l'ordre du mbar avec une couverture spatiale (latitude) et temporelle conséquente. L'évolution des températures observées à ce niveau de pression est présentée sur la figure 3.12. Sur cette figure, les températures observées ont été moyennées sur des périodes d'une année terrestre, i.e. 2005-2006 ($L_s \approx 300°$-$313°$, figure 3.12a), 2010-2011 ($L_s \approx 5°$-$17°$, figure 3.12b) et 2013-2014 ($L_s \approx 41°$-$52°$, figure 3.12c). Ces températures sont issues des travaux de Fletcher et al. (2015a,b) (communication personnelle de L. Fletcher à T. Greathouse).

Les panneaux inférieurs des figures 3.7 et 3.10 nous montrent que plus la latitude est élevée et plus la rétroaction entre le champ thermique et les champs d'abondance des hydrocarbures considérés est faible. Du fait de la faible rétroaction entre ces champs thermique et chimique, ainsi que de la bonne reproduction des observations Cassini/CIRS de C_2H_2 et C_2H_6 utilisées en tant qu'à priori dans le modèle radiatif saisonnier (voir figure 3.7 et 3.10), les températures équatoriales des champs initial et couplé sont en bon accord les unes avec les autres. En revanche, ces deux champs thermiques ne permettent pas d'expliquer les pics de température observés dans la région équatoriale en 2005-2006 (figure 3.12a) ainsi que 2013-2014 (figure 3.12c). Ces extremums locaux observés sont en effet associés à l'oscillation semi-annuelle saturnienne, ou SSAO, observée dans la région équatoriale de Saturne (Fouchet et al., 2008; Orton et al., 2008; Guerlet et al., 2011). Les modèles photochimique et radiatif, qui ne sont pas des modèles dynamiques dans le sens hydrodynamique du terme, ne sont pas en mesure de reproduire ces mécanismes, qui ne pourront être étudiés que dans le cadre d'un GCM à trois dimensions.

Le minimum local de température prédit en 2005-2006 (figure 3.12a) entre 20°N et 30°N est provoqué par l'occultation du rayonnement solaire par les anneaux (voir section 2.2.2). Du fait de la constante de temps radiative non-nulle à ce niveau de pression, les effets des anneaux sur la température à ces latitudes sont encore observés en 2010-2011 (figure 3.12b) dans l'hémisphère nord alors qu'à ce moment de l'année, l'ombre des anneaux se trouve dans l'hémisphère sud de Saturne. Par ailleurs, en 2013-2014, (figure 3.12c), l'effet de l'ombre des anneaux sur la température stratosphérique est prédit dans l'hémisphère sud, de 10°S à 30°S. Ces minimums locaux prédits par le modèle radiatif sont cohérents avec ceux prédits par le modèle radiatif de Guerlet et al. (2014), mais sont en désaccord avec les observations.

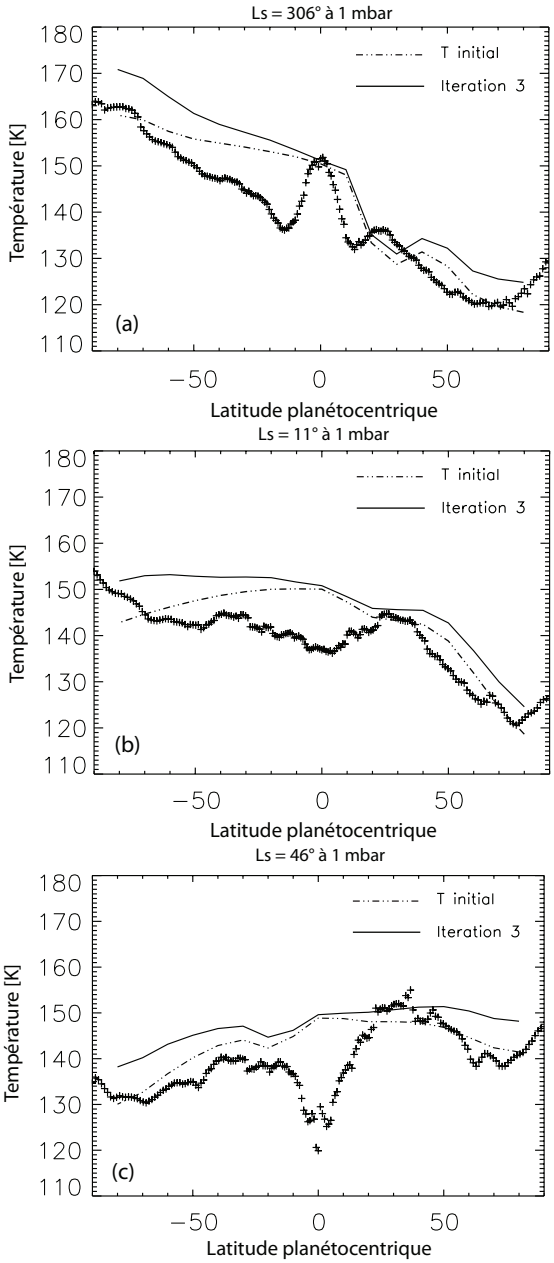

Figure 3.12 – Évolutions temporelles des profils méridionaux de température à 1 mbar observés en 2005-2006 (figure du haut), 2010-2011 (figure du milieu) et 2013-2014 (figure du bas) par Cassini/CIRS (Fletcher et al., 2015a,b). Les températures prédites par les champs thermiques initial et couplé (itération 3) aux latitudes et temps correspondants sont représentées par des courbes en traits tirets-triple points et en traits pleins, respectivement. Afin d'alléger les figures, les barres d'erreur correspondantes aux observations n'ont pas été représentées, et sont typiquement de l'ordre de ± 2-3 K.

Notons qu'une explication dynamique a été proposée par Fouchet et al. (2008) et Guerlet et al. (2009), celle-ci impliquant une source additionnelle de chauffage stratosphé-

rique par compression adiabatique associée à des mouvements atmosphériques descendants sous l'ombre des anneaux. Cette explication est cohérente avec le modèle dynamique de Friedson and Moses (2012) qui prédit un accroissement de la vitesse des mouvements descendants sous l'ombre des anneaux.

Il parait clair, d'après la figure 3.12, que la reproduction des valeurs absolues de la température à 1 mbar n'est pas améliorée lorsque le couplage entre la composition chimique et la structure thermique est prise en compte. En revanche, ce couplage modifie le gradient latitudinal de température du champ thermique couplé. Le tableau 3.1 présente l'évolution des gradients thermiques latitudinaux aux trois périodes d'observation considérées, et ceci pour le champ thermique initial, le champ thermique couplé (itération 3) ainsi que pour le champ thermique observé. L'intervalle en latitude considéré pour calculer ces gradients a été sélectionné afin de s'affranchir de certains effets indésirables, soit dans le jeu de données observationnelles, comme l'oscillation thermique équatoriale ayant une origine dynamique (figures 3.12a et 3.12c, de l'équateur à ± 20°), soit dans les températures prédites, comme les effets de l'occultation des anneaux sur le champ thermique, qui n'est pas observé (figures 3.12a et 3.12b, de 20°N-40°N ou encore figure 3.12c, de 10°S-30°S).

Période d'observation	Hémisphère considéré	Gradient de température [K/°] (observation)	Gradient de température [K/°] (modèle initial)	Gradient de température [K/°] (modèle couplé)
2005-2006	Sud (20°S-80°S)	-0,35	-0,14	-0,27
(fig. 3.12a)	Nord (40°N-80°N)	-0,14	-0,35	-0,26
2010-2011	Sud (20°S-80°S)	-0,07	0,12	0,0
(fig. 3.12b)	Nord (40°N-80°N)	-0,43	-0,62	-0,54
2013-2014	Sud (30°S-80°S)	-0,21	0,30	0,19
(fig. 3.12c)	Nord (30°N-80°N)	-0,32	-0,15	-0,06

Table 3.1 – Évolutions des gradients latitudinaux de température à 1 mbar dans l'hémisphère nord et sud de Saturne tels que présentés sur la figure 3.12. Ces gradients sont donnés pour les champs thermiques initial et couplé (itération 3) ainsi que ceux mesurés par Cassini/CIRS (Fletcher et al., 2015a,b).

Le gradient latitudinal dans l'hémisphère sud pour la période 2005-2006 (fig. 3.12a) du champ thermique couplé est augmenté par rapport à celui du champ initial. Ce gradient (-0,27 K/°) est maintenant plus proche de celui observé par Cassini (-0,35 K/°) que celui prédit par le champ thermique initial (-0,14 K/°). À la même période, dans l'hémisphère nord, le gradient prédit par le champ thermique couplé (-0,26 K/°) représente aussi une

amélioration par rapport au champ thermique initial (-0,35 K/°), lorsqu'il est confronté aux observations Cassini (-0,14 K/°).

Le gradient latitudinal du champ thermique couplé dans l'hémisphère sud pour la période 2010-2011 (fig. 3.12b) est maintenant nul, et représente une amélioration lorsqu'il est comparé à celui observé (-0,07 K/°). À cette même période et dans l'hémisphère nord, le gradient du champ thermique couplé (-0,54 K/°) est aussi maintenant plus proche de celui mesuré par Cassini (-0,43 K/°).

Finalement, pour la période 2013-2014 (fig. 3.12c), les gradients thermiques prédits par le champ thermique couplé, à la fois dans l'hémisphère sud (0,19 K/°) que dans l'hémisphère nord (-0,06 K/°) sont plus plats que ceux prédits par le champ thermique initial, au Sud (0,30 K/°), comme au Nord (-0,15 K/°). Le champ thermique couplé représente donc une amélioration par rapport au champ thermique initial seulement dans l'hémisphère sud.

Prendre en compte la rétroaction entre les champs thermiques et les champs d'abondance ne présente pas une amélioration dans la reproduction des valeurs absolues des températures observées par Cassini à des pressions de l'ordre du mbar. En revanche, les gradients latitudinaux de température du champ thermique couplé sont sensiblement modifiés par rapport à ceux prédits par le champ thermique initial, et justifie ainsi l'approche considérée ici. En effet, dans plus de 83% des cas (5 hémisphères sur 6 observés), le gradient latitudinal de température prédit par le champ thermique couplé est plus proche que celui observé par Cassini au nadir de celui prédit par le champ thermique initial.

3.4.2 Observations au limbe

Bien que les observations au limbe ne permettent pas une couverture spatiale aussi importante que celles au nadir, elles nous renseignent néanmoins sur la structure verticale des émissions stratosphériques. Celle-ci permettent de contraindre la structure verticale du profil de température ainsi que des émissions des hydrocarbures. Guerlet et al. (2009) ont pu mesurer l'évolution de la structure thermique de Saturne ainsi que de l'abondance de C_2H_2 et C_2H_6 de 5 mbar à 5×10^{-3} mbar à différentes latitudes, pour des longitudes héliocentriques allant de $L_s = 300°$ à 340°. Nous présentons une comparaison entre les températures des champs thermiques initial et couplé avec ces observations aux différents niveaux de pressions observés (0,01 mbar, 0,1 mbar et 1 mbar) sur la figure 3.13.

De façon similaire aux comparaisons présentées dans la section précédente, le couplage suggère une modification du gradient méridional de température. À cause de l'oscillation équatoriale de Saturne présente jusqu'à des latitudes de ± 20° ainsi que de la faible couverture spatiale des observations dans l'hémisphère nord, nous discuterons seulement des gradients latitudinaux thermiques dans l'hémisphère sud. Le tableau 3.2 présente l'évolution de ces gradients entre les champs thermiques initial et couplé ainsi que des observations de Cassini.

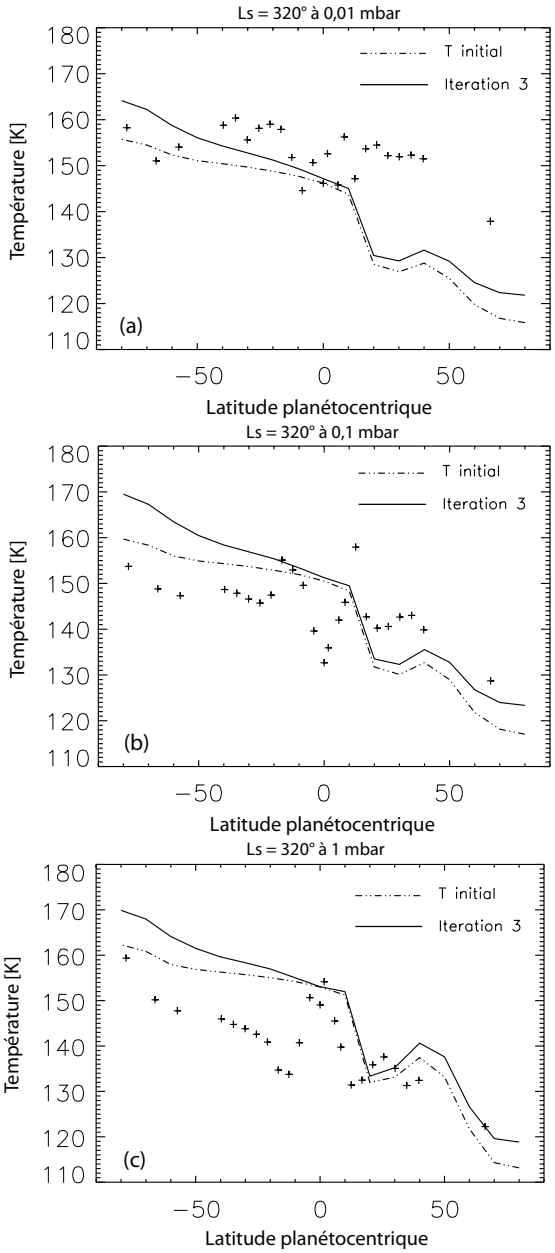

Figure 3.13 – Profils méridionaux de température à 0,01 mbar (figure du haut), 0,1 mbar (figure du milieu) et 1 mbar (figure du bas) par Cassini/CIRS (Guerlet et al., 2009) à une longitude héliocentrique de $L_s = 320°$. Les températures prédites par les champs thermiques initial et couplé (itération 3) aux latitudes et temps correspondants sont représentées par des courbes en traits tirets-triple points et en traits pleins, respectivement. Les barres d'erreur correspondantes aux observations sont de l'ordre de $\pm$ 1-2 K.

À 10^{-2} mbar (figure 3.13a) et 0,1 mbar (figure 3.13b), les observations suggèrent des gradients latitudinaux faibles (0,02 K/° et 0,09 K/°, respectivement). Ces gradients observés sont mieux reproduits par le champ thermique initial (-0,11 K/° et -0,11 K/°, res-

pectivement) que par le champ thermique couplé (-0,21 K/° et -0,24 K/°, respectivement). Cependant, à 1 mbar (figure 3.13c), le gradient latitudinal de température du champ thermique couplé (-0,22 K/°) est plus en accord avec les observations (-0,26 K/°) qu'avec le champ thermique initial (-0,12 K/°).

Niveau de pression sondé	Hémisphère considéré	Gradient de température [K/°] (observations)	Gradient de température [K/°] (modèle initial)	Gradient de température [K/°] (modèle couplé)
0,01 mbar (fig. 3.13a)	Sud (20°S-80°S)	0,02	-0,11	-0,21
0,1 mbar (fig. 3.13b)	Sud (20°S-80°S)	-0,09	-0,11	-0,24
1 mbar (fig. 3.13c)	Sud (20°S-80°S)	-0,26	-0,12	-0,22

Table 3.2 – Évolutions des gradients latitudinaux de température dans l'hémisphère sud de Saturne aux différents niveaux de pression présentés sur la figure 3.13. Ces gradients sont donnés pour les champs thermiques initial, couplé ainsi que ceux mesurés par Cassini/CIRS (Guerlet et al., 2009).

3.4.3 Discussions

Nous pouvons noter que, à des pressions de l'ordre du mbar, le couplage entre la photochimie et la structure thermique permet d'améliorer, dans 86% des cas, la prédiction du gradient latitudinal de température. En revanche, à des niveaux de pression plus faibles (0,01 mbar et 0,1 mbar), ce couplage n'améliore pas la reproduction des observations. Ce phénomène rejoint les conclusions tirées par Guerlet et al. (2014) qui, à l'aide de leur modèle radiatif saisonnier, n'ont pas été en mesure de reproduire les contrastes latitudinaux de température, qui sont d'autant plus prononcés que la pression diminue. Cette étude confirme leur conclusion à savoir que la structure thermique de l'atmosphère de Saturne s'écarte de l'équilibre radiatif saisonnier, et que cet écart augmente avec l'altitude.

La prise en compte de ce couplage ne représente pas une amélioration dans la reproduction des valeurs absolues des températures observées. Les différences entre les températures du champ thermique couplé et les observations atteignent une valeur maximale de 10 K alors que les températures du champ thermique initial sont plus proches des observations. Nous rappelons que le modèle photochimique, de façon identique à celui présenté dans le chapitre 2, ne prend pas en compte la dynamique atmosphérique. En

effet, suivant l'intensité des processus dynamiques présents dans la stratosphère, ceux-ci vont modifier, entre autre, les distributions saisonnières d'abondance de C_2H_2 et C_2H_6. À cela vient s'ajouter le forçage dynamique important qui semble opérer dans la zone équatoriale de Saturne et dont la prise en compte ne peut pas se faire dans le cadre de modèles photochimiques ou radiatifs purs.

Les GCMs de Saturne actuellement en développement dans la communauté de planétologie (Friedson and Moses, 2012; Spiga et al., 2014) ne prennent pas encore en compte la chimie des hydrocarbures et supposent généralement des profils verticaux de C_2H_2 et C_2H_6 observés et invariables latitudinalement et temporellement, ainsi qu'un profil vertical théorique de CH_4. À l'heure actuelle, la méthodologie présentée dans ce travail représente la description la plus poussée vis-à-vis des connaissances actuelles, du couplage entre la chimie atmosphérique et la structure thermique de Saturne, bien que la dynamique soit négligée dans ce travail.

3.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons couplé un modèle photochimique saisonnier (présenté dans le chapitre 2) avec un modèle radiatif saisonnier de Saturne (Greathouse et al., 2008) dans le but d'étudier le couplage qui existe entre sa composition chimique et sa structure thermique. Le modèle photochimique permet de prédire la distribution des composés chimiques atmosphériques, étant donnée une structure thermique. Le modèle radiatif, en revanche, permet de calculer ce profil thermique étant donnée une distribution d'hydrocarbures. Ces composés jouent un rôle crucial dans la régulation thermique de l'atmosphère de Saturne, ceux-ci étant les principaux refroidisseurs et chauffeurs stratosphériques (Bézard and Gautier, 1985; Greathouse et al., 2008; Guerlet et al., 2014). Par ailleurs, cette température ainsi que son évolution saisonnière sont importantes car elles influencent la chimie atmosphérique (Hue et al., 2015a).

Dans un premier temps, le modèle radiatif saisonnier a permis d'établir un premier champ thermique avec, comme distribution a priori d'hydrocarbures, celle observée par Cassini/CIRS (Guerlet et al., 2009). Notons que ce champ thermique a été comparé aux observations de Cassini de la température par Fletcher et al. (2010). Ce champ thermique a été alors utilisé en tant que paramètre d'entrée du modèle photochimique, dans le cadre d'une procédure identique à celle présentée dans le chapitre 2. Le champ d'abondance d'hydrocarbures ainsi obtenu a été ré-injecté dans le modèle radiatif saisonnier afin de simuler un nouveau champ thermique. Ce champ ainsi obtenu a alors été utilisé dans le modèle photochimique et ainsi de suite de façon itérative jusqu'à ce que les différences entre deux champs thermiques consécutivement calculés soient inférieures à 0,5 K.

Les principaux résultats issus de ce couplage sont les suivants :

• Le couplage entre la composition chimique et la structure thermique de Saturne prédit une modification de la position du pic saisonnier de température à une latitude et un niveau de pression donnés par rapport à un modèle ne prenant pas ce couplage en compte.

En effet, lorsqu'une distribution latitudinalement et temporellement fixe d'hydrocarbures est utilisée dans le modèle radiatif, ce pic se produit au moment du solstice d'été. Lorsque le modèle radiatif est couplé au modèle saisonnier, le pic de température en est affecté et se produit plus tôt, avant le solstice d'été, i.e. durant le printemps. Par exemple, à 80° dans les deux hémisphères, le pic de température saisonnier à 10^{-2} mbar se produit 3-4 années terrestres [1] (environ une demi-saison saturnienne) plus tôt que ce qui était prédit par un modèle radiatif qui suppose des distributions d'hydrocarbures latitudinalement et temporellement fixes. Les hydrocarbures principalement responsables du refroidissement atmosphérique sont C_2H_2 et C_2H_6. Au début de la saison de printemps, aux hautes latitudes qui sortent de la saison d'hiver, les abondances de ces composés ne sont pas suffisamment importantes pour permettre un refroidissement significatif de la stratosphère, ce qui provoque le pic de température prématuré. Suite à cela, vers la moitié de la saison de printemps, les abondances de C_2H_2 et C_2H_6 deviennent assez importantes et permettent un refroidissement efficace, associé avec une diminution de la température. Cet effet est particulièrement prononcé aux faibles niveaux de pression, où les temps caractéristiques chimiques de C_2H_2 et C_2H_6 sont très courts et qui présentent donc des variations saisonnières importantes. Ce décalage du pic de température décroit progressivement lorsque la pression augmente.

• La prise en compte du couplage modifie les gradients latitudinaux de température. Les valeurs absolues des températures prédites avec ce couplage présentent un moins bon accord lorsqu'elles sont comparées aux observations de Cassini/CIRS. En revanche, les gradients latitudinaux prédits par ce couplage présentent, dans environ 86% des cas, un meilleur accord avec les observations à des pressions de l'ordre du mbar. À des pressions plus faibles, ces gradients latitudinaux prédits par ce couplage sont en moins bon accord avec les observations. Ces résultats confirment ceux de Guerlet et al. (2014) qui prédisent un écart par rapport à l'équilibre radiatif saisonnier de la haute stratosphère de Saturne.

Il est remarquable que très peu d'informations a priori venant d'observations soient nécessaires pour calculer les champs thermique et d'abondance couplés. En fait, le seul paramètre faiblement contraint dans les deux modèles couplés ici est le profil de diffusion turbulente qui régit la vitesse de diffusion des produits de photolyse du méthane vers les niveaux de pression plus importants. Notons que ce coefficient de diffusion a été pris constant avec la latitude et la saison, du fait de l'absence de contraintes connues.

Ce travail présente l'importance du couplage entre la composition chimique et la structure thermique de la stratosphère de Saturne, comme le montre la sensibilité des températures stratosphériques vis-à-vis des abondances des hydrocarbures. Bien que les résultats du couplage présentent un accord modéré avec les observations de Cassini en termes de valeurs absolues, ce travail présente néanmoins une possible méthodologie pour l'étude des évolutions saisonnières de la structure thermique des planètes géantes.

En conclusion, il semble que seul un modèle hydrodynamique, de type GCM, couplé à une chimie des hydrocarbures soit en mesure de fournir un champ de température digne

1. le pic se produit plus tôt dans l'hémisphère sud que dans l'hémisphère nord, à cause de l'orbite excentrique de Saturne

de confiance par la prise en compte simultanée des couplages forts entre la dynamique, le champ thermique et la composition chimique.

Chapitre 4

Photochimie et transport dans la stratosphère de Jupiter

Sommaire

4.1 Introduction 144
4.1.1 Considérations générales 144
4.1.2 Observations infrarouges de Jupiter 145
4.1.3 Mélange stratosphérique 146
4.2 Effets saisonniers sur Jupiter 148
4.2.1 Caractéristiques du modèle 148
4.2.2 Approximations 153
4.2.3 Modélisation saisonnière de sa photochimie 156
4.2.4 Comparaison des variabilités saisonnières de Jupiter et Saturne 160
4.2.5 Comparaison avec les observations de Cassini/CIRS 164
4.3 Phénomènes de mélange dans l'atmosphère de Jupiter 166
4.3.1 Revue des connaissances actuelles 167
4.3.2 Diffusion latitudinale 168
4.3.3 Discussions 172
4.4 Conclusion 175

4.1 Introduction

4.1.1 Considérations générales

À l'instar de Saturne, la composition chimique de la stratosphère de Jupiter est dominée par le dihydrogène, l'hélium et le méthane. L'obliquité de Jupiter est plus faible que celle de Saturne (3,12° contre 26,73°), et son excentricité est également inférieure à celle de Saturne (0,048392 contre 0,054150).

À cause de sa faible obliquité, les variations annuelles d'insolation à une latitude donnée y sont plus faibles que sur Saturne. Dans les chapitres 2 et 3, nous avons vu que les effets de ces variations induisent des modulations à la fois dans la structure thermique atmosphérique ainsi que dans la composition chimique. Aussi, ces effets sont a priori plus faibles sur Jupiter que sur Saturne.

La distance orbitale de Jupiter par rapport au Soleil, plus petite que celle de Saturne ou des planètes géantes glacées, en fait une cible de choix pour les missions spatiales. Le tableau 4.1 répertorie les différentes missions spatiales qui ont effectué un survol de Jupiter ou ont été placées en orbite. L'ensemble de ces missions a permis de révéler certaines caractéristiques de Jupiter invisibles depuis le sol. Par exemple, son système d'anneaux très ténus fut découvert par la mission Voyager 1 (Smith et al., 1979) et fut, plus tard, étudié en détails par la sonde Galileo (Ockert-Bell et al., 1999).

Mission	Date	Type de mission
Pioneer 10	Décembre 1973	survol
Pioneer 11	Décembre 1974	survol
Voyager 1	Mars 1979	survol
Voyager 2	Juillet 1979	survol
Ulysses	1992 et 2004	survols
Galileo	Décembre 1995	orbiteur + sonde
Cassini	Décembre 2000	survol
New Horizon	Février 2007	survol
Juno	Juillet 2016	orbiteur
JUICE	2030	orbiteur

Table 4.1 – Présentation des missions vers Jupiter.

Nous allons présenter maintenant un bref historique de l'évolution des connaissances concernant la composition chimique des composés carbonés de la stratosphère Jovienne.

4.1.2 Observations infrarouges de Jupiter

La stratosphère de Jupiter est le siège d'une photochimie similaire à celle de Saturne. Les travaux théoriques initiaux de Cadle (1962) et Strobel (1969, 1973) prédirent que la photolyse de la molécule de CH_4 mène principalement à la formation d'hydrocarbures tels que C_2H_2, C_2H_4 et C_2H_6. Ces prédictions furent confirmées par leurs détections depuis le sol par Ridgway (1974) ainsi que Combes et al. (1974). Suite à cela, de nombreuses observations au sol vinrent affiner la détermination de l'abondance de ces molécules, soit par l'amélioration des techniques d'observation, soit par l'amélioration des bases de données spectroscopiques (voir Sada et al. (1998) pour une liste complète d'observations).

Les survols des sondes Voyager 1 et 2 ont, à l'aide des instruments IRIS (*Infrared Interferometer Spectrometer and Radiometer*) (Hanel et al., 1979b,a) et UVS (*Ultraviolet Spectrometer*) (Festou et al., 1981), permis d'accroitre les connaissances précédemment acquises. Ces deux survols ont mis en évidence pour la première fois des inhomogénéités spatiales dans les émissions infrarouges des hydrocarbures stratosphériques. Les abondances de ces composés, déduites des spectres acquis par IRIS, ont permis à Maguire et al. (1984) de suggérer des variations latitudinales d'abondances de C_2H_2 et C_2H_6. Cependant, le calcul de ces abondances par l'analyse des émissions stratosphériques est un problème dégénéré, et ce n'est qu'en fixant la valeur de la température atmosphérique que ces abondances peuvent être extraites de façon précise (voir par exemple la discussion dans la partie 2.2).

La sonde Galileo (Carlson et al., 1996; Young et al., 1996) ainsi que le télescope spatial ISO (*Infrared Space Observatory*, (Kessler et al., 1996)) permirent d'observer Jupiter sous deux approches différentes. En effet, alors que l'instrument Galileo/NIMS observa Jupiter avec une grande résolution spatiale mais une résolution spectrale relativement faible (pouvoir de résolution[1] $R = 270$), le télescope spatial ISO obtint des informations complémentaires via des observations à plus faibles résolutions spatiales mais plus grandes résolutions spectrales ($R = 1000$ à 2000 pour l'instrument *Short-Wavelength Spectrometer*, SWS (de Graauw et al., 1996; Encrenaz et al., 1996)).

La résolution spatiale de l'instrument ISO/SWS (14×20 arcsec^2 pour les observations à $\lambda < 12{,}5\,\mu$m, et 14×27 arcsec^2 pour les observations à $\lambda > 12{,}5\,\mu$m) n'était pas suffisante pour déterminer la variation des abondances en fonction de la latitude. En effet la taille angulaire de Jupiter varie de 30 à 50 arcsec en fonction des positions relatives de La Terre et Jupiter sur leurs orbites respectives. Ainsi, les observations furent généralement effectuées en pointant le télescope soit vers le point sub-terrestre (Fouchet et al., 2000; Lellouch et al., 2001, 2002), soit vers les zones aurorales (Bézard et al., 2001; Lellouch et al., 2002).

L'instrument ISO/SWS mesura les abondances de C_2H_2, C_2H_6 et CH_3C_2H (méthylacétylène) (Fouchet et al., 2000) ainsi que C_6H_6 (benzène) (Bézard et al., 2001). Il fixa des limites supérieures pour les abondances de C_3H_8 (propane) (Moses et al., 2005) et C_4H_2 (diacétylène) (Fouchet et al., 2000; Moses et al., 2005). Ces abondances observées sont

1. pouvoir de séparation spectrale d'un spectrographe, défini comme $\lambda/\Delta\lambda$, où λ est la longueur d'onde observée et $\Delta\lambda$ la largeur en longueur d'onde d'un canal du spectrographe

représentatives de valeurs moyennées sur une grande partie du disque Jovien. Les observations de C_2H_6 furent utilisées par Moses et al. (2005) pour contraindre les processus de mélange vertical (coefficient de diffusion turbulente).

C'est finalement lors du survol de Jupiter par Cassini et à l'aide des données de l'instrument CIRS (Kunde et al., 1996), que Kunde et al. (2004), puis Nixon et al. (2007) déterminèrent les profils d'abondance de C_2H_2 et C_2H_6 en fonction de la latitude, à l'aide d'un modèle d'inversion de spectre. Ces observations confirmèrent l'existence d'inhomégénités spatiales dans ces distributions, initialement mises en évidence par Maguire et al. (1984). Ces travaux renforcent l'idée selon laquelle les processus (photo-)chimiques et de mélange vertical ne sont pas les seuls mécanismes qui contrôlent les abondances chimiques stratosphériques.

4.1.3 Mélange stratosphérique

Comparée à la circulation atmosphérique terrestre, la connaissance des mécanismes de transport dans la troposphère et la stratosphère de Jupiter est faible. L'instrument IRIS des sondes Voyager effectuèrent les premières mesures spatialement résolues des distributions latitudinales de vent et de température. Ces mesures permirent à Gierasch et al. (1986) d'en déduire l'existence d'une circulation dans la haute troposphère (de 680 mbar à 150 mbar). Ceux-ci utilisèrent un modèle axisymétrique qui prend en compte la dissipation des perturbations créées dans les champs de vents zonaux et thermiques résultant de l'imposition de ces champs observés aux limites du modèle. Leur travaux suggérèrent l'existence de mouvements verticaux corrélés avec la position des jets équatoriaux, les mouvements verticaux ascendants correspondant aux bords équatoriaux internes des jets observés.

Conrath et al. (1990) approfondirent cette étude en incluant un terme de forçage radiatif et en étendant le calcul de la circulation latitudinale à la stratosphère. Leur approche se fit toujours dans le cadre d'un modèle dissipatif contrôlant la circulation et qui prend en compte des conditions aux limites observées. Leurs résultats furent similaires à ceux de Gierasch et al. (1986) pour la région de la haute troposphère. Dans la stratosphère, à des pressions inférieures à 10 mbar, la circulation méridionale prédite se transforme peu à peu en deux grandes cellules de circulation. Ces cellules ont des mouvements ascendants à l'équateur et descendants aux pôles. Toutefois, leurs calculs ne prirent pas en compte la présence d'aérosols atmosphériques qui modifient le bilan radiatif en fournissant une source supplémentaire de chauffage atmosphérique.

D'après West et al. (1992), la prise en compte des aérosols dans ce type de modèle affecte considérablement la forme de la circulation prédite. En effet, ils démontrèrent que la circulation résultante de l'inclusion des aérosols, distribués latitudinalement suivant les observations de Voyager/PPS (Hord et al., 1979), conduit à une double cellule de circulation stratosphérique, avec des mouvements ascendants aux pôles et descendants à l'équateur.

Notons que Moreno and Sedano (1997) suivirent une approche similaire à celle de West et al. (1992), en supposant une distribution d'aérosols différente. La circulation alors obtenue est différente de celle de West et al. (1992) dans la stratosphère, au-dessus de 50 mbar. Ceci suggère que la circulation atmosphérique est très sensible à la distribution des aérosols.

La chute de la comète Shoemaker-Levy 9 (SL9 par la suite) sur Jupiter, survenue en juillet 1994 fut un évènement majeur (voir par exemple les travaux de Lellouch et al. (1995), Orton et al. (1995) et Noll et al. (1995)) qui permis, entre autre, de mieux comprendre la circulation atmosphérique jovienne dans deux régions distinctes :

- Dans la basse stratosphère (de 200 à 1 mbar), la traque des débris déposés par SL9 permit à Friedson et al. (1999) de montrer que la circulation prédite par West et al. (1992) n'était pas adéquate pour expliquer l'évolution temporelle de la distribution des débris cométaires. En effet, le modèle de circulation de West et al. (1992) ne permis pas d'expliquer le transport rapide des débris vers l'équateur, tel que le montrèrent les observations HST (*Hubble Space Telescope*) à 230 nm effectuées sur plus de trois ans après l'impact. Friedson et al. (1999) durent en effet invoquer la présence d'un mécanisme de diffusion latitudinale afin de réconcilier leurs prédictions avec les observations HST.
- Dans la haute stratosphère, à des pressions inférieures à 1 mbar, les conséquences de cet impact sur la composition chimique furent importantes. Des espèces telles que le monosulfure de carbone (CS), l'oxysulfure de carbone (OCS) (Lellouch et al., 1995), ou encore HCN (Marten et al., 1995; Bézard et al., 1997) furent détectées alors que la stratosphère Jovienne en est normalement dépourvue. Par ailleurs, le monoxyde de carbone (CO), détecté en faible quantité antérieurement à SL9 (Beer, 1975; Noll et al., 1988) fut déposé en grande quantité dans la stratosphère (Lellouch et al., 1995, 1997). Finalement, l'eau (H_2O), constituant essentiel des comètes, fut aussi détectée (Bjoraker et al., 1996; Lellouch et al., 2002; Cavalié et al., 2008, 2012), bien que son origine ne fut complètement expliquée du fait de l'absence d'observations antérieures à SL9.

  Afin de pouvoir utiliser l'évolution temporelle de l'abondance de ces composés comme traceur de la dynamique, la stabilité chimique des espèces observées doit d'abord être évaluée à l'aide de modèle photochimique (Moses, 1996).

  Certains des composés post-SL9 observés ont alors permis, en suivant leur évolution temporelle, de contraindre l'intensité des processus de diffusion latitudinaux. Dans la région submillibar, Lellouch et al. (2002) et Moreno et al. (2003) purent ainsi estimer une valeur du coefficient de diffusion horizontale, qui régit la propagation spatio-temporelle des composés CO_2, CO, CS et OCS observés. Également dans la région submillibar, l'évolution temporelle de l'abondance d'HCN a mené Griffith et al. (2004) et Lellouch et al. (2006) à invoquer une combinaison de diffusion et de transport advectif latitudinal afin d'expliquer ces observations.

  Finalement, Cavalié et al. (2013) montrèrent, à l'aide d'observations Herschel, que (i) l'eau stratosphérique de Jupiter est en majeure partie une conséquence de l'impact de SL9 et que (ii) 15 ans après l'impact, les processus de mélange et de transport

latitudinal n'ont pas complètement homogénéisé la distribution stratosphérique de l'eau.

Ainsi, l'évolution temporelle de composés stratosphériques chimiquement stables sur la période de temps considérée (CO, CS, OCS, HCN) permet de sonder les processus de mélange stratosphérique, qu'ils soient diffusifs, advectifs ou une combinaison des deux.

L'arrivée de la sonde Juno prochainement sur Jupiter ainsi que de la future mission JUICE vont donner la possibilité de contraindre de façon plus détaillée ces processus. Par ailleurs, la mission Cassini a permis de cartographier temporellement et en fonction de la latitude les abondances de composés chimiques réactifs (C_2H_2, C_2H_6) sur Jupiter et Saturne (Nixon et al., 2007, 2010)

Un modèle photochimique qui couple à la fois la chimie, le transport vertical ainsi que le transport latitudinal est donc nécessaire pour interpréter les données. Dans ce chapitre, nous présentons un tel modèle. Celui-ci est l'adaptation du modèle présenté dans le chapitre 1, qui a été appliqué à l'étude de la stratosphère de Saturne dans les chapitres 2 et 3. Dans un premier temps, nous exposerons les caractéristiques générales du modèle de Jupiter sans transport latitudinal. Nous y présenterons notamment les effets saisonniers sur Jupiter et les comparerons à ceux prédits pour Saturne. Ensuite, nous comparerons les résultats du modèle avec les observations Cassini effectuées lors du survol de Jupiter. Enfin, nous présenterons comment l'ajout de phénomènes de transport peut améliorer la reproduction des observations.

4.2 Effets saisonniers sur Jupiter

Dans cette partie, nous présentons tout d'abord les caractéristiques du modèle 2D de Jupiter développé dans cette thèse. Nous exposerons alors l'évolution des abondances chimiques en fonction de la latitude et de la saison. Enfin nous procéderons à une comparaison des effets saisonniers entre les atmosphères de Jupiter ainsi que ceux de Saturne présentés dans le chapitre 2. Dans cette partie, nous négligerons les phénomènes de mélange latitudinaux, diffusifs ou advectifs.

4.2.1 Caractéristiques du modèle

Variations des paramètres orbitaux de Jupiter

Jupiter, avec un demi-grand axe de 5,2 ua, orbite autour du Soleil en 11,86 ans. Sa configuration orbitale est telle que son périhélie se produit durant la saison de printemps dans l'hémisphère nord. Les caractéristiques et paramètres orbitaux de Jupiter sont présentés et comparés aux autres planètes géantes sur la table 1.3. La figure 4.1 présente

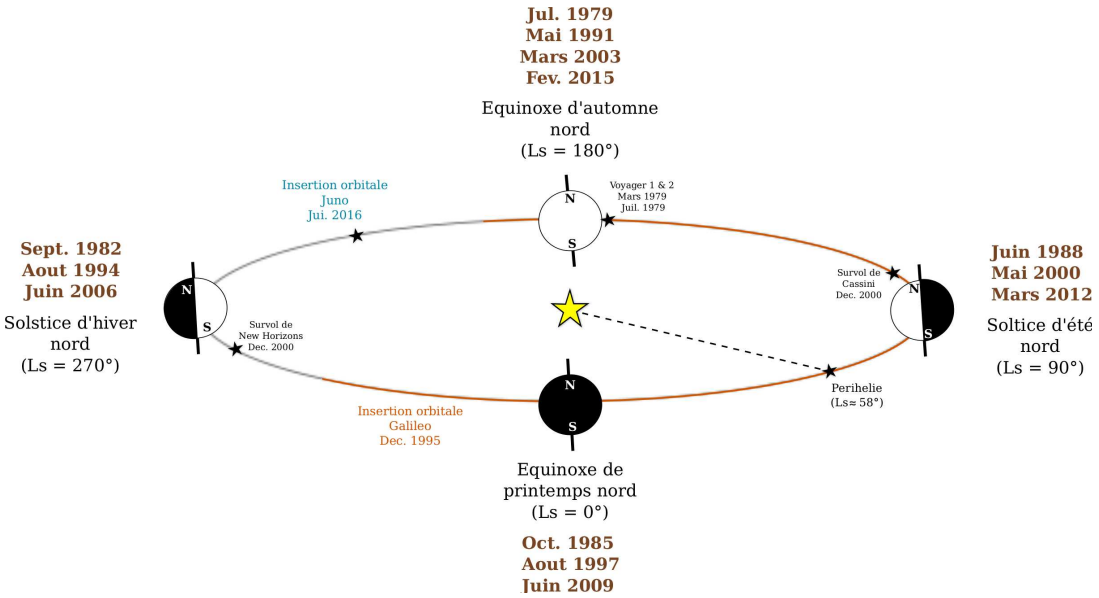

Figure 4.1 – Représentation des saisons sur Jupiter. La position de Jupiter sur son orbite est repérée par la longitude héliocentrique, L_s. Aux positions $L_s = 0°$, 90°, 180°, 270° correspondent l'équinoxe vernal de Jupiter, le solstice d'été, l'équinoxe d'automne et le solstice d'hiver dans l'hémisphère nord. Les missions spatiales qui ont survolé ou orbité autour de Jupiter sont représentées. Basé sur le calculateur d'éphéméride JPL-HORIZONS (J2000).

une vue d'ensemble des différentes saisons sur Jupiter, avec les survols de la majorité des missions répertoriées dans le tableau 4.1.

Le périhélie de Jupiter se produit durant la saison de printemps dans l'hémisphère nord, les saisons de printemps et d'été dans cet hémisphère sont plus courtes que ces mêmes saisons dans l'hémisphère sud. La figure 4.2 présente, de façon similaire à la figure 2.2 pour Saturne, l'évolution de la déclinaison solaire sur Jupiter ainsi que sa distance héliocentrique en fonction de sa position orbitale.

Les missions Voyager ont révélé l'existence des anneaux de Jupiter (Smith et al., 1979). Notre modèle de Jupiter ne prend pas en compte l'occultation du rayonnement solaire par ces anneaux car leurs opacités, mesurées de 450 nm à 950 nm à l'aide des sondes Voyager, Galileo, Cassini et complémentées par des observations au sol, sont extrêmement faibles, de l'ordre de $\approx 10^{-6}$ (Throop et al., 2004).

Profil de température

Nous considérerons que le profil de température est homogène avec la latitude. Il est tiré des travaux de Fouchet et al. (2000) et est basé sur le profil de température mesuré par la sonde Galileo lors de sa rentrée dans l'atmosphère de Jupiter (Seiff et al., 1998). Notons que ce profil a été modifié de 30 mbar à 10^{-3} mbar par rapport aux mesures de Galileo pour rendre compte des observations ISO/SWS (Fouchet et al., 2000). Il fut par ailleurs lissé verticalement afin de supprimer les oscillations verticales de température

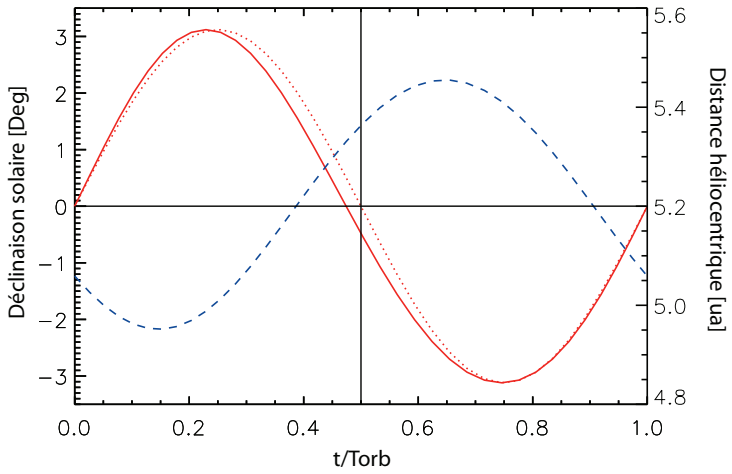

Figure 4.2 – Évolution de la déclinaison solaire sur Jupiter en considérant son excentricité $e = 0{,}04839$ (trait plein rouge) ainsi qu'une excentricité nulle (pointillés rouge). L'origine de la fraction orbitale $t/T_{\rm orb}$ est prise à l'équinoxe de printemps dans l'hémisphère nord ($L_s = 0°$). La variation de distance héliocentrique correspondante de Jupiter (tirets bleus) est tracée sur l'échelle verticale de droite. La ligne verticale à $t/T_{\rm orb} = 0{,}5$ correspond au moment ou la planète a effectué la moitié de sa période orbitale. L'équinoxe d'automne dans l'hémisphère nord se produit avant que la planète ait effectuée une demi-période ($t/T_{\rm orb} = 0{,}47$) du fait de la position du périhélie de Jupiter proche de son solstice d'hiver dans l'hémisphère nord (à $t/T_{\rm orb} = 0{,}23$).

mesurées par Galileo, qui sont très probablement causées par l'oscillation équatoriale de Jupiter (*Quasi-Quadrennial Oscillation, QQO*, voir par exemple Baldwin et al. (2001); Leovy et al. (1991); Orton et al. (1991)). Ce profil est représenté sur la figure 4.3.

La quantité de rayonnement solaire que Jupiter reçoit est, à l'instar de Saturne, une quantité fondamentale à la fois dans la régulation de la structure thermique de cette planète (Yelle et al., 2001), ainsi que dans sa composition chimique (Gladstone et al., 1996; Moses et al., 2005). À cause de la faible obliquité de Jupiter par rapport à Saturne, les effets saisonniers sont probablement plus faibles. Par ailleurs, le choix d'un profil de température uniforme en latitude est appuyé par les observations suivantes :

- Le gradient latitudinal de température sur Jupiter, mesuré par Cassini/CIRS, est de l'ordre de 7-8 K à 5 mbar (Nixon et al., 2007), alors que cette même sonde mesura un gradient d'environ 40 K à 2,1 mbar sur Saturne en 2005 (Sinclair et al., 2013).
- Le gradient latitudinal de température dans la haute troposphère ($\sim$ 200 mbar) est négligeable sur Jupiter (Nixon et al., 2007) alors qu'il était d'environ 10 K sur Saturne à ce même niveau de pression en 2005 (Fletcher et al., 2007b).
- L'évolution temporelle entre les températures mesurées par Voyager/IRIS et Cassini/CIRS, temporellement distantes de $\sim$ 21,8 ans (soit 1,76 années joviennes) sont inférieures à 10 K dans la basse stratosphère (10 mbar) et restent inférieures à 15 K dans la haute stratosphère (de 1 à 0,01 mbar) (Simon-Miller et al., 2006; Nixon et al., 2010). Notons que les mesures effectuées par Voyager et Cassini sur Jupiter sont des instantanées (à la différence des orbiteurs). Ainsi, les données présentées par Simon-Miller et al. (2006) et Nixon et al. (2010) peuvent capturer une des phases

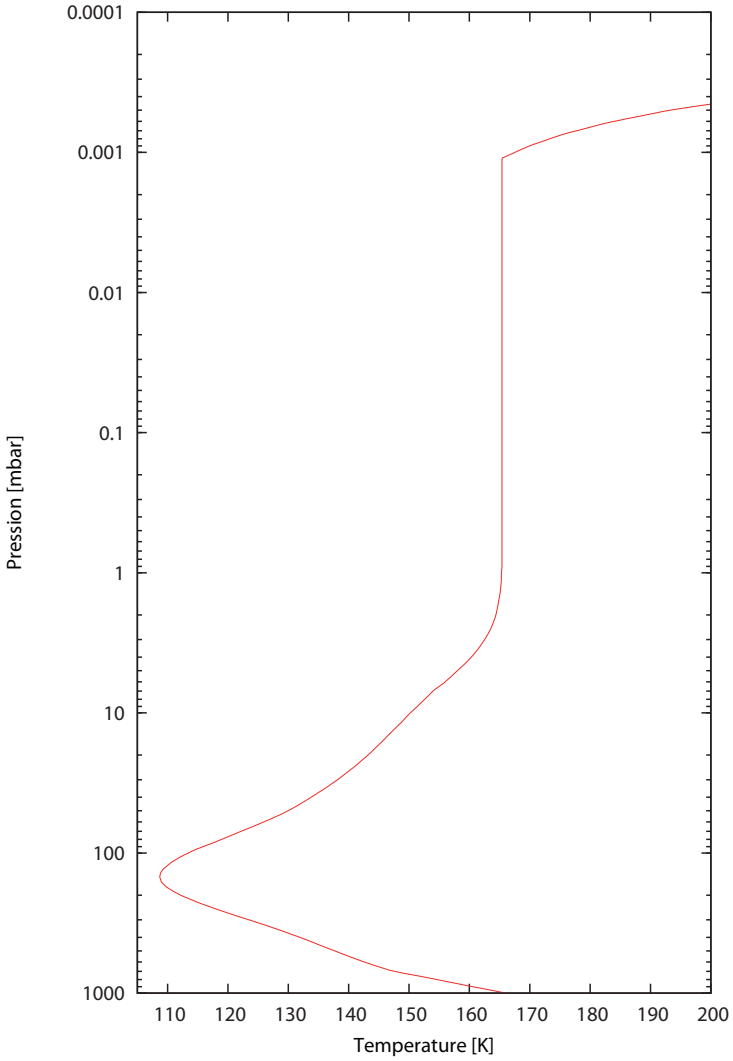

Figure 4.3 – Profil de température de l'atmosphère de Jupiter, basé sur Fouchet et al. (2000) et Seiff et al. (1998).

de l'oscillation équatoriale de Jupiter.

Profil de diffusion turbulente

Dans cette partie, nous comparons les prédictions du modèle photochimique saisonnier de Jupiter avec les observations de Cassini publiées par Nixon et al. (2007, 2010). Ces auteurs prirent les résultats du modèle photochimique de Bishop et al. (1998) en tant qu'a priori pour la distribution de CH_4, C_2H_2 et C_2H_6 dans leur modèle d'inversion de spectre. Pour une meilleure cohérence, nous avons tenté de reproduire le plus fidèlement possible le profil vertical du méthane du modèle de Bishop et al. (1998).

Le profil de diffusion turbulente initialement utilisé par Nixon et al. (2007) suppose (i)

un coefficient de $K_{zz} = 2{,}0{\times}10^2$ cm^{2}s^{-1} dans la troposphère, (ii) une variation de celui-ci suivant $K_{zz} \propto n^{-0,6}$ (n étant la concentration) dans la stratosphère et (iii) un coefficient de $K_{zz} = 2{,}0{\times}10^6$ cm^{2}s^{-1} au-dessus de l'homopause du méthane. Par ailleurs, Nixon et al. (2007) supposent que l'homopause de méthane de situe à $\approx 10^{-2}$ mbar.

Nous avons donc, dans un premier temps, utilisé le profil de diffusion turbulente proposé par Nixon et al. (2007) et observé que l'accord entre les résultats du modèle photochimique présenté ici et celui de Bishop et al. (1998) ne coïncidait pas. En effet, les résultats obtenus avec notre modèle prédisent une position de l'homopause plus haute que celle définie dans le modèle de Bishop et al. (1998). Les différences entre les deux modèles peuvent s'expliquer des façons suivantes :

- le schéma numérique utilisé dans le modèle photochimique est différent (voir annexe A.4).
- le coefficient de diffusion moléculaire, qui n'est pas présenté par Bishop et al. (1998), est différent de celui utilisé dans notre modèle.

Finalement, nous avons utilisé le profil de diffusion turbulente C, tiré de Moses et al. (2005) qui permet une reproduction satisfaisante des observations de CH_4 de New Horizons lors de son survol de Jupiter (Greathouse et al., 2010). Les profils de CH_4 obtenus avec les différents coefficients de diffusion turbulente sont présentés sur la figure 4.4.

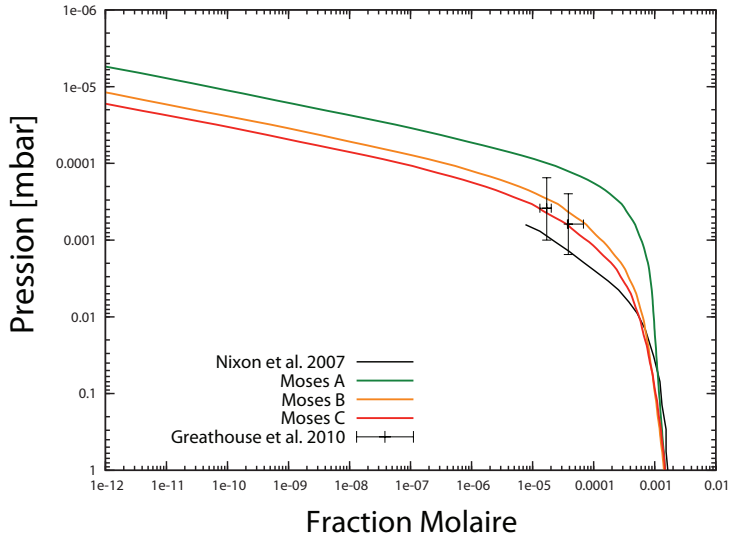

Figure 4.4 – Profils verticaux du méthane prédits à l'aide de coefficients de diffusion turbulente variés. En noir, le profil de Nixon et al. (2007). En rouge, le profil C, tiré de Moses et al. (2005) et utilisé dans ce travail. Les profils de méthane obtenus avec les coefficients de diffusion turbulente A et B tirés de Moses et al. (2005) sont représentés en vert et orange, respectivement. Les données observationnelles proviennent d'une occultation stellaire effectuée par New Horizons/UVS (Greathouse et al., 2010).

Le profil de diffusion turbulente utilisé ici est présenté sur la figure 4.5 ainsi que les autres coefficients proposés par Moses et al. (2005).

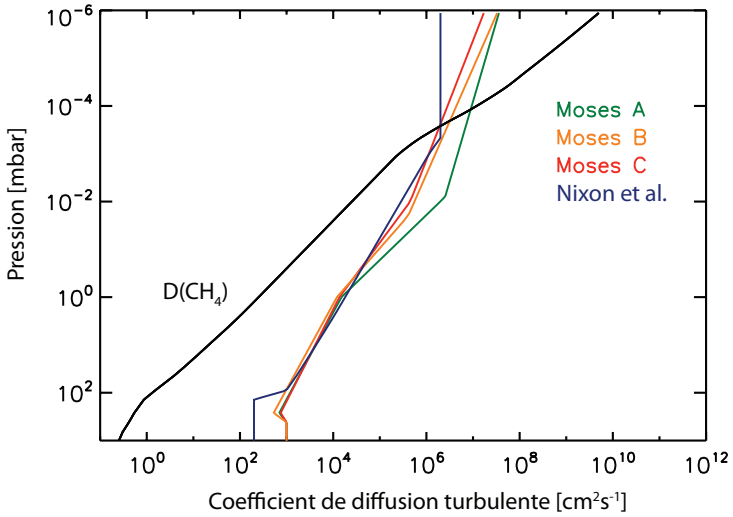

Figure 4.5 – Représentation des coefficients de diffusion turbulente (traits pleins en couleurs) en fonction de la pression. Le coefficient de diffusion moléculaire du méthane est représenté en noir. Le coefficient utilisé dans cette étude est le coefficient C tiré de Moses et al. (2005), représenté en rouge. Pour comparaison, les coefficients de diffusion turbulente A et B, tiré de Moses et al. (2005) sont représentés en vert et orange, respectivement.

Réseau chimique

Il convient de vérifier dans un premier temps que le réseau réduit déterminé pour l'atmosphère de Saturne (cf partie 1.7) est aussi adapté à l'atmosphère de Jupiter.

Pour cela, nous nous sommes placés dans un cas d'étude dans lequel nous modéliserons les profils d'abondance de C_2H_2, C_2H_6 et C_2H_4 avec le réseau réduit et le réseau nominal. Ce dernier est le réseau chimique le plus complet vis-à-vis des connaissances actuelles.

La figure 4.6 présente les profils verticaux de C_2H_2, C_2H_6 et C_2H_4 modélisés avec le réseau réduit de Saturne et le réseau nominal. Ces profils ont été obtenu à l'aide du modèle photochimique de Dobrijevic et al. (2011) adapté à Jupiter. L'accord est satisfaisant pour C_2H_2 et C_2H_6.

À des pressions supérieures à 10 mbar, des écarts sont notables dans les profils de C_2H_2 et C_2H_4 ainsi que pour des pressions inférieures à 0,01 mbar pour C_2H_4. Ceux-ci restent toutefois acceptables lorsqu'ils sont comparés aux barres d'erreurs du modèle (voir partie 2.2).

Nous avons donc utilisé le réseau chimique réduit présenté dans le chapitre 1 pour modéliser la photochimie jovienne.

4.2.2 Approximations

Étant donnée la faible obliquité de Jupiter par rapport à Saturne, il peut être pertinent de se demander si les calculs du modèle saisonnier peuvent être approximés par un calcul

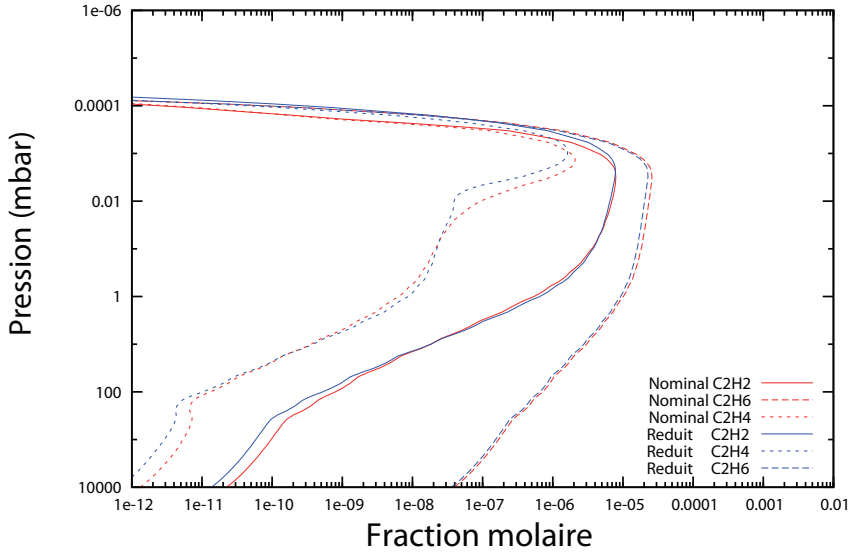

Figure 4.6 – Comparaison des profils verticaux de C_2H_2 (traits pleins), C_2H_6 (tirets) et C_2H_4 (pointillés) dans le cas du réseau nominal (rouge) et du réseau réduit (bleu).

stationnaire. Nous comparons ici les distributions d'abondance du modèle saisonnier de Jupiter, pris à l'équinoxe de printemps dans l'hémisphère nord ($L_s = 0°$) avec celles prédites par le modèle à l'état stationnaire, i.e. intégré à cette même position jusqu'à convergence du modèle. Les calculs du modèle stationnaire sont intégrés à l'équinoxe de printemps dans l'hémisphère nord, cependant, la position de son point subsolaire ainsi que sa distance héliocentrique n'évoluent pas dans le temps.

Les différences dans la prédiction des abondances de C_2H_2 et C_2H_6 sont présentées sur la figure 4.7. La convergence du modèle saisonnier est atteinte lorsque les différences dans les abondances à un niveau de pression et une latitude donnés sont inférieures à un seuil arbitraire ($\sim 5\%$) d'une orbite sur l'autre. Les abondances de C_2H_2 et C_2H_6 sont régies par (i) la photolyse du méthane dans la haute stratosphère (ii) la diffusion (principalement pour C_2H_6) de ces composés vers des niveaux de pression plus importants. C'est donc l'intensité de la diffusion turbulente qui va contrôler le nombre d'orbites nécessaires afin d'atteindre la convergence du modèle saisonnier jusque dans la haute troposphère.

À la différence du modèle de Saturne qui nécessitait $\sim$ 30 orbites afin d'atteindre la convergence, le modèle de Jupiter nécessite plus d'une centaine d'orbites pour l'atteindre à des niveaux de pression de 1 bar. Ceci provient du fait que les processus de mélange vertical sont plus important sur Saturne que sur Jupiter.

Les simulations avec les résolutions les plus fines comportent 120 niveaux de pression, 35 cellules en latitude et des pas orbitaux de 10° de longitude héliocentrique.

Plus la latitude est élevée et plus la différence entre le modèle stationnaire et le modèle saisonnier devient grande. Les différences sur les profils de C_2H_2 atteignent la valeur de 83% au niveau de pression de $\sim 3\times10^{-2}$ mbar à 85°S. Les différences sur les profils de C_2H_6 atteignent la valeur de 35% à $\sim$ 4-5$\times10^{-2}$ mbar à $\pm$ 85°. À des latitudes inférieures à $\pm$ 75°, les différences sont inférieures à 22% pour C_2H_2 et 14% pour C_2H_6. L'asymétrie dans

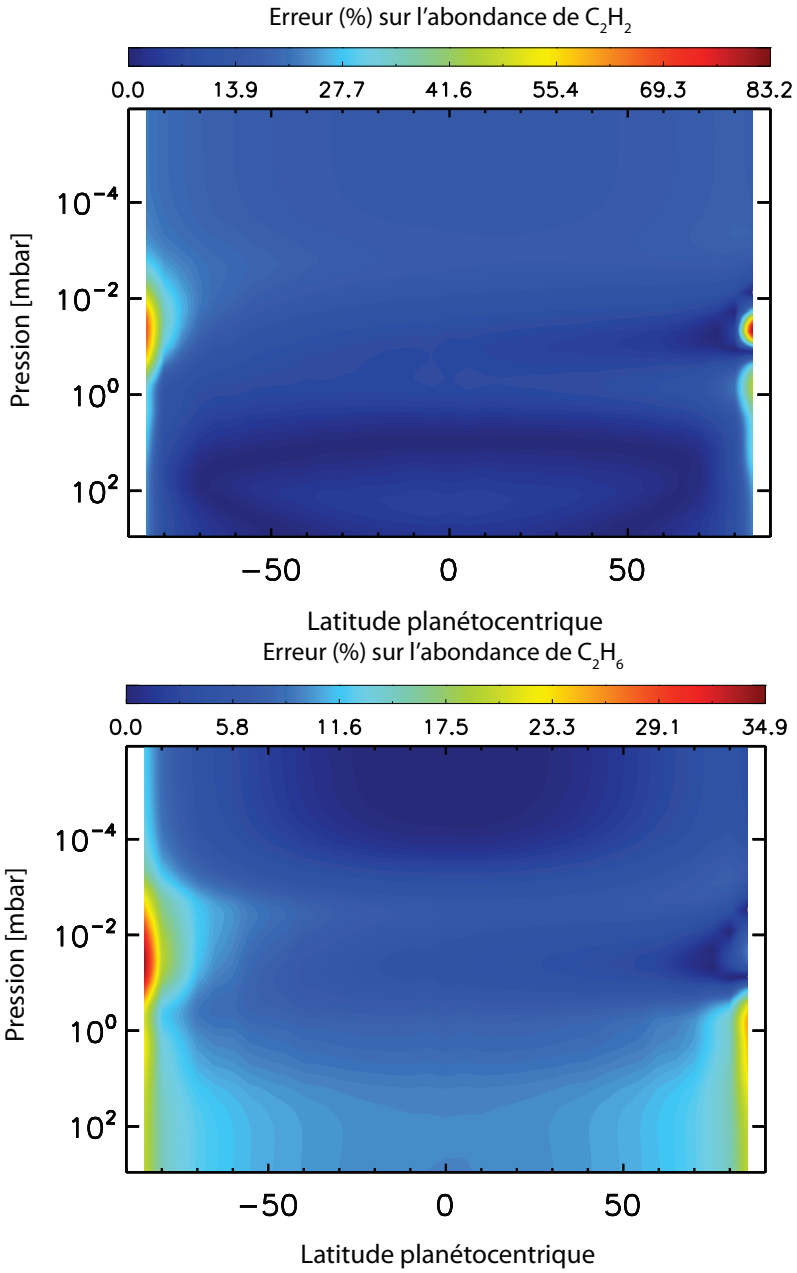

Figure 4.7 – Différences dans la prédiction des distributions d'abondance de C_2H_2 (en haut) et C_2H_6 (en bas) entre un modèle saisonnier et un modèle stationnaire. Les résultats du modèle saisonnier à $L_s = 0°$ sont comparés aux résultats du modèle stationnaire, intégrés sur cette même position orbitale.

les différences entre les deux hémisphères est causée par le modèle saisonnier. En effet, la composition chimique dans l'hémisphère nord à la sortie de l'hiver n'est pas identique à celle dans l'hémisphère sud, alors que le modèle stationnaire prédit une composition chimique symétrique par rapport à l'équateur.

Il peut être ainsi réaliste d'approximer le modèle de Jupiter par un modèle station-

naire si les résultats souhaités sont restreints aux latitudes moyennes. L'approximation du modèle stationnaire permet un gain substantiel de temps de calcul, typiquement d'un ordre de grandeur.

Diffusion Rayleigh

Prendre en compte le transport dans un modèle photochimique saisonnier 2D couplé avec un modèle de transfert radiatif à 3D qui prend en compte les diffusions multiples via une procédure Monte-Carlo est numériquement contraignant. En effet, lorsque le transport n'est pas pris en compte, les taux de photodissociations peuvent seulement être calculés à plusieurs points sur l'orbite sans en altérer l'exactitude des résultats. En revanche, lorsque le transport advectif est pris en compte :

- les résolutions en latitude et altitude doivent être augmentées afin de limiter la diffusion numérique (voir annexe A)
- les taux de photodissociations nécessitent d'être calculés à chaque appel du solveur numérique. Par ailleurs, le temps d'intégration du solveur est contraint en fonction de l'importance du transport. Ceci implique un nombre croissant d'appel du solveur (et donc du modèle de transfert radiatif), lorsque l'intensité du transport augmente.

Par ailleurs, du fait de l'important nombre d'orbites nécessaires au modèle saisonnier pour atteindre la convergence, une approximation supplémentaire est nécessaire. Afin de rendre réalisable cette opération, nous négligerons dans cette partie les diffusions Rayleigh multiples. Nous présentons l'erreur effectuée par un modèle ne prenant pas en compte ces diffusions sur la figure 4.8.

Les différences observées sur les profils de C_2H_6 (figure 4.8, en bas) sont très faibles ($< 7\,\%$). En effet, l'abondance de C_2H_6 est régie par la réaction méthyle-méthyle, or l'abondance du méthyle est principalement contrôlée par la photolyse du méthane à $\sim 10^{-4}$ mbar. La diffusion Rayleigh n'a pas d'influence notable sur les taux de production de la molécule de méthyle.

En revanche, les différences notées sur les profils de C_2H_2 sont plus conséquentes (figure 4.8, en bas) et atteignent 97% à des niveaux de pression supérieures à 100 mbar. Au-dessus de ce niveau de pression, les différences restent inférieures à 60%, qui est une valeur que nous acceptons comme raisonnable compte tenu du gain en temps de calcul (gain d'un facteur 5).

4.2.3 Modélisation saisonnière de sa photochimie

Les atmosphères de Jupiter et Saturne sont composées des mêmes espèces majoritaires, seules les abondances relatives de ces composés diffèrent. Moses et al. (2005) montrèrent que, bien que les conditions physiques des planètes géantes soient différentes (distance héliocentrique, température stratosphérique, mélange vertical, conditions aux limites), la photochimie stratosphérique reste contrôlée et initiée par la photolyse du CH_4. À cela

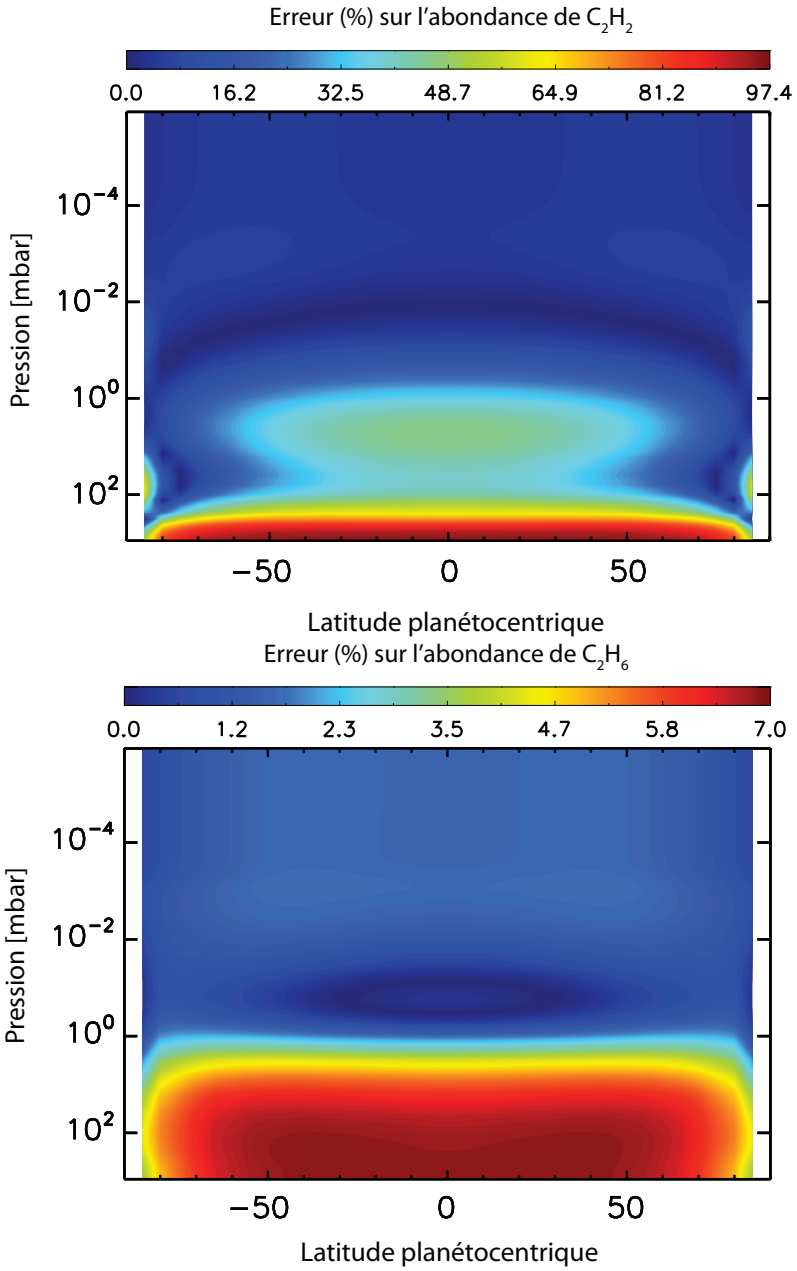

Figure 4.8 – Erreurs effectuées dans la prédiction des distributions d'abondance de C_2H_2 (en haut) et C_2H_6 (en bas) entre un modèle photochimique saisonnier tenant compte des diffusions Rayleigh multiples et un modèle les négligeant. Les résultats des deux modèles sont comparés pour $L_s = 0°$.

nous pouvons ajouter que les variations de composition chimique à une latitude donnée vont dépendre de l'obliquité de la planète géante considérée.

Les profils verticaux des principaux hydrocarbures (CH_4, C_2H_2 et C_2H_6) sont présentés sur la figure 4.9. Ces profils sont présentés à 3 latitudes différentes (80°S, 40°S et l'équateur) sur l'orbite complète de Jupiter, soit 360° de longitude héliocentrique, par pas

de 30°. Cette figure est à rapprocher de la figure 2.9 présentée dans le cas de Saturne.

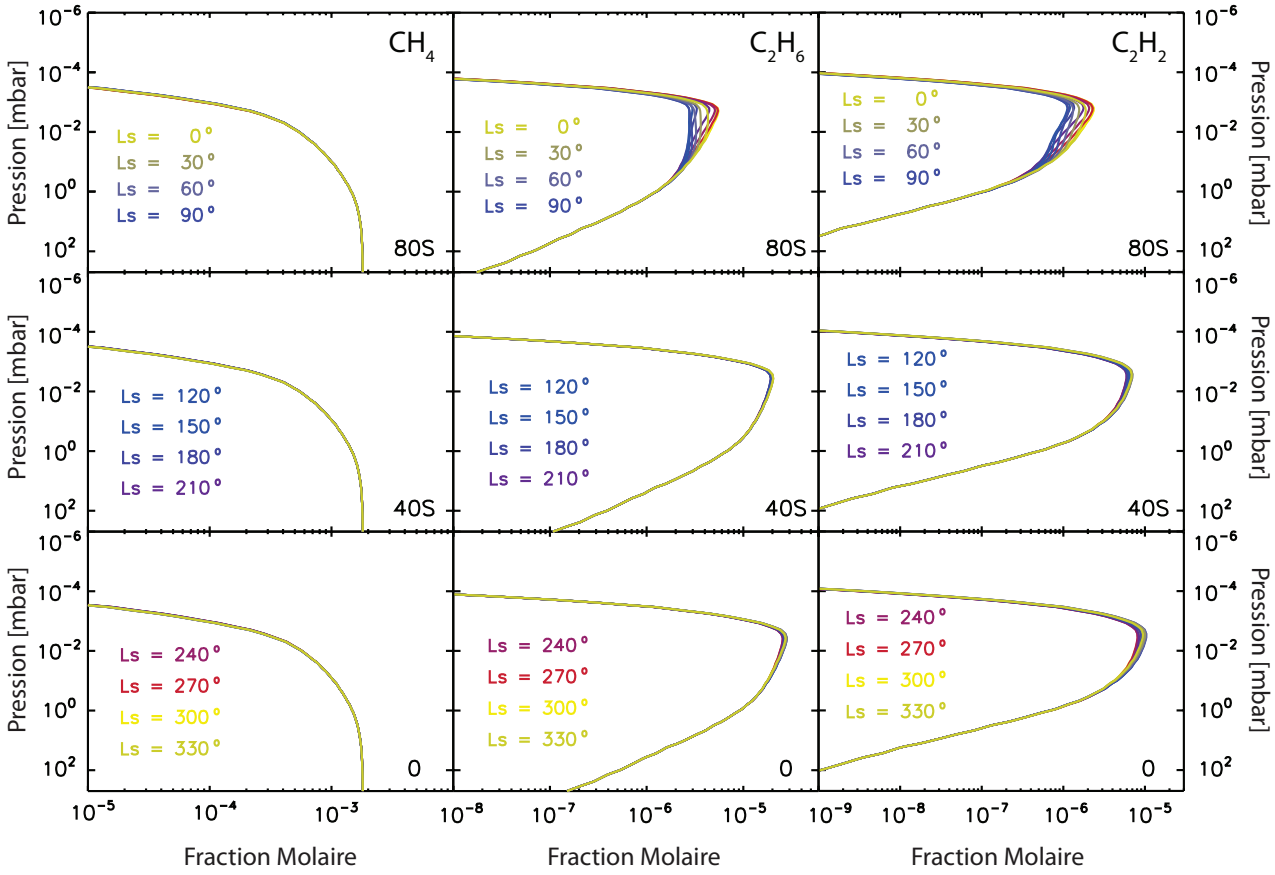

Figure 4.9 – Évolutions saisonnières de CH_4 (gauche), C_2H_6 (milieu) et C_2H_2 (droite) calculées sur une année jovienne complète (360° en longitude héliocentrique, par pas de 30°). Ces évolutions sont présentées à trois latitudes : 80°S (en haut), 40°S (au milieu) et l'équateur (en bas).

Contrairement à Saturne, les variations saisonnières de composition sont plus faibles à hautes latitudes, bien que toujours notables. Les principaux processus chimiques qui contrôlent l'évolution de l'abondance de C_2H_6 sont présentés sur la figure 4.10. Ces taux de production et de perte sont à rapprocher à ceux présentés sur les figures 2.10 et 2.11 pour Saturne. À cause des faibles effets saisonniers sur Jupiter, nous présentons seulement ces taux à l'équateur et lors de l'équinoxe de printemps dans l'hémisphère nord.

Les processus chimiques contrôlant le profil vertical de C_2H_6 sur Jupiter sont identiques à ceux de Saturne. Ce composé est produit proche de l'homopause via la réaction ($CH_3 + CH_3 \xrightarrow{M} C_2H_6$) et diffuse ensuite dans la basse stratosphère. Par ailleurs, ce composé est principalement photolysé par les réactions ($C_2H_6 + h\nu \rightarrow C_2H_4 + H_2$), ($C_2H_6 + h\nu \rightarrow C_2H_2 + H_2 + H_2$) ainsi que ($C_2H_6 + h\nu \rightarrow C_2H_4 + H + H$).

Nous notons quelques légères différences dans les principaux processus chimiques qui régissent le profil vertical de C_2H_2 sur Jupiter (voir figure 4.11), lorsque ceux-ci sont comparés au cas de Saturne. Les principales différences sont notables dans les taux de

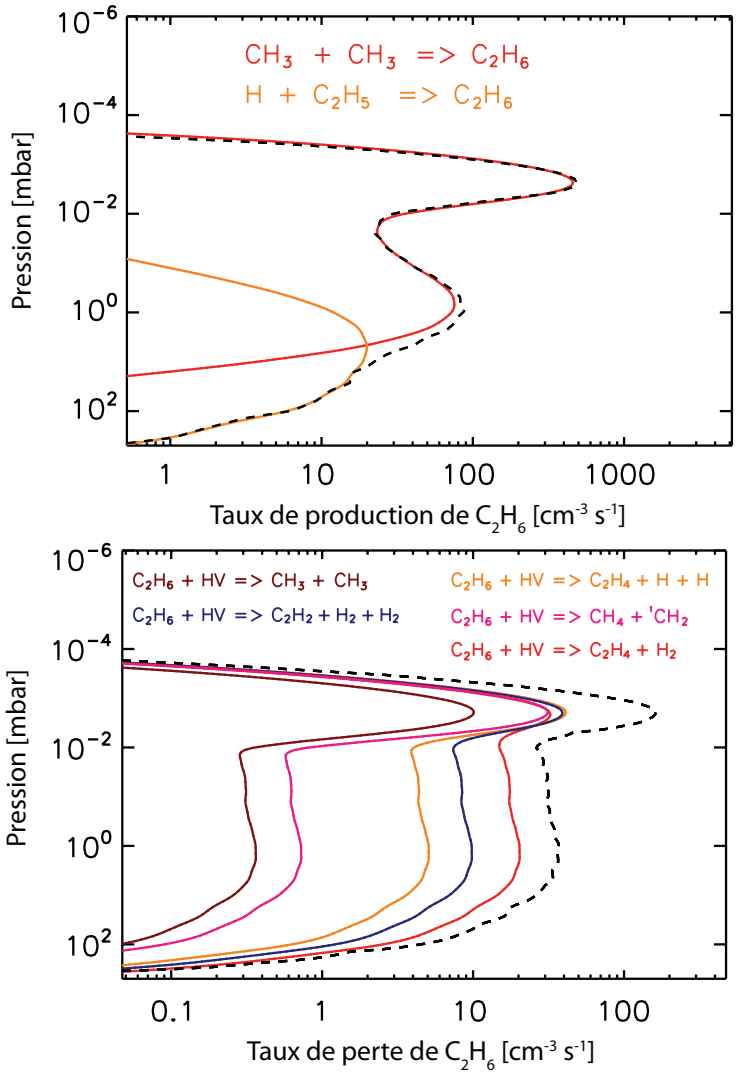

Figure 4.10 – Taux de production (haut) et de perte (bas) des principales réactions qui mènent à la production de C_2H_6. Ces taux sont présentés à l'équateur au moment de l'équinoxe de printemps dans l'hémisphère nord ($L_s = 0°$).

production à des pressions inférieures à 10^{-2} mbar, bien que ces taux soient toujours dominés par la réaction ($H + C_2H_3 \rightarrow C_2H_2 + H_2$). La réaction ($C_2H_6 + h\nu \rightarrow C_2H_2 + H_2 + H_2$) est maintenant plus efficace dans la production de C_2H_2 que les réactions ($C_2H_4 + h\nu \rightarrow C_2H_2 + H + H$) et ($C_2H_4 + h\nu \rightarrow C_2H_2 + H_2$). Par ailleurs, et toujours dans la haute stratosphère, la réaction ($C_2H + H_2 \rightarrow C_2H_2 + H$) contribue maintenant plus fortement à la production de C_2H_2 que dans le cas de Saturne. À des pressions supérieures à 10^{-2} mbar, la réaction ($C_2H + CH_4 \rightarrow C_2H_2 + CH_3$) est maintenant moins efficace dans la production de C_2H_2 par rapport au cas de Saturne.

Intéressons-nous maintenant en détail à la comparaison entre les variabilités saisonnières prédites pour Jupiter et Saturne.

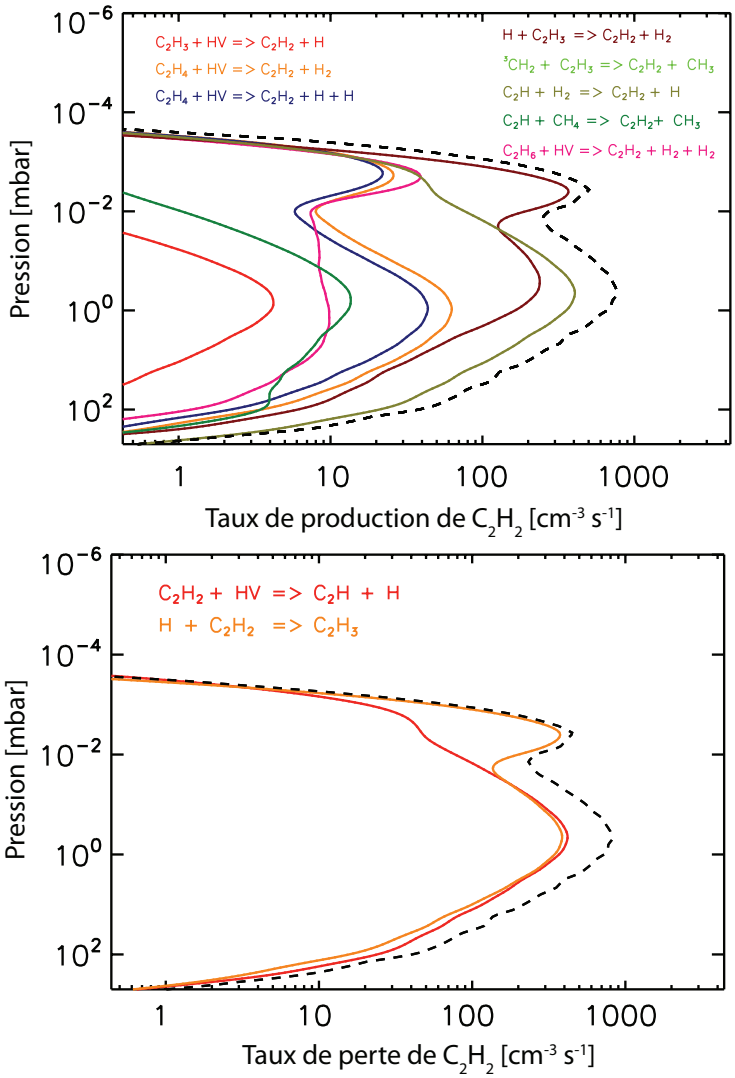

Figure 4.11 – Taux de production (haut) et de perte (bas) des principales réactions qui mènent à la production de C_2H_2. Ces taux sont présentés à l'équateur au moment de l'équinoxe de printemps dans l'hémisphère nord ($L_s = 0°$).

4.2.4 Comparaison des variabilités saisonnières de Jupiter et Saturne

Il est instructif de procéder à une intercomparaison des variabilités saisonnières de la composition des stratosphères de Jupiter et Saturne. Nous présentons de telles comparaisons pour C_2H_6 (figure 4.12) ainsi que C_2H_2 (figure 4.13) pour trois latitudes différentes (80°S, 40°S et l'équateur) et à trois niveaux de pression différents (10^{-4} mbar, 10^{-2} mbar et 1 mbar).

À 80°S et 10^{-4} mbar, les abondances joviennes de C_2H_2 et C_2H_6 présentent respectivement des variations d'un facteur 1,65 et 1,33 alors que, sur Saturne, elles varient res-

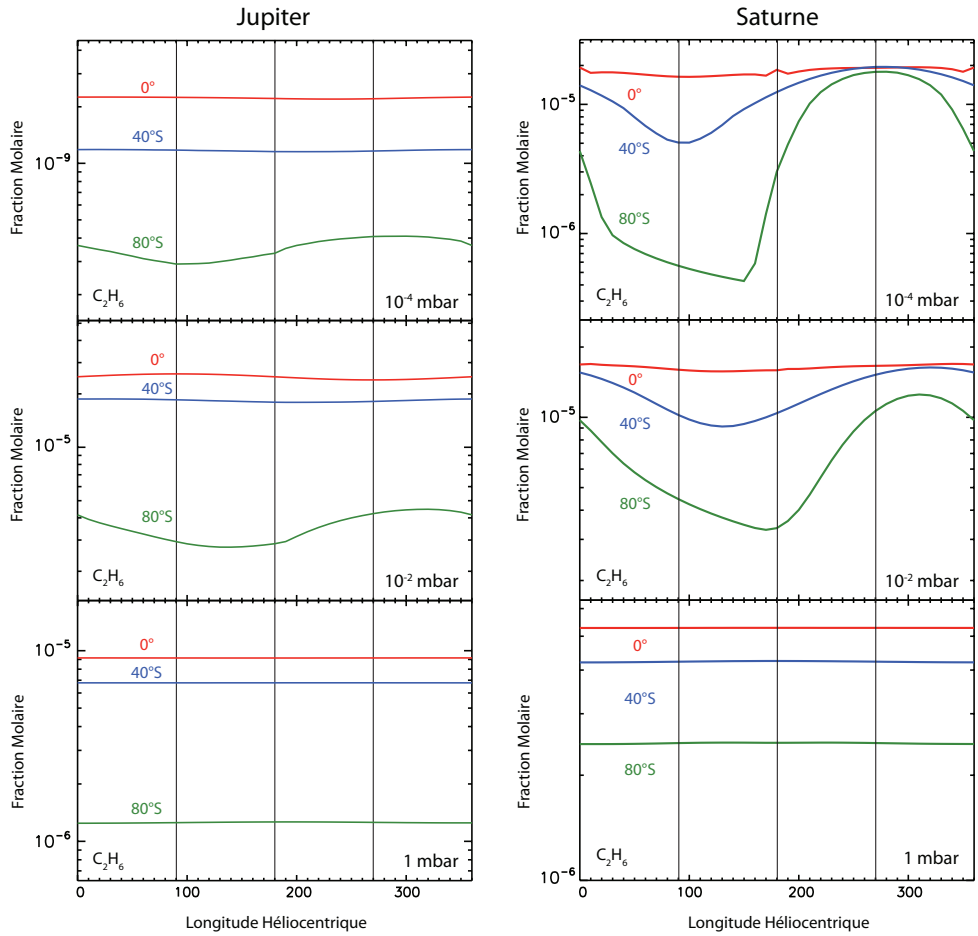

Figure 4.12 – Évolutions saisonnières des abondances de C_2H_6 sur Jupiter (à gauche) et Saturne (à droite). Ces abondances sont présentées pour trois niveaux de pression : 10^{-4} mbar (en haut), 10^{-2} mbar (au milieu) et 1 mbar (en bas) et pour trois latitudes différentes : 80°S (vert), 40°S (bleu) et l'équateur (rouge). Les traits noirs verticaux correspondent aux solstices et équinoxes. Les axes horizontaux correspondent aux longitudes héliocentriques respectives des planètes correspondantes. Le champ thermique utilisé pour le modèle de Saturne est le champ (U), (voir chapitre 2).

pectivement de plus d'un facteur 60 et 40. Par ailleurs, toujours à 80°S mais à 10^{-2} mbar, les abondances de C_2H_2 et C_2H_6 présentent respectivement des variations d'un facteur 2 et 1,6 alors qu'elles varient d'un facteur 5,3 et 2,7 sur Saturne.

Il est intéressant de noter que C_2H_2 et C_2H_6 sur Jupiter sont toujours plus abondants à l'équateur, quelle que soit la saison. Ceci contraste avec le cas de Saturne pour lequel C_2H_2 devient périodiquement plus abondant à hautes latitudes que dans les régions équatoriales en fonction de la saison. De même, sur Saturne, C_2H_6 devient périodiquement aussi abondant dans les régions polaires que dans les régions équatoriales. Ce comportement s'explique par le fait que l'insolation moyenne est tout le temps maximale au niveau équatorial de Jupiter, alors qu'elle présente un cycle saisonnier sur Saturne.

Notons que l'effet de l'excentricité orbitale de Jupiter peut être observée à 10^{-2} mbar sur les figures 4.12 et 4.13. Les abondances de C_2H_2 et C_2H_6 présentent un maximum

local proche du solstice d'été dans l'hémisphère nord ($L_s = 90°$), soit peu de temps après le périhélie de Jupiter ($L_s = 58°$). Ce phénomène est visible à 10^{-4} mbar sur Jupiter pour C_2H_2 et non pour C_2H_6. En effet, le niveau de pression 10^{-4} mbar sur Jupiter est situé au-dessus de l'homopause du méthane. L'abondance de C_2H_6 décroit donc plus rapidement que celle de C_2H_2 au-dessus de l'homopause à cause de son poids moléculaire plus important. Ainsi, les variations saisonnières de C_2H_6 ont déjà disparu à 10^{-4} mbar alors qu'elles sont encore présentes pour C_2H_2.

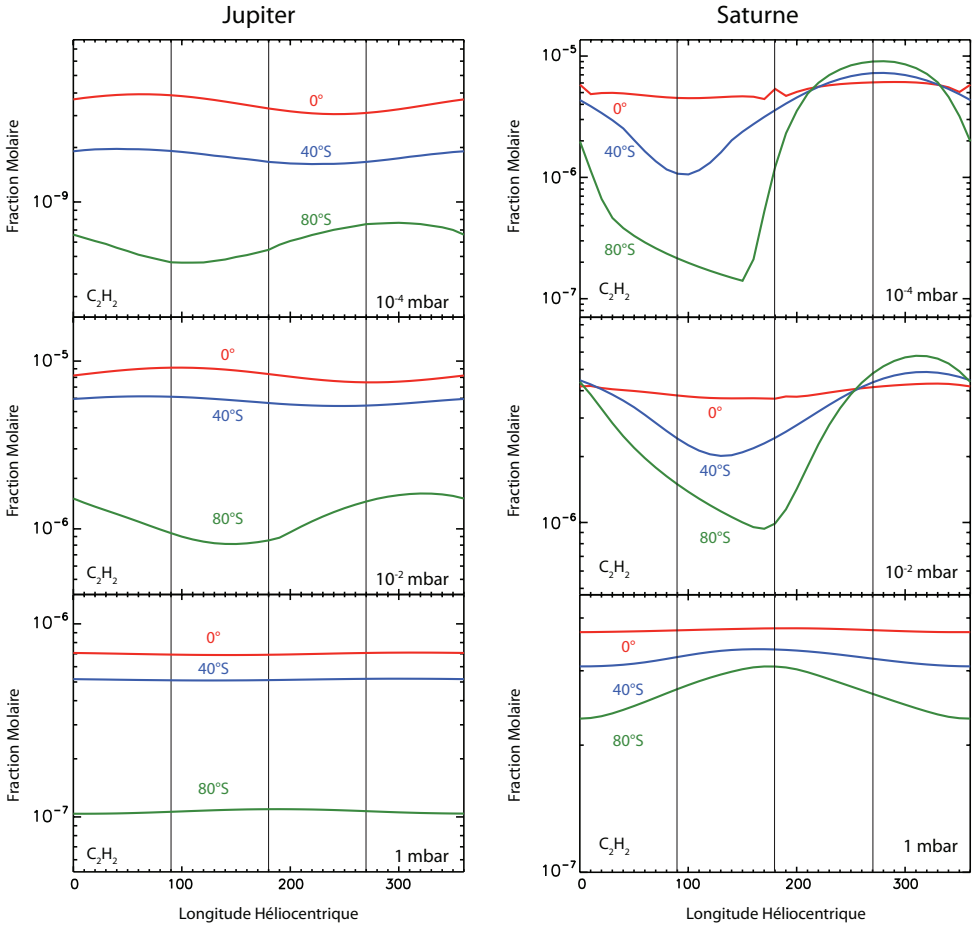

Figure 4.13 – Similaire à la figure 4.12 pour C_2H_2.

L'effet de l'excentricité de Jupiter est clairement identifiable sur la densité de colonne de C_2H_2 (figure 4.14). En effet, à 10^{-2} mbar, l'évolution de cette quantité (figure 4.14 en haut à gauche) est contrôlée par l'excentricité de Jupiter alors que sur Saturne, la densité de colonne (figure 4.14 en haut à droite) est principalement contrôlée par son obliquité et modulée par son excentricité. Le périhélie de Jupiter se produit pour $L_s = 58°$ (voir figure 4.1). Une importante fraction du C_2H_2 produit l'est à des niveaux de pression inférieurs à 10^{-2} mbar, le maximum de densité de colonne à 10^{-2} mbar est décalée temporellement par rapport au périhélie de Jupiter, et se produit pour $L_s = 80°$.

À 1 mbar, l'évolution des abondances de C_2H_2 devient peu à peu contrôlée par la

diffusion verticale plutôt que par la chimie. Bien qu'un effet de l'excentricité de Jupiter ainsi que de l'obliquité de Saturne soit toujours notable, les gradients saisonniers de densité de colonne à 1 mbar (figure 4.14 en bas) pour une latitude donnée sont diminués par rapport à 10^{-2} mbar.

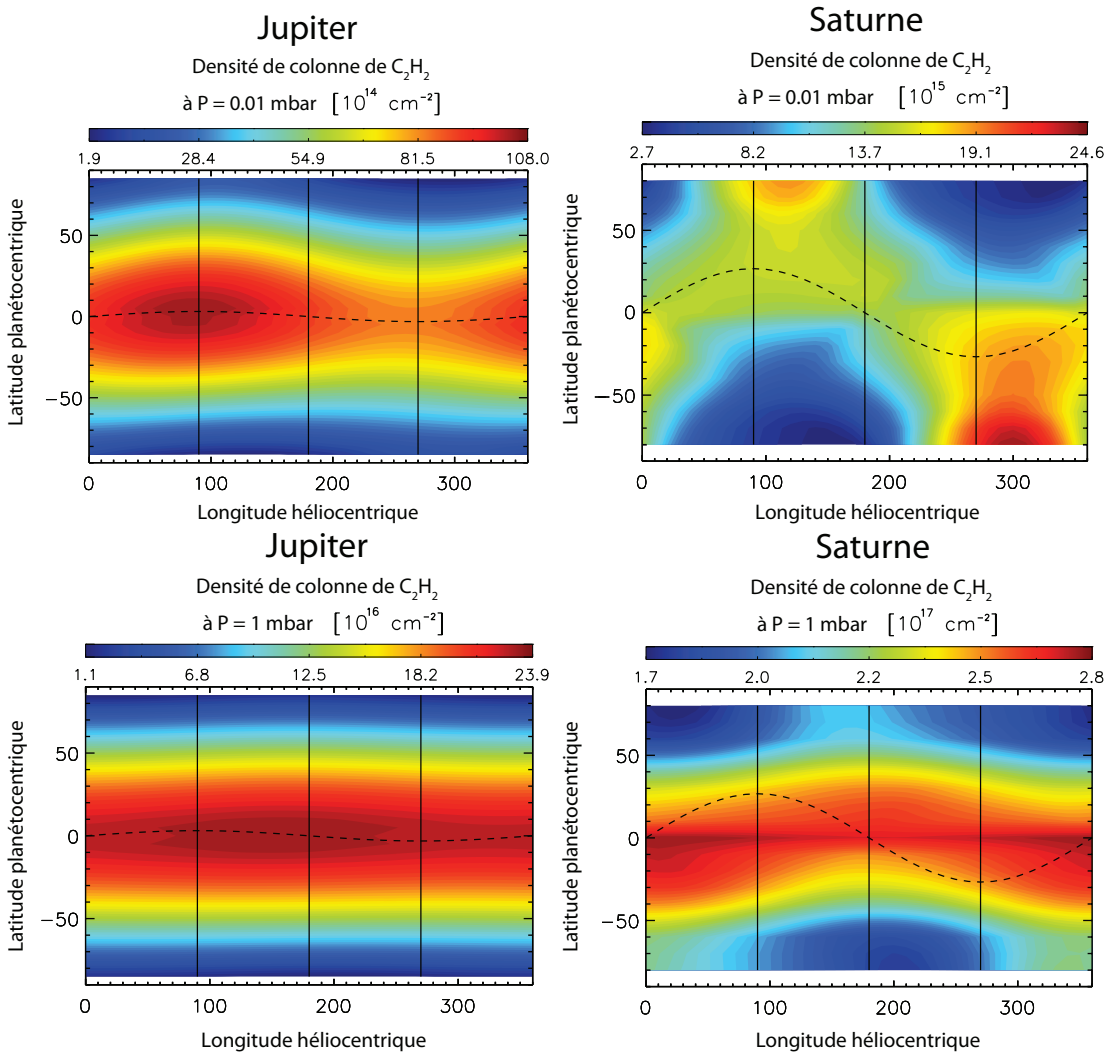

Figure 4.14 – Évolutions des densités de colonne de C_2H_2 sur Jupiter (à gauche) et Saturne (à droite), à 10^{-2} mbar (en haut) et 1 mbar (en bas). Les traits noirs verticaux représentent les positions des solstices et équinoxes relatifs à chacune des planètes. Le solstice d'été dans l'hémisphère nord se situe à $L_s = 90°$ pour les deux planètes. Les courbes représentés en tirets correspondent à la position du point subsolaire.

Maintenant que les résultats du modèle photochimique 2D saisonnier de Jupiter sans transport latitudinal viennent d'être présentés, comparons ceux-ci avec les observations effectuées par la sonde Cassini/CIRS.

4.2.5 Comparaison avec les observations de Cassini/CIRS

Plus de 20 ans après les survols de Jupiter par les sondes Voyager qui permirent de cartographier l'émission infrarouge de la planète en fonction de la latitude grâce aux instruments IRIS, une telle opération a pu être réitérée par Cassini grâce à l'instrument CIRS.

Cet instrument possède cependant une bien meilleure résolution spectrale (0,48 cm^{-1} contre 3,9 cm^{-1}) que ses prédécesseurs. L'analyse du spectre infrarouge mesuré de 10 à 1400 cm^{-1}, révéla, outre les espèces détectées précédemment, la présence de nouveaux composés chimiques tel que le méthyle (CH_3) et le diacétylène (C_4H_2) (Kunde et al., 2004).

À l'instar du chapitre 2, nous nous restreindrons ici seulement à la comparaison des résultats du modèle saisonnier avec les observations de C_2H_2 et C_2H_6, car les abondances de ces composés ainsi que leurs variations latitudinales ont pu être cartographiées avec précision par CIRS.

Kunde et al. (2004) présentèrent une première analyse des variations latitudinales de ces composés, en termes d'intensité de raies. Bien qu'une inversion de spectre ne fut pas réalisée, celle-ci fut néanmoins corrigée, au premier ordre, d'un effet thermique ainsi que de la géométrie d'observation (correction de la masse d'air).

Une étude des spectres mesurés par CIRS fut effectuée par Nixon et al. (2007). Ils moyennèrent les spectres en longitude et exclurent les hautes latitudes, i.e. au-delà de ± 70°, pour lesquelles trop peu de spectres furent acquis. De même, ils exclurent de leur analyse certaines régions situées à ± 60-70°, identifiées comme *hot spots* et reliées aux phénomènes auroraux par ailleurs observés dans le domaine UV (Pallier and Prangé, 2001) et X (Gladstone et al., 2002). Par la suite, Nixon et al. (2010) reprirent l'analyse de ces mêmes spectres avec quelques modifications dans les algorithmes de calibration ainsi que les bases de données spectroscopiques utilisées (pour C_2H_6 notamment).

Nous comparons ici les observations du survol de Jupiter par Cassini avec les résultats du modèle photochimique. Nixon et al. (2007) utilisèrent des profils d'abondance a priori tirés du modèle photochimique de Bishop et al. (1998). À l'aide de ces profils, ils calculèrent dans un premier temps le profil de température stratosphérique à l'aide de la bande ν_4 du méthane ($\sim$1300 cm^{-1}). Ils calculèrent ensuite les abondances stratosphériques de C_2H_2 et C_2H_6 grâce à la température précédemment contrainte dans la gamme de pression sensible, i.e. pour lesquelles les raies sont émises. Nous comparerons donc les profils latitudinaux d'abondance de C_2H_2 et C_2H_6 aux niveaux de pression sensibles, i.e. 0,1 mbar, 5 mbar et 200 mbar pour C_2H_2 ainsi que 5 mbar et 200 mbar pour C_2H_6.

La figure 4.15 présente une comparaison entre les profils latitudinaux de C_2H_2 et C_2H_6 observés et le modèle photochimique. Les résultats du modèle sont présentés aux solstices et équinoxes. À cause de la faible obliquité de Jupiter ainsi que des niveaux de pression sondés, seules les abondances de C_2H_2 à 0,1 mbar présentent des variations saisonnières notables.

Le modèle prédit une décroissance des abondances de C_2H_2 et de C_2H_6 avec la latitude. Cette décroissance a été observée par Cassini pour C_2H_2 à 0,1 mbar (figure 4.15, en haut à

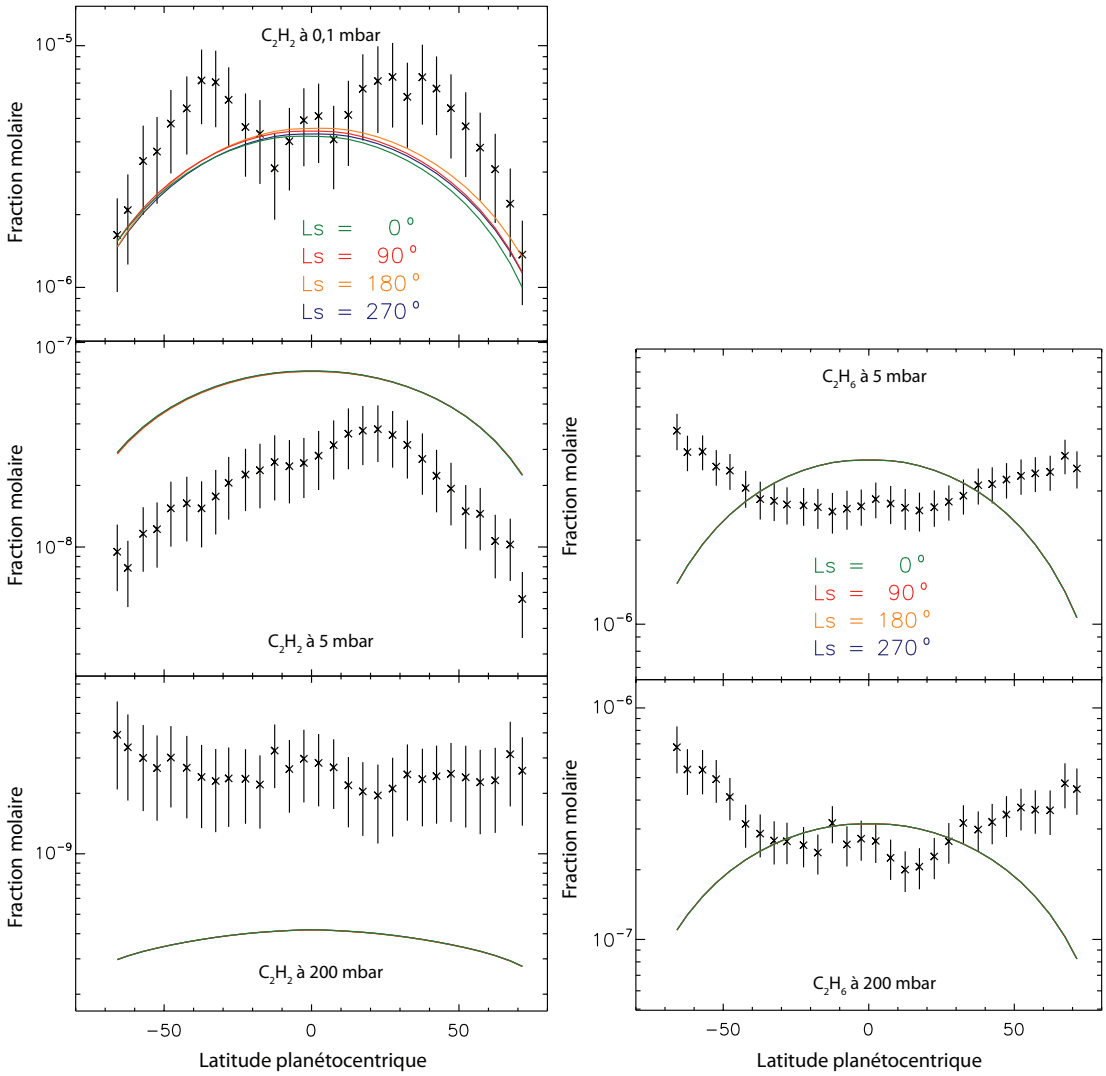

Figure 4.15 – Comparaison entre les profils latitudinaux de C_2H_2 (à gauche) et C_2H_6 (à droite) observés par Cassini/CIRS à 0,1 mbar (en haut), 5 mbar (milieu) et 200 mbar (en bas). Les résultats du modèle saisonnier sont présentés par les lignes en traits pleins aux positions $L_s = 0°$ (vert), $L_s = 90°$ (rouge), $L_s = 180°$ (jaune) et $L_s = 270°$ (bleu). À des pressions supérieures à 5 mbar, les quatre profils saisonniers se superposent. Le survol de Jupiter par Cassini à eu lieu pour $L_s \approx 110°$.

gauche), au-delà de 30°, ainsi qu'à 5 mbar (figure 4.15, au milieu à gauche), de l'équateur au pôle Sud et de 20°N en direction du pôle Nord. Les abondances de C_2H_2 observées décroissent respectivement d'un facteur 3,8 à 0,1 mbar et 2,5 à 5 mbar. Les abondances observées à 200 mbar suggèrent un profil latitudinal d'abondance globalement constant étant données les incertitudes de mesure. À 5 mbar, le modèle sur-estime les abondances de C_2H_2 d'un facteur 2,8 à l'équateur et d'un facteur $\sim$ 3-4 aux hautes latitudes. À 200 mbar, le modèle sous-estime les abondances équatoriales de C_2H_2 d'un facteur 7. Par ailleurs, le modèle ne reproduit pas les maxima locaux dans l'abondance de C_2H_2 aux latitudes moyennes, observés à 0,1 mbar dans les deux hémisphères ainsi qu'à 200 mbar

dans l'hémisphère nord seulement.

Les prédictions du modèle sont en désaccord avec les observations de C_2H_6 à 5 mbar et 200 mbar (figure 4.15 à droite). En effet, les observations suggèrent une augmentation de l'abondance de ce composé avec la latitude. Cette augmentation est plus marquée dans l'hémisphère sud que dans l'hémisphère nord. À l'inverse, le modèle suggère, à l'instar de C_2H_2, une décroissance de l'abondance de ce composé avec la latitude.

Les différences absolues entre le modèle et les observations Cassini ne doivent pas être la principale préoccupation, car :

- le coefficient de diffusion turbulente est faiblement contraint par les observations (voir par exemple la figure 7 de Moses et al. (2005))
- les incertitudes sur les réactions du réseau chimique subsistent, particulièrement pour C_2H_2

Ces deux sources d'incertitude sont susceptibles d'influer sur la valeur des abondances de ces deux composés à un niveau de pression donné, de sorte que les profils latitudinaux d'abondance peuvent être multipliés par un facteur arbitrairement petit. Trouver la gamme de valeurs de ce facteur nécessiterait de calculer, pour l'ensemble des valeurs possibles du coefficient de diffusion turbulente, l'influence des incertitudes de chacune des réactions du réseau chimique nominal dans une procédure de propagation d'erreur Monte-Carlo similaire à celles présentées par Dobrijevic et al. (2011) et Hue et al. (2015a). Les conséquences d'une telle étude peuvent raisonnablement être intuitées, si l'homogénité latitudinale du coefficient de diffusion turbulente reste une hypothèse de départ. En effet, bien que les abondances puissent être rééchelonnées par le facteur obtenu par cette étude, leurs formes latitudinales resteraient en revanche inchangées. Pour la suite de l'étude, nous nous focaliserons principalement sur la reproduction des contrastes latitudinaux de l'abondance des composés.

Liang et al. (2005) tentèrent de reproduire les distributions latitudinales des premières observations de C_2H_2 et C_2H_6 par Cassini sur Jupiter (Kunde et al., 2004) à l'aide d'un modèle photochimique quasi-2D. Ce modèle consiste en une suite de modèles photochimiques à 1D, pour lesquels sont ajoutés des termes de couplage latitudinal à la fin des calculs 1D. Bien que les abondances exactes des composés ne fussent pas connues à ce moment, notre modèle arrive aux mêmes conclusions que Liang et al. (2005) à savoir que le mélange vertical seul n'arrive pas à expliquer les distributions latitudinales de ces composés.

Nous allons donc prendre en compte le mélange latitudinal dans le modèle.

4.3 Phénomènes de mélange dans l'atmosphère de Jupiter

Dans un premier temps, dressons l'état des connaissances actuelles concernant les contraintes sur les phénomènes de mélange dans la stratosphère.

4.3.1 Revue des connaissances actuelles

Les composés injectés dans la stratosphère suite à l'impact de SL9 ont donné la possibilité de mieux contraindre les processus de mélange et de transport stratosphériques. Le tableau 4.2 recense les différentes observations qui menèrent à l'identification de ces processus.

Lellouch et al. (2002) utilisèrent un modèle de diffusion horizontale couplé à une chimie des composés oxygénés simplifiée. À l'aide d'observation peu ou pas résolues spatialement de H_2O, CO_2 et CO, ils conclurent que les observations 3 ans après impact sont reproduites à l'aide d'un coefficient de diffusion turbulent latitudinal $K_{yy} = 2 \times 10^{11}\,\mathrm{cm^2 s^{-1}}$ qui ne varie pas avec la latitude. Leur approche suppose cependant un découplage entre les phénomènes de transport vertical, latitudinal et longitudinal. Moreno et al. (2003) observèrent les évolutions des émissions atmosphériques millimétriques et sub-millimétriques de CO, CS et HCN sur une période de 4 ans après SL9. Ils interprétèrent leurs observations dans le cadre d'un modèle de diffusion à 2D (latitude-longitude) sphérique. Ils négligèrent cependant les phénomènes de transport vertical ainsi que la chimie, en s'appuyant sur les travaux de Moses (1996). Leur modèle suggère un coefficient de diffusion latitudinal de $K_{yy} = 2{,}5 \times 10^{11}\,\mathrm{cm^2 s^{-1}}$ au niveau de pression de 0,2 mbar.

Les observations de HCN dans l'infrarouge effectuées par Griffith et al. (2004) suggèrent plutôt que le coefficient de diffusion K_{yy} à 0,2-0,5 mbar varie avec la latitude. Leurs observations, prises 10 mois et 6 ans après SL9, sont reproduites à l'aide d'un coefficient K_{yy} qui varie comme suivant :

- 90°S-60°S : $K_{yy} = 2\text{-}5 \times 10^{9}\,\mathrm{cm^2 s^{-1}}$
- 60°S-20°S : $K_{yy} = 2\text{-}3 \times 10^{10}\,\mathrm{cm^2 s^{-1}}$
- 20°S-60°N : $K_{yy} = 2\text{-}5 \times 10^{11}\,\mathrm{cm^2 s^{-1}}$
- 60°N-90°N : $K_{yy} = 5 \times 10^{10}\,\mathrm{cm^2 s^{-1}}$

Le coefficient ainsi obtenu entre les latitudes 20°S et 60°N est en accord avec les coefficients précédemment estimés par Lellouch et al. (2002) et Moreno et al. (2003). Notons que Griffith et al. (2004) négligèrent le transport vertical et longitudinal ainsi que le couplage chimique.

Liang et al. (2005) invoquèrent la présence d'un seuil en pression situé à 5-10 mbar au-dessus duquel la valeur du coefficient K_{yy} chute d'un ordre de grandeur par rapport à la valeur de ce coefficient sous ce seuil en pression.

Lellouch et al. (2006) utilisèrent les observations CIRS acquises pendant le survol de Jupiter par Cassini pour obtenir les profils latitudinaux de densité de colonne de HCN et CO_2. Les distributions de HCN et CO_2 présentaient en 2000 des morphologies très différentes. Alors que la distribution de HCN présentait un maximum aux latitudes moyennes, i.e. de 50°S à 30°N, celle de CO_2 piquait au niveau du pôle Sud. Afin d'expliquer ces distributions très différentes, les auteurs passèrent en revue les différents processus susceptibles de contribuer à la production ou la perte chimique de HCN (production via la photolyse de NH_3, chimie ionique, condensation), ainsi que CO_2 (photolyse de H_2O). Ils ne purent arriver à identifier un processus chimique viable afin d'expliquer ces distributions. Il conclurent que ces dernières peuvent être reproduites si l'on suppose que

HCN et CO_2 se situent à deux niveaux de pression différents : 0,5 mbar pour HCN et 5-10 mbar pour CO_2, et durent invoquer une combinaison de mélange diffusif ainsi qu'une cellule de circulation atmosphérique. Nous reviendrons sur ce point plus tard.

Molécules observées	Moyens observationnels	Niveaux de pression	Processus de mélange	Références
H_2O, CO_2 et CO	ISO, SWAS et IRAM-30m	0,5 mbar	$K_{yy} = 2\times\ 10^{11}\,\mathrm{cm^2 s^{-1}}$	Lellouch et al. (2002)
CO, CS et HCN	IRAM-30m et JCMT-15m	0,2 mbar	$K_{yy} = 2{,}5 \times 10^{11}\,\mathrm{cm^2 s^{-1}}$	Moreno et al. (2003)
HCN	IRTF-Irshell	0,2-0,5 mbar	$K_{yy}^{max}(\theta) = 2\text{-}5 \times 10^{11}\,\mathrm{cm^2 s^{-1}}$	Griffith et al. (2004)
HCN, CO_2	Cassini/CIRS	0,2-0,5 mbar	$K_{yy}^{max}(\theta) = 2\text{-}3 \times 10^{11}\,\mathrm{cm^2 s^{-1}}$ + v_y (voir partie 4.3.3)	Lellouch et al. (2006)

Table 4.2 – Contraintes observationnelles sur les phénomènes de mélange et de transport dans l'atmosphère de Jupiter. L'éventuelle dépendance latitudinale de K_{yy} est indiquée et seule la valeur maximale de ce coefficient est donnée.

4.3.2 Diffusion latitudinale

Nous présentons les résultats de notre modèle avec un coefficient de diffusion turbulente latitudinale. Nous partons de l'état stationnaire saisonnier du modèle, c'est à dire lorsque les différences dans les abondances d'une orbite à l'autre sont inférieures à 5% à toutes les latitudes. L'ajout du K_{yy} va écarter le modèle de cet état stationnaire saisonnier et plusieurs orbites supplémentaires seront alors nécessaires afin d'atteindre le nouvel état stationnaire. Suivant l'importance du K_{yy}, entre 15 et 20 orbites sont nécessaires.

Plusieurs K_{yy} ont été utilisés ici. La figure 4.16 présente les coefficients K_{yy}, K_{zz} ainsi que le coefficient de diffusion moléculaire du méthane. Nous n'étudierons pas ici la dépendance latitudinale de ces coefficients. De par l'absence de contraintes observationnelles, la dépendance verticale du K_{yy} sera extrapolée suivant le K_{zz}. En effet, le K_{yy} sera pris égal au K_{zz} et multiplié par un facteur permettant de reproduire les valeurs de K_{yy} suggérées par la littérature. Les coefficients K_{yy} sont définis de la manière suivante :

- $K_{yy}^{(1)}(\mathrm{p}) = 10^5 \times K_{zz}(\mathrm{p})$
- $K_{yy}^{(2)}(\mathrm{p}) = 5 \times 10^5 \times K_{zz}(\mathrm{p})$
- $K_{yy}^{(3)}(\mathrm{p}) = 10^6 \times K_{zz}(\mathrm{p})$
- $K_{yy}^{(Liang)}(\mathrm{p}) = 2 \times 10^{10}\ \mathrm{cm^2\,s^{-1}}$ pour $\mathrm{p} \geq 5\,\mathrm{mbar}$
  $= 2 \times 10^{9}\ \mathrm{cm^2\,s^{-1}}$ pour $\mathrm{p} < 5\,\mathrm{mbar}$
- $K_{yy}^{(Lellouch1)}(\mathrm{p}) = 2 \times 10^{11}\ \mathrm{cm^2\,s^{-1}}$ à $\mathrm{p} = 0{,}3\,\mathrm{mbar}$
  $\propto K_{zz}$ pour $\mathrm{p} \neq 0{,}3\,\mathrm{mbar}$
- $K_{yy}^{(Lellouch2)} = 2 \times 10^{11}\ \mathrm{cm^2\,s^{-1}}$

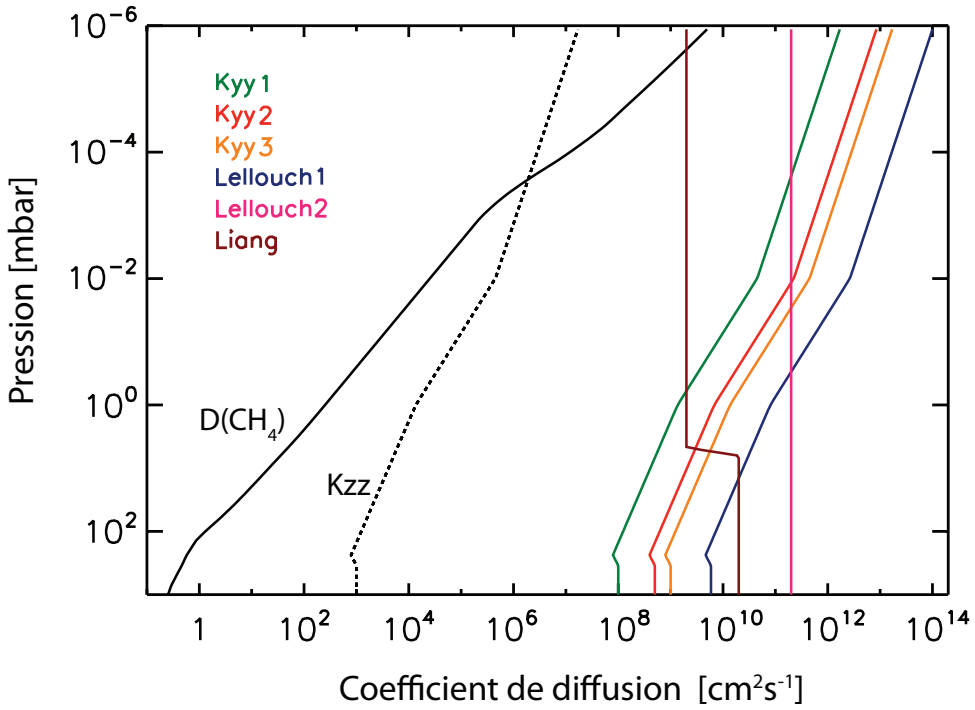

Figure 4.16 – Coefficients de diffusion utilisés dans le modèle photochimique saisonnier. Les coefficients de diffusion turbulente verticale et moléculaire sont présentés en pointillés et traits noirs, respectivement. Les différents coefficients de diffusion latitudinale sont représentés en traits pleins de couleurs. (Voir le texte concernant les détails sur les coefficients de diffusion latitudinale.)

La figure 4.17 présente les profils latitudinaux de C_2H_2 (à gauche) et C_2H_6 (à droite) aux niveaux de pression sondés par Cassini/CIRS et calculés en ajoutant les coefficients K_{yy} présentés plus haut. Nous présentons les sorties du modèle photochimique pour $L_s = 90°$, i.e. les plus proches temporellement du survol ($L_s \approx 100°$) étant donnée la discrétisation orbitale utilisée dans cette partie (4 points orbitaux).

L'ajout du K_{yy} homogénéise les distributions latitudinales de C_2H_2 et C_2H_6 en lissant les gradients latitudinaux. Le profil latitudinal de C_2H_6 à 5 mbar (figure 4.17 au milieu à droite) est mieux reproduit aux latitudes moyennes à l'aide d'un coefficient $K_{yy}(5\,\mathrm{mbar})$

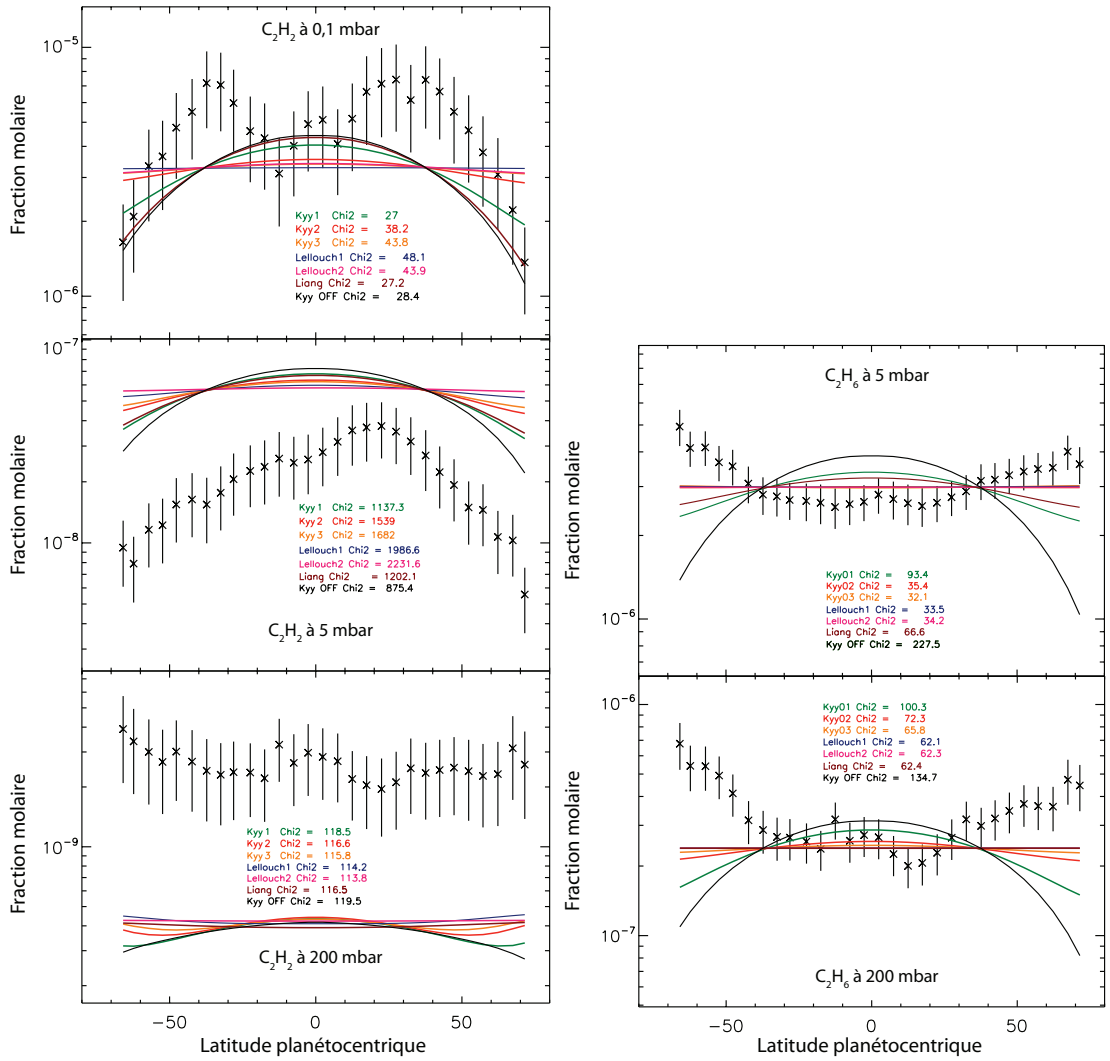

Figure 4.17 – Comparaison entre les profils latitudinaux de C_2H_2 (à gauche) et C_2H_6 (à droite) observés par Cassini/CIRS à 0,1 mbar (en haut), 5 mbar (milieu) et 200 mbar (en bas). Les sorties du modèle sont prises à $L_s = 90°$.

$\sim 3 \times 10^9$ cm^2 s^{-1}. À 200 mbar (figure 4.17 en bas à gauche), le profil observé de C_2H_6 est mieux reproduit à l'aide d'un coefficient $K_{yy}(200\,\text{mbar}) \sim 6 \times 10^9$ cm^2 s^{-1}. En revanche, l'augmentation de l'abondance de C_2H_6 à partir de 30° en direction des pôles n'est pas reproduite par le modèle. Nous reviendrons sur ce point après avoir discuté des résultats concernant C_2H_2.

Les temps caractéristiques d'évolution chimique de C_2H_2 sont plus courts que ceux de C_2H_6. Un K_{yy} plus important est nécessaire pour obtenir un lissage des gradients latitudinaux d'abondance de C_2H_2 similaire à C_2H_6. À 200 mbar par exemple, alors que la distribution latitudinale d'abondance de C_2H_6 présentait un gradient nul avec le coefficient $K_{yy}^{(2)}$, la distribution de C_2H_2 nécessite un coefficient K_{yy} de plus de deux ordres de grandeur plus élevé pour présenter un gradient nul.

Bien que les pics d'abondance dans les distributions de C_2H_2 à $\pm$ 30° au niveau de pression de 0,1 mbar ainsi qu'à 20°N à 5 mbar ne sont pas reproduits, les observations suggèrent néanmoins un K_{yy} relativement faible. En effet, à 0,1 mbar, C_2H_2 est mieux reproduit à l'aide d'un $K_{yy}(0{,}1\,\text{mbar}) < 10^{10}$ cm^2 s^{-1}. Les distributions à 0,1 mbar sont mieux reproduites à l'aide des coefficients $K_{yy}^{(1)}$, $K_{yy}^{(\text{Liang})}$ et sans mélange latitudinal. De même, à 5 mbar, C_2H_2 est mieux reproduit à l'aide de ces mêmes coefficients, suggérant un $K_{yy}(5\,\text{mbar}) < 2 \times 10^9$ cm^2 s^{-1}. À 200 mbar, les observations de C_2H_2 suggèrent une distribution ayant un gradient latitudinal très faible. Étant donné le faible gradient du modèle sans diffusion latitudinale ainsi que des barres d'erreur observationnelles, il est difficile de conclure pour C_2H_2 à ce dernier niveau de pression.

Niveau de pression	Coefficient K_{yy}
0,1 mbar	$K_{yy}(C_2H_2) \lesssim 10^{10}$ cm^2 s^{-1}
5 mbar	$K_{yy}(C_2H_2) \lesssim 2 \times 10^9$ cm^2 s^{-1}
	$K_{yy}(C_2H_6) \sim 3 \times 10^9$ cm^2 s^{-1}
200 mbar	$K_{yy}(C_2H_6) \sim 6 \times 10^9$ cm^2 s^{-1}

Table 4.3 – Tableau récapitulatif des contraintes sur les valeurs des coefficients de diffusion turbulente latitudinale K_{yy} par comparaison aux observations de C_2H_2 et C_2H_6 de Cassini/CIRS (Nixon et al., 2010). Les contraintes sont données par molécule.

Nous pouvons noter qu'à 200 mbar pour C_2H_2, les abondances prédites par le modèle augmentent en direction des pôles aux hautes latitudes dans les deux hémisphères. Il y a en effet ici un couplage intéressant entre le transfert radiatif UV, le transport vertical et le transport latitudinal. La figure 4.18 représente le facteur d'augmentation [2] du flux actinique à 151 nm. À cette longueur d'onde, les sections efficaces d'absorption de C_2H_2 sont importantes par rapport aux autres molécules absorbantes, et la photolyse de cette molécule n'est pas écrantée par d'autres composés atmosphériques comme le méthane à plus faible longueur d'onde. L'ajout d'un K_{yy} important dans la haute atmosphère va homogénéiser la distribution de C_2H_2 dans cette région. Ces abondances, qui sont alors plus importantes aux hautes latitudes que par rapport à un cas sans mélange latitudinal, vont servir d'écran par rapport aux molécules de C_2H_2 situées plus bas dans l'atmosphère et dont la principale perte s'effectue via photolyse (voir figure 4.11). Ainsi, plus K_{yy} est important dans la stratosphère (à $\sim 10^{-2}$ mbar) et plus le rayonnement UV à 151 nm est stoppé haut dans l'atmosphère. Par ailleurs, bien que les photons à 151 nm s'arrêtent plus haut dans l'atmosphère dans le cas $K_{yy}^{(\text{Lellouch1})}$ que dans le cas $K_{yy}^{(1)}$, le premier cas ne présente pas d'augmentation de l'abondance de C_2H_2 en direction des pôles alors que

2. rapport entre le flux actinique à une altitude donnée et celui de la plus haute couche atmosphérique

le second cas la présente. Ceci est causée par le $K_{yy}^{(\text{Lellouch1})}$ plus important que le $K_{yy}^{(1)}$ à 100 mbar.

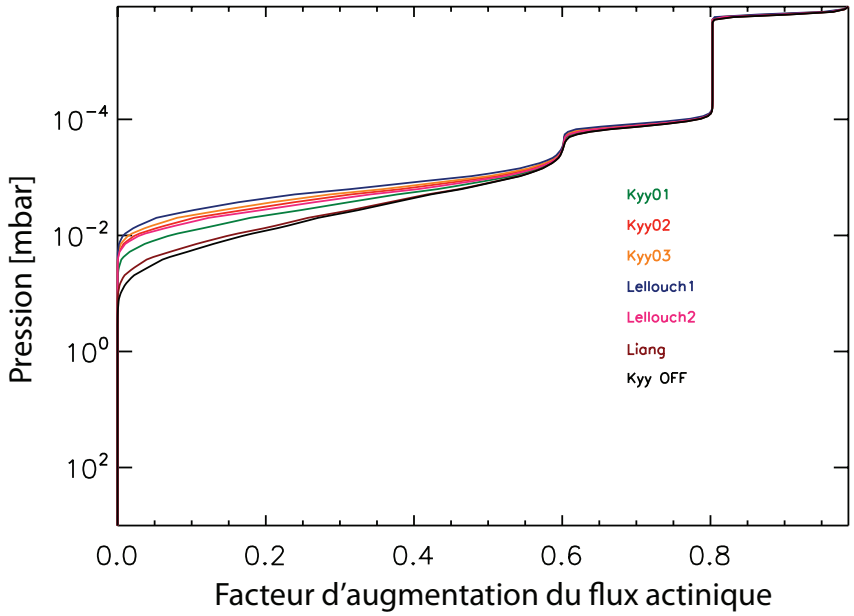

Figure 4.18 – Facteur d'augmentation du flux actinique à 151 nm et 80°N pour les différents K_{yy} utilisés ici. La forme en échelle de ce facteur dans la haute atmosphère est causée par la moyenne diurne utilisée.

4.3.3 Discussions

Nous voyons que l'ajout du K_{yy} va généralement homogénéiser la distribution latitudinale des composés chimiques. Dans le cas du C_2H_6, nous ne voyons pas comment l'ajout d'un coefficient de diffusion latitudinal variable avec la latitude (tel que précédemment utilisé par Griffith et al. (2004) et Lellouch et al. (2006)) peut permettre de produire une augmentation de l'abondance de C_2H_6 avec la latitude. Plusieurs scénarios pourraient produire une telle augmentation :

1. la production chimique localisée de C_2H_6 dans les zones aurorales
2. une cellule de circulation affectant les distributions de C_2H_6 de façon localisée
3. une combinaison de coefficient de diffusion K_{zz} ayant une dépendance latitudinale avec des coefficients de diffusion K_{yy} ayant des dépendances verticales et latitudinales
4. un effet d'auto-écrantage couplé avec de la diffusion latitudinale similaire à celui prédit pour C_2H_2 à 200 mbar (figure 4.17, en bas à gauche)

Nous exclurons le scénario 3 car il dépend de trop nombreux paramètres faiblement contraints par les observations. Le scénario 4 ne semble pas non plus réaliste car la chimie

de C_2H_6 est relativement bien connue, de sorte qu'un tel effet ne semble pas possible. Par ailleurs, si un tel effet était à l'œuvre, il serait très potentiellement visible sur les distributions observées de C_2H_2. Les deux possibilités les plus probables sont la production chimique de C_2H_6 localisée dans les zones aurorales et la présence d'une cellule de circulation stratosphérique. Analysons chacune de ces deux possibilités.

Chimie ion-neutre ?

Notre modèle ne prend pas en compte les termes de production et de perte chimiques des espèces neutres qui réagissent avec les espèces ionisées. Ces termes sont principalement causés par (i) les photo-ionisations par les rayonnements extrêmes UV (EUV) de la haute atmosphère (ii) les impacts de particules énergétiques précipitant dans la haute atmosphère, tels que les électrons énergétiques ou les particules chargées plus lourdes, (iii) les réactions chimiques ions-neutres.

Au-dessus de l'homopause du méthane, dans la très haute stratosphère, la séparation diffusive des composés chimiques provoque une chute de l'abondance du méthane ainsi que des composés chimiques produits par sa photolyse. Dans cette région de l'atmosphère, H_2, He et H sont les seules espèces chimiques neutres encore présentes. Les particules chargées ainsi que les photons EUV vont ioniser ces espèces chimiques. Dans la très haute ionosphère, le principal ion produit est H_2^+ par photo-ionisation ainsi que par impact électronique, suivie de H^+ et He^+ via photo-ionisation (Kim and Fox, 1994). H_2^+ est ensuite rapidement converti en H_3^+ via la réaction :

$$H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H \tag{4.1}$$

Plus bas dans l'ionosphère, lorsque les abondances des espèces chimiques carbonées augmentent à l'approche de l'homopause, les photo-ionisations de CH_4, CH_3, C_2H_2, C_2H_4 et C_2H_6 génèrent de nombreux ions. Kim and Fox (1994) montrèrent que les réactions ions-neutres ainsi que les recombinaisons dissociatives mènent à la production d'une couche d'ions stables autour de l'homopause de méthane. Kim et al. couplèrent un réseau chimique des neutres adapté et simplifié de Gladstone et al. (1996) en y ajoutant des réactions ions-neutres basées sur des travaux antérieurs (voir les références dans Kim and Fox (1994)), avec un modèle de la haute ionosphère, ne comprenant que les espèces non carbonées. À l'aide de leur modèle, ils montrèrent que :

- les principaux ions produits dans cette couche ionique sont CH_5^+, $C_2H_3^+$, CH_3^+ et $C_2H_5^+$
- la réactivité des hydrocarbures saturés (CH_4 et C_2H_6) avec les ions hydrocarbures saturés ou presque saturés ($C_2H_4^+$, $C_2H_5^+$ et $C_2H_6^+$) est faible
- C_2H_2 réagit fortement avec les ions hydrocarbures saturés ou insaturés
- CH_3 et CH_4 sont les principaux sous-produits des réactions entre les C_2H_x (excepté C_2H_2) et les ions hydrocarbures
- les réactions ions-neutres forment des hydrocarbures de plus en plus complexes

À l'heure actuelle, H_3^+ est le seul ion détecté parmi l'ensemble des ions prédits. Drossart et al. (1999) identifièrent initialement les émissions de H_3^+ dans le spectre infrarouge à $2\,\mu$m de Jupiter observé par le Canada-France-Hawaii-Telescope. Trafton et al. (1989) observèrent ces mêmes raies d'émission de façon indépendante, sans pouvoir les identifier. Bien que les émissions des hydrocarbures neutres proches de l'homopause du méthane ont été détectées dans l'UV (Dols et al., 2000), il n'existe en revanche pas de contraintes observationnelles sur la présence des molécules prédites par les modèles ions-neutres (Yelle and Miller, 2004).

Perry et al. (1999) développèrent un modèle ionosphérique-stratosphérique de Jupiter en utilisant les réactions neutres-neutres et ions-neutres basées sur les travaux de Kim and Fox (1994). Perry et al. couplèrent leur modèle avec un modèle de transport d'électrons afin de simuler les précipitations d'électrons énergétiques dans les zones aurorales. Leurs résultats sont en accord avec ceux de Kim and Fox (1994) pour les latitudes moyennes et prédisent des densités d'ions un ordre de grandeur supérieur pour les régions aurorales. Par la suite, Wong et al. (2000, 2003) basèrent leur modèle sur les travaux de Kim and Fox (1994) et Perry et al. (1999) en incluant la formation d'hydrocarbures complexes ainsi que de composés carbonés aromatiques, et ceci afin d'expliquer la formation d'aérosols dans les zones aurorales. Il convient toutefois de rappeler que beaucoup des réactions ions-neutres initialement supposées par Kim and Fox (1994) ont très peu de contraintes expérimentales. Ceci suggère qu'une étude de propagation d'incertitude serait utile pour déterminer les limites de ces modèles.

La production de C_2H_6 est principalement initiée par les réactions méthyle-méthyle (CH_3). Une production différentielle du méthyle entre les régions aurorales et les régions à plus faibles latitudes pourraient ainsi expliquer une production plus importante de C_2H_6 aux hautes latitudes. Kim and Fox (1994) prédirent que CH_3 et CH_4 sont les principaux sous-produits des réactions entre les C_2H_x (excepté C_2H_2) et les ions hydrocarbures. De plus, ils prédirent que la réactivité des hydrocarbures saturés (CH_4 et C_2H_6) est faible avec les ions hydrocarbures saturés ou presque saturés. Un processus possible d'enrichissement en C_2H_6 dans les régions aurorales pourrait être fourni par la production de CH_3 via les réactions entre les hydrocarbures neutres insaturés et les ions hydrocarbures. Rappelons que la tendance observée de C_2H_6 dans les régions aurorales ne l'est pas pour C_2H_2. Or, si les molécules CH_3 et CH_4 sont produites via les réactions chimiques ions-neutres, l'éventuelle augmentation de C_2H_6 pourrait aller de pair avec celle de C_2H_2. Kim and Fox (1994) suggérèrent qu'une partie du C_2H_2 est consommée via des réactions chimiques avec des ions hydrocarbures saturés ou insaturés. La chimie des ions est donc un candidat potentiel bien que faiblement contraint pour expliquer cet enrichissement et seul un calcul photochimique couplant la chimie des neutres avec celles des ions permettra de conclure.

Cellule de circulation ?

Les écarts entre les prédictions des modèles photochimiques et les observations pourraient être provoquées par la présence de cellules de circulation (Moses and Greathouse,

2005; Guerlet et al., 2009; Hue et al., 2015a). Notre modèle permet de prendre en compte l'advection causée par une cellule de circulation. À la différence des GCM qui prédisent une telle circulation, celle-ci doit être paramétrisée en tant qu'entrée du modèle.

Lellouch et al. (2006) conclurent que les distributions observées de HCN et CO_2 se situent à deux niveaux de pression différents : 0,5 mbar pour HCN et 5-10 mbar pour CO_2. Ils furent ainsi capable de reproduire les observations de Cassini/CIRS en invoquant des vents de 7-9 $\mathrm{cm\,s^{-1}}$ en direction de l'équateur à $\pm$ 45° de latitude au niveau de pression de 0,5 mbar, et des vents de 30 $\mathrm{cm\,s^{-1}}$ à $\pm$ 45° de latitude en direction des pôles et au niveau de pression de 5-10 mbar. De plus, Lellouch et al. supposèrent un coefficient de diffusion K_{yy} qui atteint les valeurs maximales de 2-3 $\times$ 10^{11} $\mathrm{cm^2 s^{-1}}$ dans les régions équatoriales.

Ces deux champs de vents de directions opposées pourraient faire partie d'une cellule de circulation stratosphérique qui comprend des mouvements ascendants aux pôles et descendant à l'équateur. Ces prédictions sont cohérentes avec la cellule de circulation stratosphérique prédite par West et al. (1992) (voir leur figure 7c). Ce sont à l'heure actuelle les seules contraintes de circulation proposées dans la littérature. Notons par ailleurs que Moreno and Sedano (1997) prédisent une circulation différente de celle de West et al. (1992) à des pressions inférieures à $\sim$50 mbar, avec des mouvements ascendants à faibles latitudes et descendants aux niveaux des pôles.

La circulation stratosphérique semble être un candidat potentielle pour expliquer la tendance observée de C_2H_6. De par les couplages entre la chimie, le transport vertical et le diffusion horizontale, il semble difficile de prédire la forme de cette circulation sans calculs numériques plus poussés. Nous présentons des calculs préliminaires concernant l'ajout de cellules de circulation dans le chapitre 5.

4.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté un modèle photochimique saisonnier de Jupiter à 2D (altitude-latitude). Nous avons montré que le réseau réduit dans les conditions physico-chimiques de la stratosphère de Saturne reste valide pour l'étude de la stratosphère de Jupiter. Dans un premier temps, nous avons présenté les effets saisonniers de Jupiter sur sa photochimie en l'absence de processus de transport et de mélange latitudinal. Les principaux résultats de notre étude sont les suivants :

• À cause de la faible obliquité de Jupiter, les taux de production et de perte des hydrocarbures présentent une variabilité plus faible à haute latitude que sur Saturne. Ces principaux taux de production et de perte dans la région équatoriale sont contrôlés par les mêmes réactions chimiques que sur Saturne.

• L'évolution des densités de colonne des espèces chimiques au-dessus de 10^{-2} mbar est principalement contrôlée par l'excentricité de l'orbite de Jupiter. Ces densités de colonne restent maximales au niveau de l'équateur durant la totalité de l'orbite. Elles sont modulées par la distance héliocentrique et présentent donc un maximum peu de temps après le passage de Jupiter au périhélie.

• Les variations saisonnières des abondances chimiques des hydrocarbures à 10^{-4} mbar sont plus d'un ordre de grandeur plus faibles que dans le cas de Saturne. À 10^{-2} mbar, ces variations saisonnières sont toujours plus faibles d'un facteur 2 par rapport au cas de Saturne.

• Du fait de l'obliquité de 3° de Jupiter, les calculs photochimiques saisonniers diffèrent peu des calculs photochimiques stationnaires, pour des conditions d'ensoleillement à l'équinoxe. Les principales différences entre les calculs saisonniers et les calculs stationnaires se situent aux hautes latitudes, au-delà de 70°. Les différences maximales atteignent respectivement 83% pour C_2H_2 et 35% pour C_2H_6.

Le survol de Jupiter par la sonde Cassini a fourni des contraintes sur les abondances de C_2H_2 et de C_2H_6 grâce à l'instrument CIRS (Nixon et al., 2007, 2010). Les distributions de ces composés présentent des tendances très différentes. Alors que C_2H_2 décroit globalement en direction des pôles, C_2H_6 suit la tendance opposée et croit en direction des pôles. En l'absence de processus de mélange latitudinal, les contrastes des distributions d'abondance de C_2H_2 à 0,1 mbar et 5 mbar sont bien reproduits, à l'exception des pics d'abondance à ± 30° à 0,1 mbar ainsi que 20°N à 5 mbar. Les tendances prédites sur les profils de C_2H_6 sont en contradictions avec les observations. Le modèle prédit une décroissance de l'abondance de C_2H_6 en direction des pôles, alors que les observations suggèrent une tendance opposée. Les modèles photochimiques ne peuvent pas expliquer les variations latitudinales de C_2H_6 observées par CIRS.

Cette conclusion fut précédemment tirée par Liang et al. (2005) dans le cadre d'un modèle photochimique quasi-2D ainsi que par Lellouch et al. (2006) dans le cadre d'un modèle d'advection-diffusion latitudinale en présence de termes de perte photochimique paramétrisés. La présence de diffusion latitudinale fut proposée dans ces deux travaux afin d'expliquer les profils observées de C_2H_6.

Nous avons inclus les profils de diffusion turbulente latitudinale K_{yy} proposés par Liang et al. (2005) et Lellouch et al. (2006) ainsi que plusieurs autres profils de K_{yy} basés sur le coefficient de diffusion turbulente verticale. Alors que l'ajout de K_{yy} n'améliore pas sensiblement la reproduction de C_2H_2 à 0,1 mbar, elle creuse même les écarts dans la reproduction de ce profil à 5 mbar. En revanche, l'ajout de K_{yy} améliore significativement la reproduction du profil de C_2H_6 à 5 mbar et 200 mbar. Les distributions latitudinales de C_2H_6 sont mieux reproduites à l'aide d'un coefficient de diffusion latitudinale $K_{yy}(5\,\mathrm{mbar}) \sim 3 \times 10^9$ cm^2 s^{-1} ainsi que $K_{yy}(200\,\mathrm{mbar}) \sim 6 \times 10^9$ cm^2 s^{-1}. Les distributions latitudinales de C_2H_2 sont mieux reproduites à l'aide d'un coefficient de diffusion latitudinale $K_{yy}(0{,}1\,\mathrm{mbar}) < 10^{10}$ cm^2 s^{-1} et $K_{yy}(5\,\mathrm{mbar}) < 2 \times 10^9$ cm^2 s^{-1}.

Bien que la reproduction des observations de C_2H_6 soit améliorée en ajoutant des processus de mélange latitudinaux, l'augmentation de son abondance en direction des pôles n'est pas reproduite par le modèle. Les deux principaux processus qui pourraient expliquer cette tendance sont (i) la chimie dans les zones aurorales (ii) la présence d'une cellule de circulation stratosphérique affectant les abondances chimiques. Ces deux scénarios complexes seront pris en compte dans la continuité de ce travail.

Chapitre 5

Perspectives et travaux futurs

Sommaire

5.1 Jupiter 178
5.1.1 Introduction 178
5.1.2 Définition de la carte des vents 179
5.1.3 Circulation stratosphérique jovienne 181
5.1.4 Discussion 186
5.2 Saturne 188

Nous présentons tout d'abord dans ce chapitre les perspectives du modèle photochimique saisonnier de Jupiter présenté dans le chapitre 4. Dans un second temps, nous aborderons brièvement les futurs axes de développement du modèle de Saturne présenté dans le chapitre 2

5.1 Jupiter

Nous présentons ici les résultats préliminaires de l'ajout d'une circulation stratosphérique dans le modèle photochimique saisonnier de Jupiter présenté dans le chapitre 4, ainsi que les axes de recherche futurs pour le développement de ce modèle.

5.1.1 Introduction

Le modèle photochimique présenté au chapitre 1 inclut la possibilité de prendre en compte une circulation stratosphérique. Cette circulation paramétrisée doit répondre au critère suivant :

$$div\,(n\mathbf{v}) = \mathbf{0} \tag{5.1}$$

En effet, si la divergence du flux de matière est non-nulle, la circulation associée n'est plus stationnaire. Deux méthodes sont possibles afin de créer un tel champ de divergence nulle :

- définition d'un champ de vent via une fonction de courant
- utilisation d'un champ de vent produit par un GCM

La fonction de courant, que l'on notera A, est une quantité qui caractérise l'écoulement d'un flot. Les lignes de courant se situent sur les équi-potentielles de cette fonction. Le flux de matière est alors calculé par :

$$n\mathbf{v} = \mathbf{rot}(\mathbf{A}) \tag{5.2}$$

La quantité $n\mathbf{v}$ dérive d'un rotationel et permet donc de satisfaire l'équation 5.1. Une autre méthode fut proposée par Lebonnois et al. (2001) dans le cadre d'un modèle photochimique à 2D de l'atmosphère de Titan. Ceux-ci se basèrent sur les résultats du GCM de Titan de Hourdin et al. (1995). Lebonnois et al. prirent les valeurs maximales du vent vertical prédites par le GCM de Titan qu'ils modulèrent par une sinusoïde afin de simuler une cellule de circulation stratosphérique. La composante horizontale du vent fut alors obtenue en satisfaisant l'équation 5.1.

Nous avons dans un premier temps testé la méthode proposée par Lebonnois et al. (2001). En l'absence de contraintes apportées par un GCM, nous avons supposé la cellule

de circulation proposée par Lellouch et al. (2006). Ne pouvant arriver à un flux de matière de divergence totalement nulle à cause de problèmes numériques, nous avons finalement opté pour la méthode des fonctions de courant.

Nous présentons maintenant les résultats préliminaires à l'ajout d'un champ de vent dans le modèle de Jupiter présenté dans le chapitre 4 et qui inclut déjà de la diffusion latitudinale.

5.1.2 Définition de la carte des vents

Nous présentons dans un premier temps la carte de vent utilisé dans un cas simple. Nous expliquons ensuite la méthodologie utilisée pour inclure cette carte dans le modèle. Enfin nous présentons comment ces vents peuvent améliorer la reproduction des observations effectuées par Cassini/CIRS.

La fonction de courant utilisée ici est inspirée des travaux de Lellouch et al. (2006). Ceux-ci supposèrent une variation sinusoïdale de l'amplitude des vents latitudinaux, avec des vents maximaux à $\pm$ 45° de latitude et nuls à l'équateur et aux pôles (voir la figure 7 de Lellouch et al. (2006)). Dans l'hémisphère sud à 45° de latitude, ils supposèrent des vents de 7-9 $\mathrm{cm\,s^{-1}}$ à $\sim$ 0,5 mbar en direction de l'équateur, et des vents de 30 $\mathrm{cm\,s^{-1}}$ en direction des pôles à $\sim$ 5-10 mbar. Dans ce qui suit, les vitesses positives dénotent des vents dirigés vers le pôle Sud. Ces deux bandes de vent pourraient faire partie d'une cellule de circulation avec des mouvements ascendants aux pôles et descendants à l'équateur et seraient cohérents avec les prédictions de West et al. (1992). Nous supposerons que les vents latitudinaux de la cellule proposée par Lellouch et al. atteignent des vitesses maximales de 30 $\mathrm{cm\,s^{-1}}$ à 45°S au niveau de pression de 5 mbar et des vitesses de -7 $\mathrm{cm\,s^{-1}}$ à 45°S au niveau de pression de 0,5 mbar. Une telle cellule implique une inversion dans la direction des vents entre ces deux niveaux de pression. Supposons une variation sinusoïdale de l'amplitude de ce vent en fonction de l'altitude. La variation verticale de ce vent est présentée sur la figure 5.1.

Notons que la composante latitudinale de ce vent s'inverse au niveau de pression de p = 0,67 mbar. Nous avons construit une fonction de courant qui s'inspire de cette cellule de circulation. Nous avons supposé que la composante latitudinale des vents s'inverse à $p \approx 0{,}6$ mbar et que les vents deviennent nuls à $p < 10^{-2}$ mbar et $p > 30$ mbar. La fonction de courant A sera construite en multipliant une fonction de forme B par la concentration atmosphérique n, telle que $A = n\,B$. Nous présentons la fonction de courant A et la fonction de forme B sur la figure 5.2.

À l'aide de cette fonction de courant, les composantes latitudinales et radiales du vent sont calculées via l'équation 5.2. Ces deux composantes sont présentées sur la figure 5.3. L'amplitude de ces vents a été renormalisée par la valeur maximale du vent latitudinal, qui produit ainsi des vents maximaux arbitraires de 1 $\mathrm{cm\,s^{-1}}$. Notons la différence dans l'amplitude des vents latitudinaux et radiaux nécessaires afin d'assurer la condition de divergence nulle du flux de matière. Les vents radiaux sont 3 ordres de grandeurs plus

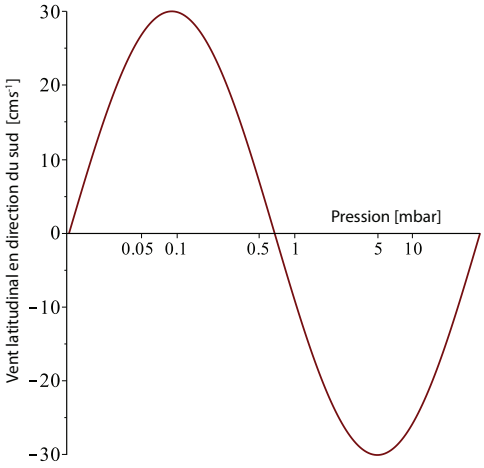

Figure 5.1 – Variation verticale de la composante latitudinale du vent à 45°N proposée par Lellouch et al. (2006). Une évolution sinusoïdale de l'amplitude du vent est supposée, de valeur maximale 30 cm s^{-1}. Les limites en pression de cette cellule sont 37 mbar au niveau inférieur et $1{,}2 \times 10^{-2}$ mbar au niveau supérieur.

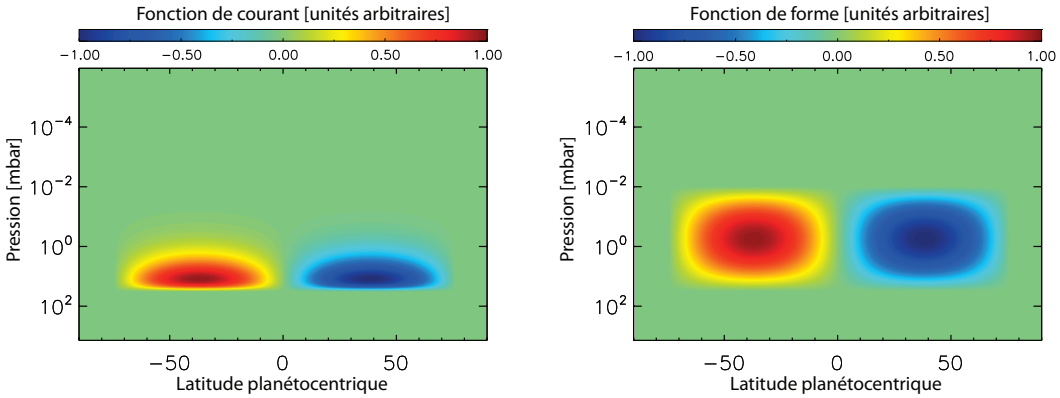

Figure 5.2 – Représentation de la fonction de courant (à gauche) et de la fonction de forme (à droite) considérées dans cette partie.

faibles que les vents latitudinaux. La forme du vent latitudinal est déformée par rapport à la figure 5.1 car la fonction de forme a été multipliée par le profil de densité.

La définition du champ de vent par une fonction de courant impose des contraintes sur la forme de celui-ci. En effet, la divergence nulle du flux de matière nécessite d'être assurée afin d'obtenir un écoulement stationnaire. Cela signifie que le rotationnel de la fonction de courant sera toujours divisé par le profil de concentration afin d'obtenir le champ de vent (équation 5.2). Ce profil de concentration varie sur plusieurs ordres de grandeur sur le domaine considéré. Afin d'éviter au maximum la déformation du champ de vent, nous avons choisi d'introduire une fonction de forme à laquelle sera multipliée le profil de concentration, avant le calcul du rotationnel. Ceci a été effectué afin de s'affranchir au maximum de la modulation du champ de vent par le profil de concentration. Cette démarche ne permet pas de complètement reproduire la cellule de circulation proposée

par Lellouch et al. (2006) et présentée sur la figure 5.1. Elle permet cependant de tester le sens de circulation de cette cellule ainsi que de l'intensité du vent en la renormalisant a posteriori.

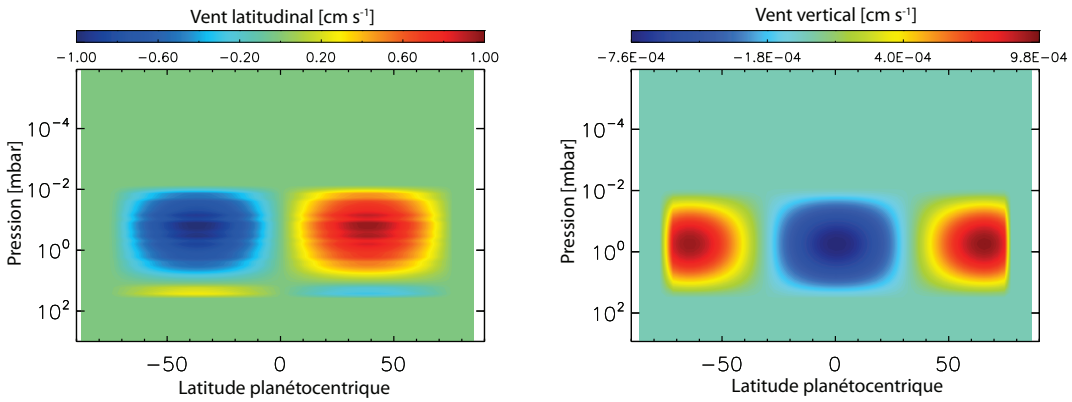

Figure 5.3 – Carte de vent latitudinal (à gauche) et vertical (à droite). Le champ de vent a été renormalisé afin d'avoir des vents latitudinaux maximums de $1\,\mathrm{cm\,s^{-1}}$. Les valeurs positives des vents latitudinaux correspondent à des vents dirigés vers le Sud. Les valeurs positives des vents verticaux correspondent à des mouvements ascendants.

Cette carte des vents a été testée dans un cas d'étude simple. Nous avons modélisé l'évolution d'une distribution fictive de matière en l'absence des termes de production et de perte chimiques ainsi qu'en l'absence des processus de mélange verticaux (diffusion moléculaire et diffusion turbulente) et latitudinaux (diffusion turbulente latitudinale). La figure 5.4 représente l'évolution temporelle de la déformation de la distribution d'un traceur causée par la carte de vent présentée sur la figure 5.3. La distribution fictive initiale de ce traceur est présentée sur la figure 5.4a. Cette distribution initiale est ensuite déformée par le champ de vent. La simulation présentée ici comporte 60 cellules en latitudes et 126 niveaux de pression.

Nous avons par ailleurs exécuté notre modèle avec la même carte de vent, mais à partir d'une distribution uniforme de traceur, ceci afin de vérifier que la carte de vent définie ne produit pas de gradient dans la distribution initiale. La création spontanée de gradient dans cette distribution traduirait la divergence non-nulle du flux de matière. La divergence du flux de matière est bien nulle aux erreurs numériques près.

Nous présentons maintenant l'ajout de cette carte de vent dans le modèle photochimique de Jupiter qui inclut l'ensemble des processus physico-chimiques présentés dans le chapitre 4.

5.1.3 Circulation stratosphérique jovienne

La méthodologie suivie pour l'ajout de la carte de vent est la suivante :

1. calcul saisonnier avec $K_{yy} = 0$ jusqu'à convergence orbitale du modèle

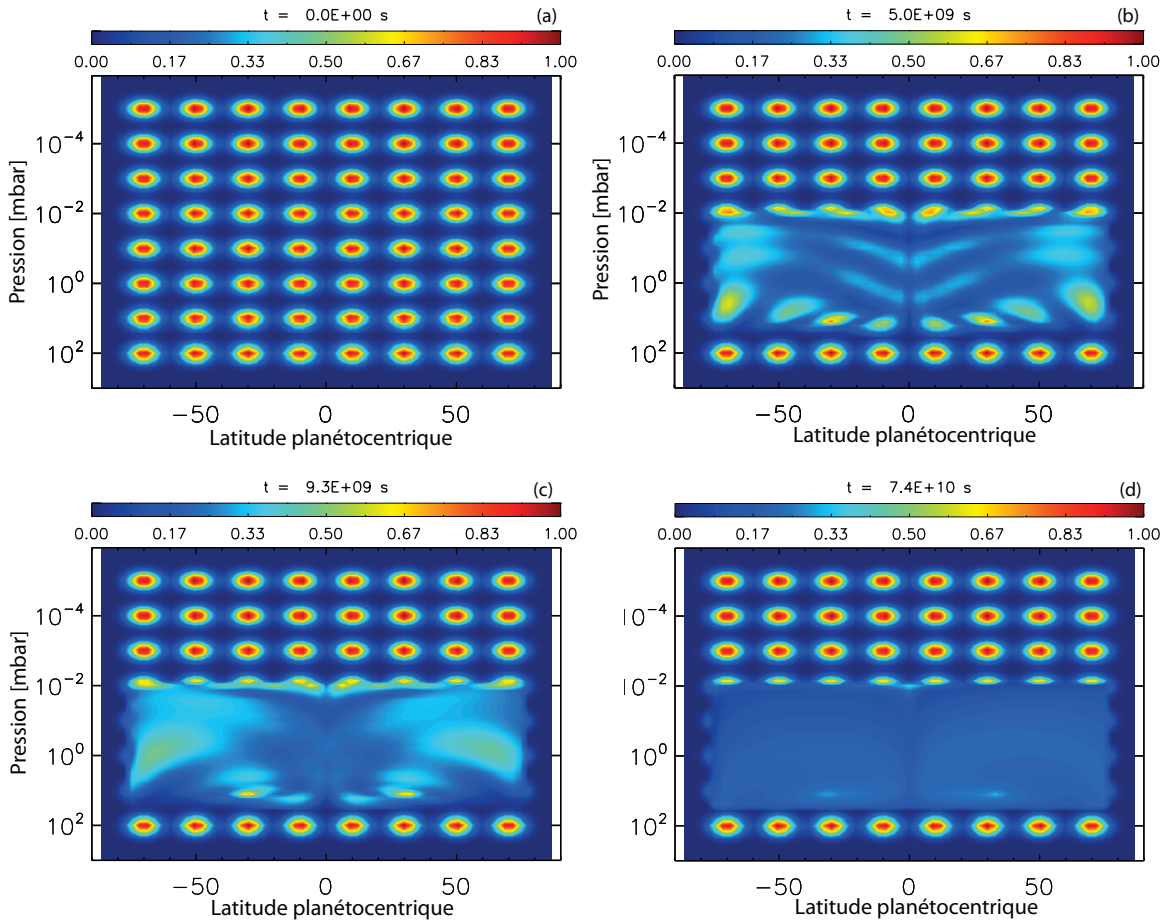

Figure 5.4 – Évolution d'une distribution fictive d'un traceur sous l'influence du champ de vent de la figure 5.3. La figure (a) présente la distribution initiale, les figures (b), (c) et (d) présentent respectivement la distribution de ce traceur aux temps $t = 5 \times 10^9$ s, t = 9,3 $\times 10^9$ s et t = 7,4 $\times 10^{10}$ s. La chimie, le transport vertical (diffusion moléculaire et turbulente) et la diffusion latitudinale sont désactivés dans cette simulation.

2. ajout du $K_{yy}^{Lellouch2}$ présenté dans le chapitre 4 et calcul du modèle jusqu'à convergence orbitale
3. ajout de la carte de vent et calcul stationnaire (point subsolaire et distance héliocentrique fixés) sur un temps égal à une période de révolution jovienne

Notons que les résultats obtenus aux étapes 1 et 2 ont été présentés dans le chapitre 4. Nous avons utilisé plusieurs cartes de vent d'amplitudes différentes. Nous les avons renormalisées afin d'obtenir des vents latitudinaux maximums de 5 cm s^{-1}, 15 cm s^{-1} et 45 cm s^{-1}, et ceci afin d'encadrer les valeurs des vents prédits par Lellouch et al. (2006). Afin de conserver la divergence nulle du flux de matière, l'ensemble de la carte de vent a été renormalisée par un même facteur. Par ailleurs nous avons effectué plusieurs simulations en faisant varier la résolution latitudinale. Le modèle a été lancé avec les résolutions

suivantes :

- $H/\Delta z \approx 3{,}4\,;\ \Delta\theta = 5°$
- $H/\Delta z \approx 3{,}4\,;\ \Delta\theta = 3°$

Les temps de calculs typiques pour les simulations à basse et haute résolution sont de 16 heures et 63 heures. Ceux-ci augmentent sensiblement avec l'amplitude des vents. Rappelons que nous avons utilisé un schéma numérique *upwind* d'ordre 2 couplé au limiteur de flux OSPRE pour l'implémentation de l'advection via la carte de vent (voir la partie 1.3.2). Ainsi, l'advection par cette carte de vent est moins sensible que la diffusion moléculaire vis-à-vis de la diffusion numérique.

L'évolution des abondances de C_2H_6 et C_2H_2 à 5 mbar suite à l'utilisation de la carte de vent est présentée sur la figure 5.5. Les courbes vertes, jaunes et rouges représentent les simulations pour lesquelles les amplitudes maximales des vents latitudinaux ont été renormalisées à $5\,\mathrm{cm\,s^{-1}}$, $15\,\mathrm{cm\,s^{-1}}$ et $45\,\mathrm{cm\,s^{-1}}$, respectivement. Les profils des vents latitudinaux et verticaux à 5 mbar sont présentés sur la figure 5.6.

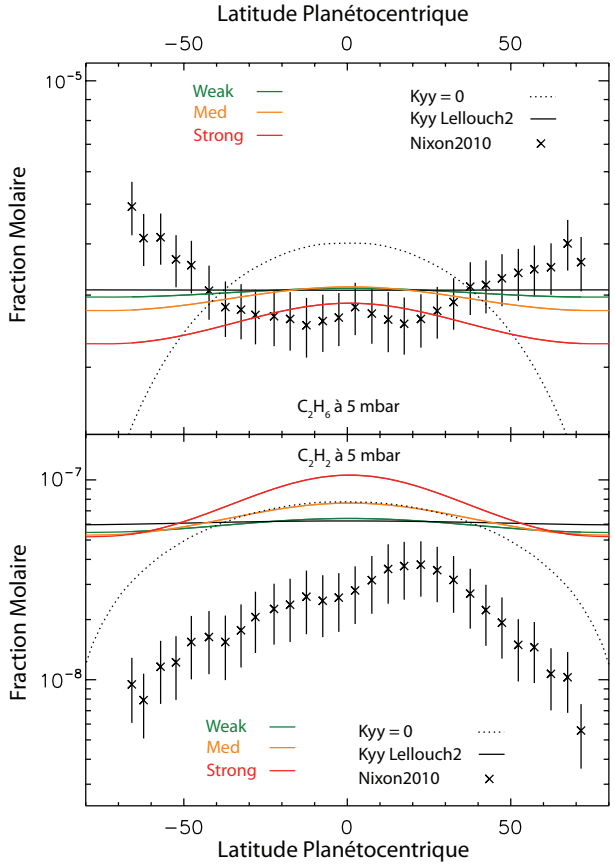

Figure 5.5 – Évolution des abondances chimiques de C_2H_6 (en haut) et C_2H_2 (en bas) à 5 mbar. Les courbes en traits pleins et pointillés dénotent respectivement les cas $K_{yy}^{Lellouch2}$ et $K_{yy} = 0$ (voir chapitre 4) et en l'absence de vent. Les courbes colorées représentent les cas pour lesquels la carte de vent est prise en compte (voir texte pour détails).

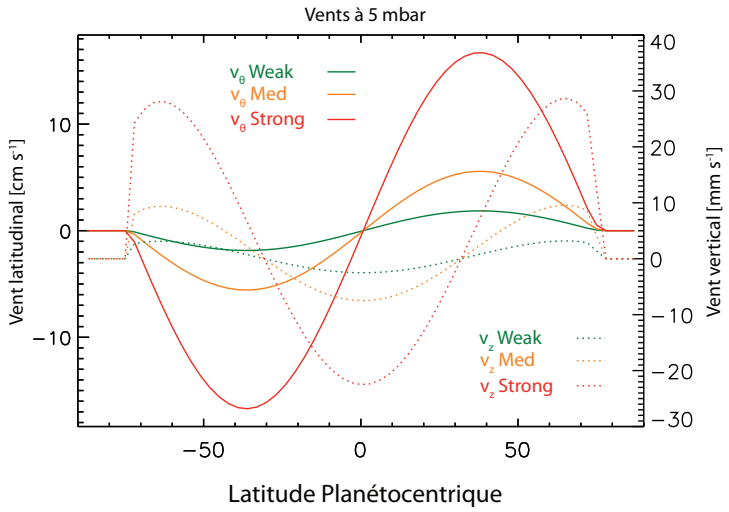

Figure 5.6 – Profils des vents latitudinaux (axe de gauche, traits pleins) et verticaux (axe de droite, pointillés) à 5 mbar. Les courbes vertes, jaunes et rouges représentent les simulations pour lesquelles les amplitudes maximales des vents latitudinaux du champ de vent ont été renormalisées à $5\,\mathrm{cm\,s^{-1}}$, $15\,\mathrm{cm\,s^{-1}}$ et $45\,\mathrm{cm\,s^{-1}}$, respectivement.

L'ajout de la carte de vent augmente le contraste latitudinal de l'abondance des composés entre l'équateur et les pôles, malgré la présence de diffusion latitudinale. Ces deux composés présentent un gradient positif d'abondance avec l'altitude dans la stratosphère, i.e. les abondances augmentent lorsque l'altitude augmente. À 5 mbar, les mouvements ascendants verticaux aux hautes latitudes amènent des cellules d'air appauvries en hydrocarbures à un niveau de pression où ces composés sont généralement plus abondants. À l'équateur, l'inverse se produit, i.e. les mouvements atmosphériques descendants amènent des cellules d'air enrichies en hydrocarbures.

Une analyse préliminaire de ces résultats suggère que nous ne seront pas en mesure de reproduire l'augmentation de l'abondance de C_2H_6 avec la latitude à l'aide de la cellule de circulation définie précédemment. Nous avons alors inversé le sens de circulation de cette cellule. Celle-ci est maintenant caractérisée par des mouvements ascendants à l'équateur et descendants aux hautes latitudes. Les résultats sont présentés à 5 mbar sur la figure 5.7. Les profils des vents de cette nouvelle circulation sont présentés sur la figure 5.8.

La figure 5.9 présente les profils verticaux de C_2H_2 et C_2H_6 suite à l'ajout de cette cellule de circulation pour trois latitudes différentes dans l'hémisphère nord. Notons que les observations publiées par Nixon et al. (2010) se situent à 5 mbar, c'est à dire là où la direction des vents latitudinaux est proche de l'inversion (voir figure 5.3, gauche) : à plus faibles niveaux de pression, le vent latitudinal souffle de l'équateur aux pôles, à plus importants niveaux de pression, le vent souffle depuis les pôles jusqu'à l'équateur.

Pour des pressions plus faibles que 5 mbar, les mouvements ascendants dans la zone équatoriale vont avoir tendance à diminuer la fraction molaire de ces deux composés par rapport à un cas sans circulation, à des pressions d'environ 5×10^{-2} mbar à 5 mbar. Toujours dans cette gamme de pression mais à plus hautes latitudes, les mouvements de

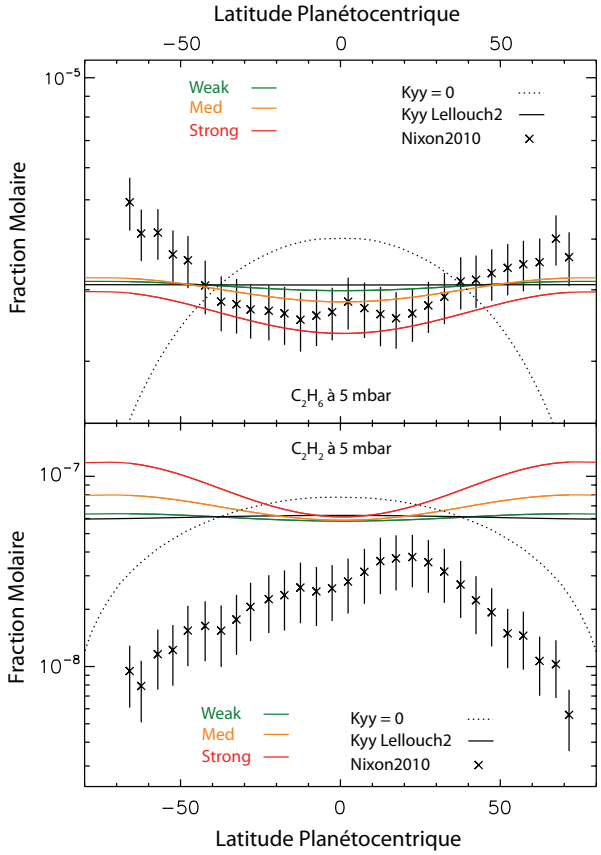

Figure 5.7 – Similaire à la figure 5.5 avec une cellule de circulation inversée. Les mouvements ascendants sont maintenant à l'équateur et les mouvements descendants aux hautes latitudes.

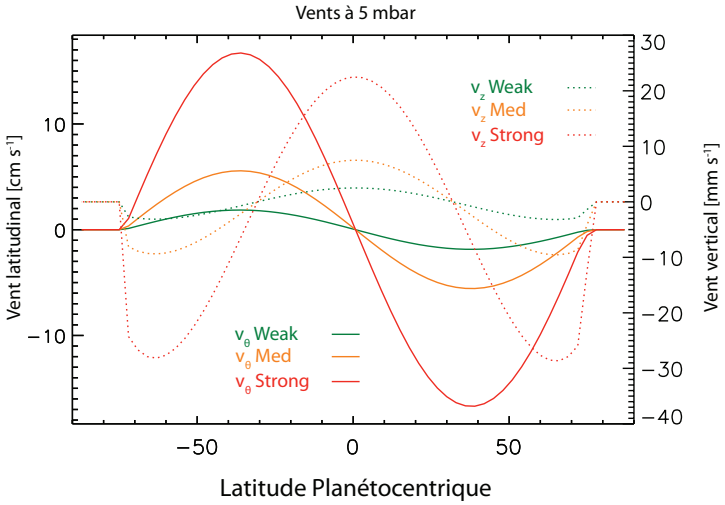

Figure 5.8 – Similaire à la figure 5.6 avec une cellule de circulation inversée.

circulation latitudinale ainsi que les processus de diffusion vont homogénéiser la composition en latitude. Notons que C_2H_6 est plus sensible à cet effet que C_2H_2 car il est plus

sensible aux phénomènes de transport que C_2H_2 dans la stratosphère moyenne. Ce dernier possède toujours des temps d'évolution chimique relativement court dans cette région par rapport à ceux de C_2H_6.

Pour des pressions supérieures à 5 mbar et aux latitudes élevées, les mouvements descendants vont avoir tendance à augmenter la fraction de ces deux composés par rapport à un cas sans circulation. C_2H_2 est plus sensible à cet effet que C_2H_6, car son gradient vertical de fraction molaire est plus important que celui de C_2H_6. Enfin, toujours dans cette gamme de pression, les mouvements de circulation latitudinale ainsi que les processus de diffusion vont causer l'enrichissement en hydrocarbures visible dans les zones équatoriales.

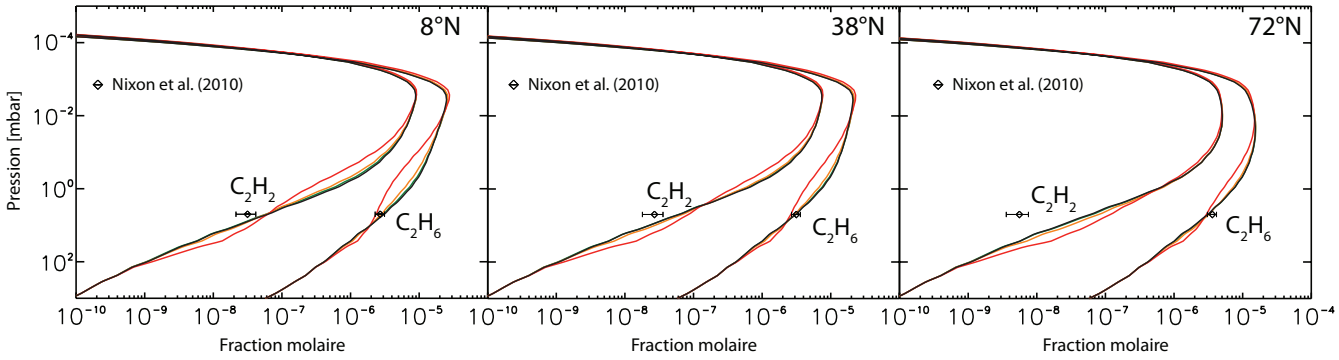

Figure 5.9 – Profils verticaux de C_2H_2 et C_2H_6 à 8°N (gauche), 38°N (centre) et 72°N (droite). Les profils sont présentés en l'absence de cellule de circulation (traits pleins noirs) ainsi qu'avec une cellule de circulation ayant des mouvements ascendants à l'équateur et descendants aux plus hautes latitudes, d'intensité variable représentée par les traits de couleurs en accord avec la figure 5.8. Les observations de C_2H_2 et C_2H_6 sont comparées sur les différents profils verticaux (Nixon et al., 2010).

La reproduction des observations de C_2H_6 suggère que la stratosphère de Jupiter est dominée par une cellule de circulation avec des mouvements ascendants à l'équateur et descendants aux pôles, entre 30 et 10^{-2} mbar. Les observations de C_2H_2 sont moins bien reproduites avec cette cellule de circulation. La distribution latitudinale de C_2H_2 suit la tendance prédite pour C_2H_6, en désaccord avec les observations. En conclusion, aucune des cellules présentées ici n'est satisfaisante pour expliquer les observations conjointes de C_2H_2 et C_2H_6. Cela semble montrer que la dynamique seule ne pourra probablement pas expliquer ces observations et qu'il sera nécessaire (i) d'inclure la chimie ionique et/ou (ii) d'explorer l'espace des paramètres des coefficients K_{zz}, K_{yy} ainsi que des valeurs des vents verticaux et latitudinaux.

Nous discutons maintenant certains points critiques de cette étude.

5.1.4 Discussion

Le principal point critique de cette étude est le découplage présupposé entre les coefficients K_{zz}, K_{yy} et le transport advectif. La raison d'être du K_{zz} est de pouvoir approximer

le mélange, à la fois advectif et diffusif, qui s'opère à toutes les échelles par un processus de diffusion. Cette approximation semble valide pour des modèles à 1D qui ne peuvent simuler une dynamique complexe. Nous avons ensuite calqué cette approche pour le mélange latitudinal et défini un coefficient de diffusion K_{yy}. Lors de ce passage, une première approximation suppose que le coefficient K_{zz} reste similaire d'un modèle à 1D à un modèle à 2D. Le passage à l'étape encore supérieure, via l'ajout d'une cellule de circulation, nous oblige à reconsidérer ces coefficients de diffusion.

Les questions clés vers une meilleure compréhension du problème sont les suivantes :

- L'intensité du K_{zz}, initialement contrainte par les modèles 1D, doit-elle être réduite lors du passage à un modèle à 2D avec diffusion latitudinale ?
- L'intensité des coefficients K_{zz} et K_{yy} restent-ils identiques lors de l'ajout d'une cellule advective ?

Bien que les observations de C_2H_6 suggèrent que la stratosphère de Jupiter soit dominée par deux cellules de circulation allant de l'équateur aux pôles, les observations de C_2H_2 contredisent ce point. La chimie du C_2H_6 est relativement mieux connue que celle de C_2H_2 (voir par exemple Dobrijevic et al. (2011) ou Hue et al. (2015a)). Par ailleurs C_2H_6 est plus stable chimiquement que C_2H_2 et serait donc un meilleur traceur de la dynamique.

Plusieurs points seraient à même d'expliquer cette divergence entre les prédictions des abondances de C_2H_2 et de C_2H_6 et pourraient éventuellement appuyer ou exclure le résultat préliminaire obtenu dans ce chapitre.

Tout d'abord, et comme discuté dans le chapitre 4, le modèle néglige les réactions chimiques ions-neutres. Kim and Fox (1994) prédirent que la réactivité de C_2H_2 avec les ions hydrocarbures saturés ou insaturés est importante, alors que la réaction de C_2H_6 avec les ions hydrocarbures saturés ou presque saturés est faible. Bien qu'il soit difficile de conclure sans modèle numérique complexe, la prise en compte de la chimie ion-neutre pourrait fournir un mécanisme de consommation de C_2H_2 aux hautes latitudes. Ce mécanisme pourrait ainsi contrebalancer l'augmentation aux hautes latitudes provoquée par la cellule de circulation invoquée ici.

Rappelons que nous avons présenté ici les résultats préliminaires à l'ajout d'une cellule de circulation paramétrisée. La définition d'une telle cellule est sujette à de nombreux paramètres (intensité des vents, extension latitudinale et verticale de la circulation). Ces paramètres sont faiblement contraints par les GCMs. En effet, les circulations prédites par ces modèles sont très sensibles à la distribution des aérosols (voir Conrath et al. (1990), West et al. (1992) et Moreno and Sedano (1997)).

Finalement, la valeur du coefficient K_{yy} est aussi faiblement contrainte. Nous avons vu, dans le chapitre 4, que du fait des temps caractéristiques d'évolution plus courts de C_2H_2 par rapport à C_2H_6, le contraste latitudinal dans l'abondance de ce premier restait plus important que celui de C_2H_6, pour un K_{yy} donné. Avec un K_{yy} plus faible que celui utilisé dans le modèle avec circulation stratosphérique, la diminution de l'abondance de C_2H_2 avec la latitude pourrait contrebalancer l'augmentation causée par la cellule de circulation aux hautes latitudes.

L'espace des paramètres à explorer est important. La première étape du développement

futur du modèle de Jupiter sera la prise en compte de la chimie ion-neutre dans une version 1D du modèle. La deuxième étape consistera à collaborer avec la communauté GCM afin de contraindre K_{yy} (via la divergence du flux de Eliassen-Palm [1]). Une fois le coefficient K_{yy} caractérisé, l'utilisation de la carte de vent permettra de contraindre la circulation atmosphérique en reproduisant les observations Cassini.

5.2 Saturne

Les perspectives du développement futur du modèle photochimique saisonnier de Saturne rejoignent celles du modèle de Jupiter. La chimie ions-neutres semble un axe de travail indispensable.

Moses and Bass (2000) étudièrent l'effet de la chimie ions-neutres sur la densité des espèces neutres dans la stratosphère. Leur étude suggère que le principal effet est de convertir du méthane en des hydrocarbures plus complexes (C_xH_y avec $x \geq 2$). Cependant, Moses et Bass suggérèrent que l'effet sur les neutres n'est pas assez significatif pour être mesuré par ISO. Néanmoins, la prise en compte de cette chimie semble nécessaire dans un modèle à 2D car elle pourrait affecter les contrastes latitudinaux d'abondance des espèces chimiques neutres entre les zones équatoriales et les zones aurorales.

Enfin, la prise en compte de la dynamique atmosphérique sur Saturne sera un des autres principaux axes de recherche. Sa dynamique stratosphérique semble posséder une structure plus complexe que celle de Jupiter. Celle-ci évolue de façon saisonnière et présente une inversion de sa structure avec l'enchaînement des saisons (Friedson and Moses, 2012). Deux approches pourraient donc être traitées en vue de la prise en compte de la dynamique atmosphérique sur Saturne :

- prise en compte de la circulation stratosphérique prédite par les GCM de Saturne développé au LMD (Spiga et al., 2014) ou au JPL (Friedson and Moses, 2012) afin d'étudier les effets sur les espèces chimiques neutres
- définition d'une cellule de circulation stratosphérique ad hoc permettant de reproduire les observations de Guerlet et al. (2009) dans l'hémisphère sud de Saturne au moment des observations

En conclusion, ces deux approches, i.e. la chimie ionique et la prise en compte de la dynamique, pourraient très probablement être complémentaires, l'une favorisant les aspects dynamique et l'autre les aspects chimiques.

1. quantité qui caractérise l'importance des processus irréversibles de diffusion sur le vent zonal (Moreno and Sedano, 1997; Friedson et al., 1999).

Conclusion

Dans cette partie, nous résumons les conclusions propres à chaque chapitre.

Le chapitre 1 présente le modèle photochimique saisonnier versatile à 2D que nous avons développé pendant cette thèse. Celui-ci inclut les mêmes processus qui sont initialement pris en compte dans un modèle photochimique traditionnel à 1D, ainsi que les phénomènes de transport inhérents aux modèles 2D. Les composés chimiques peuvent se déplacer verticalement suivant la diffusion turbulente verticale, la diffusion moléculaire et l'advection causée par la présence de vents verticaux. Dans la direction horizontale, les molécules peuvent se déplacer suivant la diffusion turbulente latitudinale, la diffusion moléculaire latitudinale ainsi que par la présence de vents latitudinaux. Une attention particulière a été portée à la façon de tenir compte des termes advectifs. Les taux de photolyse sont calculés à l'aide d'un modèle de transfert radiatif UV à 3D, développé par Jean Brillet (Brillet et al., 1996) et adapté dans cette thèse afin de prendre en compte une composition chimique inhomogène en latitude et longitude. Les variations saisonnières du point subsolaire, de la distance de la planète ainsi que de l'occultation des anneaux, lorsque la planète modélisée en possède, sont considérées dans le modèle. Dans le cadre de ce modèle, nous utilisons un réseau chimique réduit pour que le temps de calcul reste raisonnable. Ce réseau est issu de travaux sur les réseaux chimiques menés au Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux et à l'Institut des Sciences Moléculaires depuis plusieurs années. Dans cette thèse, le modèle photochimique a été adapté à Saturne (chapitre 2 et 3) et à Jupiter (chapitre 4).

Les effets saisonniers sur la composition chimique de Saturne sont présentés dans le chapitre 2. Cette composition est calculée à l'aide de deux champs thermiques différents : un champ thermique uniforme en latitude et avec la saison et, pour la première fois, un champ thermique variable avec la latitude et la saison. Les résultats obtenus avec le champ thermique uniforme sont en accord avec ceux précédemment publiés par Moses and Greathouse (2005). Le modèle photochimique qui tient compte du champ thermique variable prédit une diffusion plus rapide des produits photochimiques issus de la photolyse du méthane vers la troposphère. Cet effet, provoqué par les contractions et dilatations saisonnières des colonnes atmosphériques, reste cependant faible lorsqu'il est comparé aux barres d'erreurs des observations Cassini/CIRS. Les abondances prédites par le modèle photochimique à l'aide de ces deux champs thermiques reproduisent de façon satisfaisante les distributions latitudinales d'abondance de C_2H_2 et C_2H_6 observées à 1 mbar (Guerlet et al., 2009). À plus faibles niveaux de pression dans l'hémisphère sud, les écarts avec ces observations semblent suggérer la présence d'une cellule de circulation stratosphérique.

Les effets du couplage entre la composition chimique atmosphérique et le champ thermique de Saturne ont été étudiés dans le chapitre 3. Le modèle photochimique de Saturne développé dans le chapitre 2 a été couplé avec le modèle radiatif saisonnier de Greathouse

et al. (2008). Le modèle photochimique utilise les cartes de température prédites par le modèle radiatif saisonnier afin de calculer la composition chimique. Le modèle radiatif, à son tour, utilise la composition chimique prédite par le modèle photochimique pour calculer une nouvelle carte de température. Plusieurs itérations ont été effectuées entre le modèle photochimique et le modèle radiatif. Ce travail résulte d'une collaboration de plusieurs mois avec T. Greathouse au *Southwest Research Institute*. Les principaux effets du couplage de la température sur la composition chimique se produisent à la première itération entre les deux modèles et ont été présentés dans le chapitre 2. Le champ thermique est très sensible à la composition chimique, et plusieurs itérations avec le modèle photochimique sont nécessaires afin d'obtenir une convergence des températures prédites par le modèle de transfert. La principale conséquence de ce couplage concerne le décalage du pic de température saisonnier. Ce décalage est d'autant plus prononcé que la latitude est importante. Alors que ce pic de température se produit durant l'été lorsque le couplage avec la photochimie n'était pas considérée, il se produit durant le printemps lorsqu'il est pris en compte. À $\pm$ 80° de latitude, ce décalage est d'environ une demi-saison saturnienne. Tenir compte de ce couplage améliore la reproduction des gradients latitudinaux de température observés à 1 mbar, bien que les valeurs absolues de ces températures soient moins bien reproduites. À des pressions inférieures à 1 mbar, les gradients latitudinaux de température sont moins bien reproduits, rejoignant la conclusion de Guerlet et al. (2014) à savoir que la haute stratosphère de Saturne semble s'écarter de l'équilibre radiatif saisonnier.

Une version du modèle photochimique adaptée à Jupiter est présentée dans le chapitre 4. Nous avons montré que le réseau chimique qui a été réduit dans les conditions physico-chimiques de Saturne reste valide pour modéliser la composition chimique de Jupiter. Les principaux processus chimiques qui contrôlent sa composition sont identiques à ceux dans l'atmosphère de Saturne. Les effets saisonniers sur la composition chimique de Jupiter y sont comparés à ceux calculés pour Saturne. À cause de l'obliquité plus faible de Jupiter, les effets saisonniers y sont plus faibles que sur Saturne, et c'est l'excentricité de la planète qui contrôle les variations saisonnières de composition chimique. Le survol de Jupiter par Cassini a mis en évidence une augmentation de l'abondance de C_2H_6 avec la latitude (Nixon et al., 2007, 2010). Notre étude rejoint les résultats de Liang et al. (2005) et Lellouch et al. (2006) en suggérant la présence d'un couplage entre la composition chimique et la dynamique atmosphérique dans sa stratosphère. L'ajout d'une diffusion latitudinale permet d'améliorer la reproduction des observations de C_2H_6. À 5 mbar, l'importance du coefficient de diffusion latitudinale suggérée est $K_{yy} \sim 2\text{-}3 \times 10^9$ cm^2 s^{-1}. Notre étude suggère que les observations de C_2H_6 ne peuvent pas être reproduites uniquement à l'aide d'un coefficient de diffusion latitudinale. Elle suggère aussi qu'un coefficient de diffusion latitudinale trop important ne permet plus de reproduire les observations de C_2H_2. Deux hypothèses plausibles afin d'expliquer les distributions latitudinales de C_2H_6 sont la présence d'une cellule de circulation stratosphérique et/ou la chimie des ions-neutres plus active dans les zones aurorales.

Nous avons exploré la possibilité d'une cellule de circulation stratosphérique afin de

reproduire les observations Cassini/CIRS de C_2H_6 sur Jupiter. Ce composé est probablement un meilleur traceur de la dynamique que C_2H_2 car il serait moins affecté par la chimie des ions (Kim and Fox, 1994). La circulation utilisée dans le modèle photochimique est un paramètre d'entrée. Nous avons construit une cellule de circulation stratosphérique basée sur les observations Cassini/CIRS d'HCN et de CO_2 sur Jupiter (Lellouch et al., 2006) ainsi que sur les prédictions d'un GCM (West et al., 1992). Nos résultats préliminaires suggèrent qu'il est possible de reproduire l'augmentation de l'abondance de C_2H_6 avec la latitude, à l'aide d'une cellule de circulation stratosphérique inversée par rapport aux prédictions de Lellouch et al. (2006) et West et al. (1992). En effet, la cellule utilisée ici considère des mouvements stratosphériques ascendants à l'équateur et descendants aux niveaux des pôles, en accord avec la circulation prédite par Moreno and Sedano (1997). En revanche, C_2H_2 est moins bien reproduit à l'aide de cette circulation, suggérant qu'un processus physique supplémentaire soit nécessaire afin d'expliquer cette distribution. Un candidat potentiel pour ce processus est la chimie des ions-neutres.

Plusieurs questions importantes restent ouvertes à l'issue de cette thèse :
• Quelle est l'importance dans notre modèle de la chimie des ions-neutres sur les abondances stratosphériques des espèces neutres ?
• Existe-t-il une dépendance latitudinale des coefficients de diffusion turbulente verticale (K_{zz}) et latitudinale (K_{yy}) ?
• L'importance de ces deux coefficients varie-t-elle en fonction du caractère 1D et 2D du modèle ?

Annexes

Annexe A

Stabilité numérique de la diffusion moléculaire

Dans cette partie, nous exposons les précautions à prendre lors du calcul numérique de la diffusion moléculaire.

A.1 Diffusion moléculaire et advection

Revenons tout d'abord à l'équation de continuité (équation 1.1) en l'absence de terme de production ou perte chimique et considérons le flux de l'espèce i provoqué par le phénomène de diffusion moléculaire (équation 1.19). Nous négligerons, en première approximation, le flux de l'espèce i causé par la présence d'un gradient de température car celui-ci n'a pas d'intérêt pour la présente démonstration :

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \mathrm{div}\left\{ D_i \left(\frac{\partial n_i}{\partial z} + \frac{n_i}{H_i} \right) \mathbf{e}_z \right\} \tag{A.1}$$

La diffusion moléculaire concerne deux phénomènes physiques. D'un coté, un phénomène de diffusion lié à la présence d'un gradient de concentration, caractérisé par le premier terme de la divergence, de l'autre, un phénomène d'advection, lié à la chute de l'espèce à la vitesse D_i/H_i, caractérisée par le second terme de la divergence.
Les phénomènes d'advection sont connus pour être difficiles à traiter comme en témoigne l'abondante littérature sur ce sujet (e.g. Godunov (1959); Van Leer (1977, 1979); Rood (1987)). En effet, suivant le schéma d'interpolation numérique, le système devient instable. La figure A.1 représente typiquement le type d'instabilité numérique causé par la diffusion moléculaire. Dans cet exemple, le système part d'une condition initiale arbitraire avec une composition stratosphérique de type planète géante (dominée par H_2, He, CH_4), avec des profils d'abondance d'espèces constantes en altitude. Il tend vers un état d'équilibre sous l'influence des processus de transport (diffusion moléculaire et turbulente) uniquement. Les fractions molaires des autres espèces du système (H, C_2H_6) sont initialement fixées à une valeur arbitrairement faible de 10^{-15}. Après un certain temps d'évolution, les instabilités apparaissent au-dessus de l'homopause, là où la diffusion moléculaire domine la diffusion turbulente. Notons que ces instabilités, caractérisées par des concentrations négatives, sont seulement observables pour les espèces lourdes (CH_4 et C_2H_6).

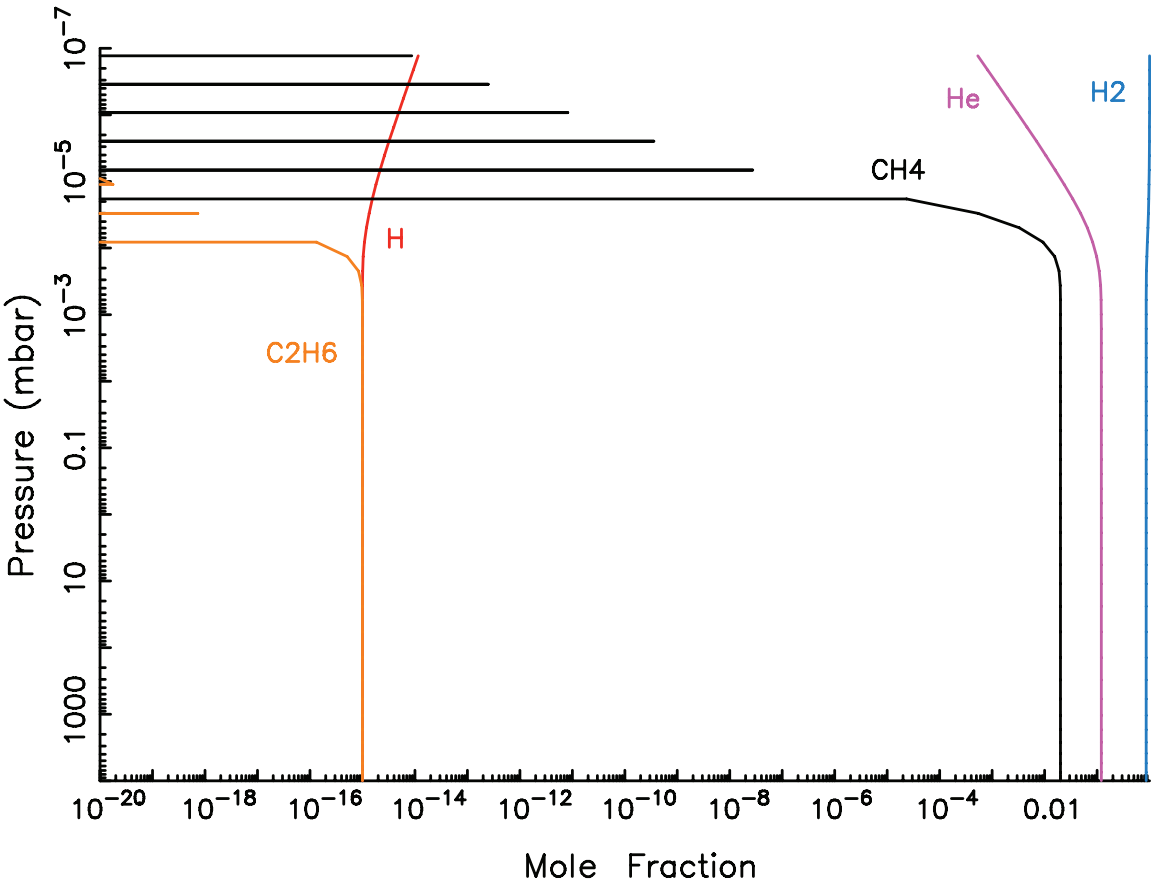

Figure A.1 – Profils d'abondance des composés atmosphériques, en l'absence de chimie, partant d'une condition initiale arbitraire, caractérisée par des profils verticaux d'abondance constants et sous l'effet des diffusions moléculaire et turbulente. Les instabilités apparaissent pour les espèces les plus lourdes considérées (CH_4 et C_2H_6) dans la haute atmosphère où la diffusion moléculaire domine la diffusion turbulente.

Essayons de mieux comprendre les critères qui déclenchent l'apparition de ces instabilités.

A.2 Instabilités numériques

Procédons à une étude de stabilité du schéma numérique utilisé. Le théorème de Green-Ostrogradski appliqué à l'équation 1.1 impose que la discrétisation numérique des flux de matière se fasse aux interfaces des cellules numériques et non au centre de celles-ci. En première approximation pour cette étude de stabilité, nous restreindrons le système à une dimension cartésienne. Ainsi, cette équation discrétisée, en l'absence des termes de production et perte chimique, s'écrit :

$$\frac{\Delta n_i^j}{\Delta t} = -\frac{\left(\Phi^{j+\frac{1}{2}} - \Phi^{j-\frac{1}{2}}\right)}{\Delta z} \tag{A.2}$$

où

$$\Phi^{j+\frac{1}{2}} = -D_i^{j+\frac{1}{2}} \frac{\partial n_i^{j+\frac{1}{2}}}{\partial z} - \frac{D_i^{j+\frac{1}{2}} n_i^{j+\frac{1}{2}}}{H_i^{j+\frac{1}{2}}} \tag{A.3}$$

Afin de simplifier cette étude de stabilité, nous considérerons que la hauteur d'échelle ainsi que le coefficient de diffusion moléculaire sont constants, de sorte que

$$\begin{cases} D_i^{j+\frac{1}{2}} & \approx D_i^{j-\frac{1}{2}} & \approx D_i^j \\ H_i^{j+\frac{1}{2}} & \approx H_i^{j-\frac{1}{2}} & \approx H_i^j \end{cases}$$

Nous calculerons alors les quantités $\Delta n_i^{j+\frac{1}{2}}$ et $n_i^{j+\frac{1}{2}}$ de l'équation A.3 de façon identique à ce qui est généralement fait dans les modèles photochimiques (voir par exemple les modèles photochimiques de Collet et al. (2010); Venot et al. (2012); Hu et al. (2012); Agúndez et al. (2014)). Notons que la grande majorité des publications présentant des modèles photochimiques ne discutent pas des détails des interpolations utilisées. Ainsi, ces quantités seront interpolées de la façon suivante :

$$\frac{\Delta n_i^{j+\frac{1}{2}}}{\Delta z} = \frac{n_i^{j+1} - n_i^{j-1}}{\Delta z} \tag{A.4}$$

$$n_i^{j+\frac{1}{2}} = \frac{n_i^{j+1} + n_i^{j-1}}{2} \tag{A.5}$$

La résolution de l'équation (A.2), à l'aide d'un schéma type Euler d'ordre 1 donne alors :

$$n_i^j(t + \Delta t) = n_i^j(t) + \alpha \left(n_i^{j+1}(t) - 2n_i(t) + n_i^{j-1}(t) + \frac{1}{2\,\beta}(n_i^{j+1}(t) - n_i^{j-1}(t)) \right) \tag{A.6}$$

où l'on aura posé $\alpha = \dfrac{\Delta t\, D_i^j}{\Delta z^2}$; $\beta = \dfrac{H_i^j}{\Delta z}$

D'après la méthode d'analyse de stabilité de Von Neumann, on peut décomposer l'erreur de la solution de l'équation A.6 en séries de Fourier, soit :

$$\epsilon(z, t) = \sum \mathrm{e}^{at} \mathrm{e}^{ik_m z}$$

De plus, cette erreur doit satisfaire l'expression A.6, ce qui donne :

$$\mathrm{e}^{a\Delta t} = 1 - 4\alpha\left(\sin^2\frac{k_m\Delta z}{2} - i\frac{1}{4\beta}\sin k_m\Delta z\right) \tag{A.7}$$

On définit alors le facteur d'amplification du système, G tel que :

$$|G| = \left|\frac{\epsilon(z_i, t+\Delta t)}{\epsilon(z_i, t)}\right| = \left|\mathrm{e}^{a\Delta t}\right|$$

Le schéma est instable lorsque $G > 1$, soit lorsque

$$\sqrt{\left(1 - 4\alpha\sin^2\frac{k_m\Delta z}{2}\right)^2 + \left(\frac{\alpha}{\beta}\sin k_m\Delta z\right)^2} > 1 \tag{A.8}$$

La figure A.2 représente la fonction $|G|^2 - 1$. Le système devient instable si la fonction représentée est supérieure à 0. Cela signifie qu'il devient instable lorsque $\beta \lesssim 0.5$ c'est à dire lorsque $\Delta z \geq 2H_i^j$.
Afin de s'affranchir de cette condition, la position généralement adoptée dans la littérature consiste à réduire le pas en altitude jusqu'à une valeur assez faible afin de satisfaire le critère de stabilité au prix d'un temps de calcul plus important (Le Flochmoen, 1997). Une autre méthode généralement utilisée pour résoudre ces problèmes d'advection consiste à changer le schéma d'interpolation. En effet, au lieu d'interpoler $n_{i+\frac{1}{2}}$ de façon *centrée* comme c'est le cas dans l'équation A.5, nous utilisons uniquement des valeurs de concentration situées en remontant le vent incident, appelé *upwind*. Afin de clarifier au mieux la démonstration, les détails numériques relatifs aux méthodes d'interpolation discutées ici ne seront présentées que dans la partie 1.3, et nous étudierons ici seulement leur stabilité.

Dans la partie qui suit, nous allons brièvement comparer les différentes méthodes d'interpolation *centrée* et *upwind* d'ordre 1 et 2 dans des cas simplifiés.

A.3 Comparaison des schémas d'interpolation centrée et *upwind* d'ordre 1 et 2

Dans cette partie, nous avons construit un modèle d'advection-diffusion à 1D cartésienne afin de comparer l'erreur causée par l'utilisation des différentes méthodes d'interpolation. Nous avons ainsi, dans un premier temps, étudié l'erreur causée par l'utilisation d'un certain type d'interpolation dans un cas similaire à un problème d'advection-diffusion lié à la diffusion moléculaire telle que celui présenté en A.1. Dans un second temps, nous allons ajouter un terme de diffusion pure dans le système, représentant un cas plus proche de celui considéré dans les atmosphères planétaires.

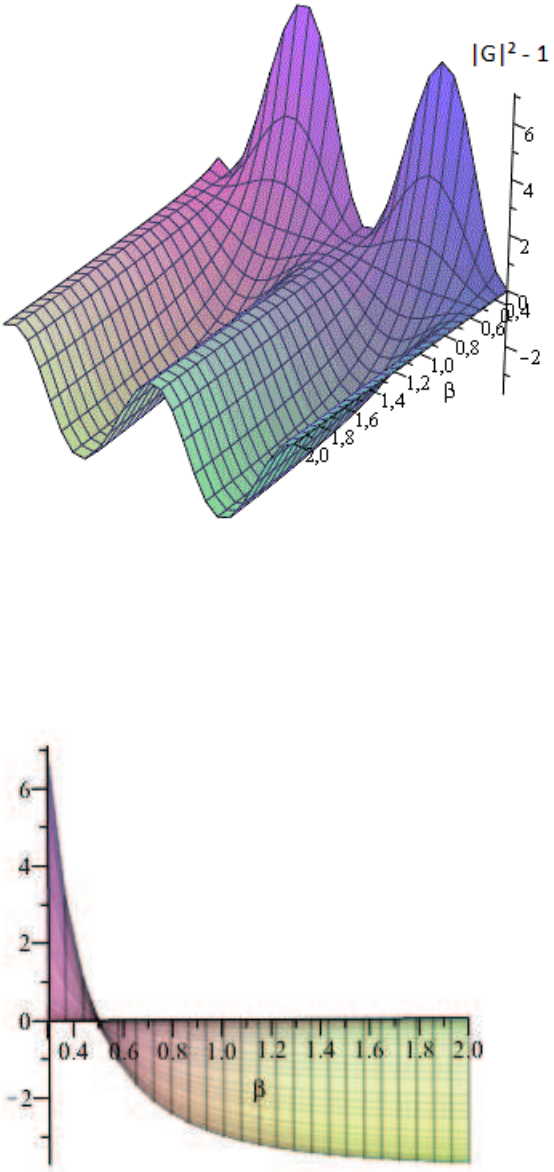

Figure A.2 – Représentations graphiques de $|G|^2 - 1$ en fonction des paramètres β ainsi que de l'argument du sinus ($k_m \Delta z$) pour une valeur de alpha fixée à 0.5. Le système est instable lorsque cette fonction est supérieure à 0.

A.3.1 Diffusion moléculaire pure

Afin de pouvoir comparer les différentes méthodes, il est nécessaire de connaitre la solution exacte d'un problème d'advection/diffusion. À une dimension, cette solution s'obtient

à l'aide de la fonction de Green du système, cette dernière étant :

$$G(x-vt,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi 4Dt}} \exp\left(-\frac{(x-vt)^2}{4Dt}\right) \tag{A.9}$$

où D = coefficient de diffusion moléculaire [$\mathrm{cm^{-2}\,s^{-1}}$]
v = la vitesse d'advection [$\mathrm{cm\,s^{-1}}$]

Le lecteur peut se reporter à l'annexe B pour une démonstration de la fonction de Green de ce problème. Dans le contexte du modèle d'advection à une dimension cartésienne, nous définirons la vitesse d'advection du système $v = D/H$. Ainsi, plus l'espèce est lourde, plus sa hauteur d'échelle sera petite et plus sa vitesse d'advection sera importante.
La solution exacte à un temps ultérieur t_f ($t_f > t_0$) s'obtient en convoluant la fonction de Green du système avec la distribution initiale de particule, soit :

$$n_{exacte}(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} n_0(x_0,t_0) G(x-x_0-vt,t)\, dx_0 \tag{A.10}$$

Nous tracerons l'erreur effectuée par les différentes méthodes d'interpolation en fonction du paramètre critique d'apparition de ces instabilités, à savoir le paramètre β. La résolution de la grille numérique utilisée sera prise constante et nous ferons simplement varier la hauteur d'échelle du composé et donc sa vitesse d'advection. La figure A.3 présente l'évolution des erreurs relatives d'un problème d'advection-diffusion à l'aide des différentes méthodes d'interpolation considérées. Nous remarquons que plus la vitesse d'advection est élevée et plus l'erreur par rapport à la solution exacte est grande.

A.3.2 Diffusions moléculaire et turbulente

Nous avons pu remarquer sur la figure A.1 que les instabilités apparaissent dans la haute atmosphère, là ou la diffusion moléculaire domine la diffusion turbulente. Ainsi, il semble que l'ajout d'un terme de diffusion pure stabilise le système. Nous avons quantifié dans quelle mesure l'ajout de ce terme de diffusion turbulente permettait la stabilisation du schéma d'interpolation centré.
La fonction de Green de ce nouveau problème s'écrit maintenant de la façon suivante :

$$G(x-vt,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi 4(D+K)t}} \exp\left(-\frac{(x-vt)^2}{4(D+K)t}\right) \tag{A.11}$$

où K = coefficient de diffusion turbulente [$\mathrm{cm^{-2}\,s^{-1}}$]

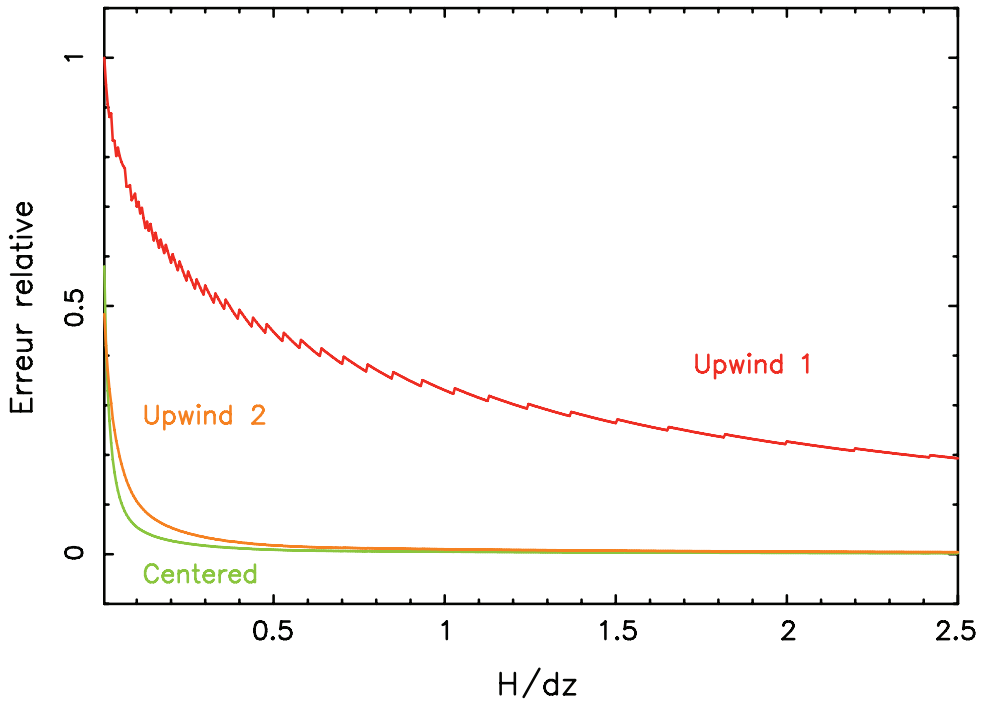

Figure A.3 – Erreurs relatives obtenues avec les méthodes centrée, *Upwind* d'ordre 1 et 2 en fonction du paramètre β. Les méthodes dites centrée et *Upwind* d'ordre 2 sont toutes deux des méthodes d'ordre 2, ainsi les erreurs effectuées par ces méthodes restent inférieures aux erreurs obtenues avec un schéma d'interpolation *Upwind* d'ordre 1.

La valeur du coefficient de la diffusion moléculaire D sera prise constante. La figure A.4 représente l'évolution de l'erreur spécifique du schéma d'interpolation centré en fonction du paramètre β et de la valeur de la diffusion turbulente par rapport à la diffusion moléculaire.
Par ailleurs, la fréquence d'apparition de concentrations négatives peut aussi être utilisée comme diagnostic de stabilité du schéma numérique. Par exemple, la figure A.5 présente la fréquence d'apparition de concentration négative en fonction des deux paramètres étudiés. Encore une fois, l'ajout d'un terme de diffusion turbulente va permettre de stabiliser le système.

A.4 Influence du schéma d'interpolation sur le modèle photochimique

À la différence d'un problème d'advection-diffusion à 1D cartésienne, obtenir une solution analytique des profils d'abondance des composés atmosphériques en tenant compte de l'ensemble des processus physico-chimiques n'est pas possible. Nous allons donc nous

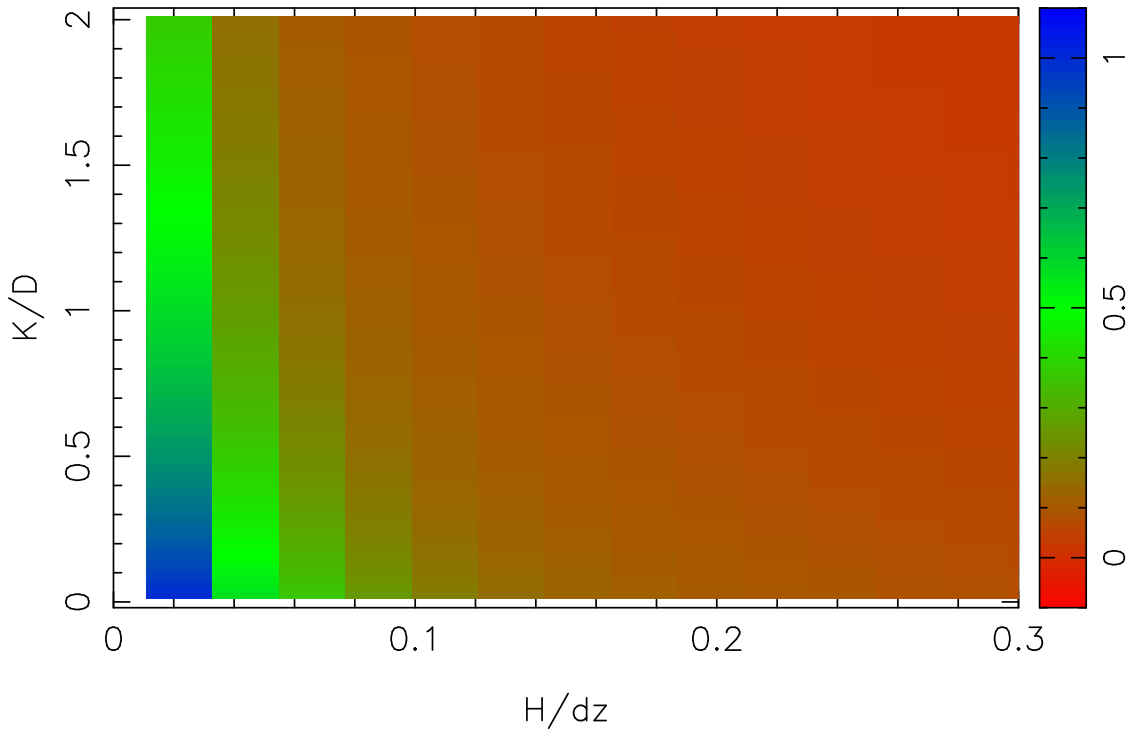

Figure A.4 – Erreur effectuée dans la quantité advectée par le schéma d'interpolation centré en fonction du paramètre β et du rapport des coefficients de diffusion turbulente et moléculaire.

restreindre à la comparaison des résultats obtenus via les différents schémas numériques entre eux. Afin de limiter la complexité du problème, intéressons-nous simplement au méthane qui, bien qu'étant photo-dissocié dans la haute stratosphère, voit son profil vertical principalement contrôlé par les processus de transport (Romani and Atreya, 1988).
La figure A.6 présente le profil vertical du méthane dans la haute stratosphère suite à l'utilisation des trois schémas d'interpolation discutés précédemment. Le schéma numérique va modifier le profil d'abondance des molécules dans la zone où la diffusion moléculaire domine. Par ailleurs, l'écart entre les profils verticaux d'abondance tels qu'ils sont calculés avec les différents schémas numériques se réduit lorsque la résolution du modèle augmente. Notons que le profil vertical du méthane calculé avec le schéma centré et la résolution la plus grossière reste le plus proche des calculs à plus haute résolution, malgré les instabilités inhérentes à ce schéma.
La connaissance de l'impact de ces schémas numériques est importante car ce sont les modèles photochimiques qui permettent de contraindre certains paramètres libres du modèle comme le coefficient de diffusion turbulente. En effet, les occultations stellaires dans l'UV (Festou et al., 1981; Atreya et al., 1981) ou encore l'étude d'émissions de certains composés atmosphériques (Vervack et al., 1995) permettent de contraindre ce coefficient au niveau de l'homopause du méthane. Or nous voyons sur la figure A.6 que c'est à partir de l'homopause que l'influence du schéma numérique devient importante.

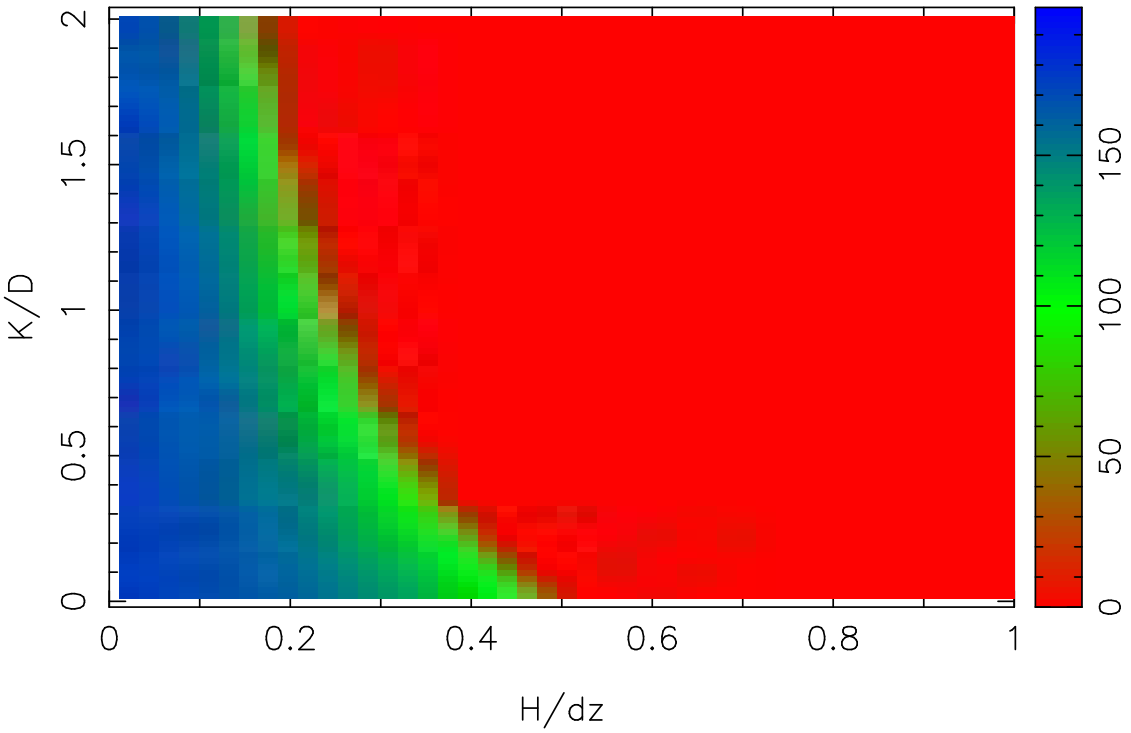

Figure A.5 – Fréquence d'apparition de concentrations négatives par utilisation d'un schéma numérique centré en fonction du paramètre β et de l'intensité de la diffusion turbulente par rapport à la diffusion moléculaire.

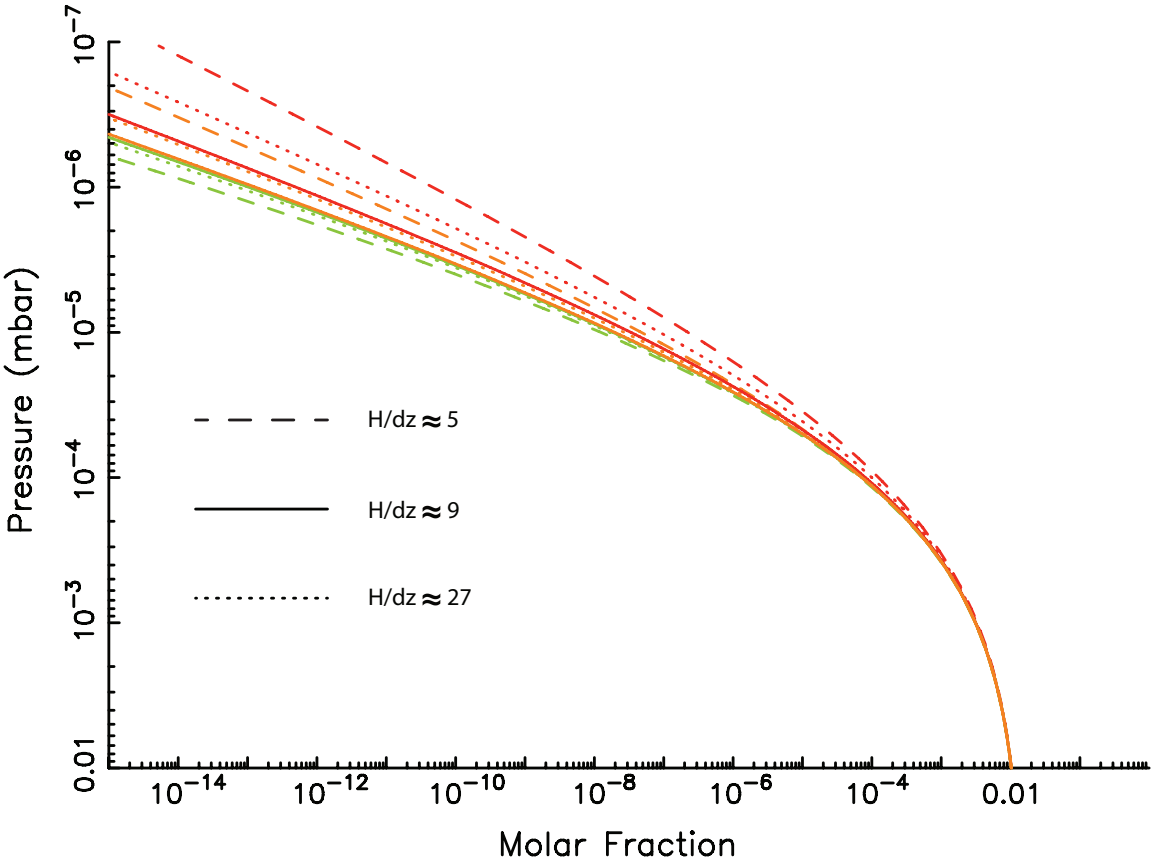

Figure A.6 – Profils d'abondance de CH_4 suite à l'utilisation de trois schémas numériques différents : *upwind* d'ordre 1 (rouge), centré (orange) et *upwind* d'ordre 2 (vert). Trois résolutions de grilles différentes ont été utilisées, correspondant à des rapports $H/\Delta z$ de 5 (tirets), 9 (pointillés) et 27 (traits pleins). Lorsque la résolution du modèle augmente, les profils d'abondances obtenus avec les différents schémas numériques convergent progressivement vers une même solution.

Annexe B

Fonction de Green d'un problème d'advection-diffusion

Nous cherchons à calculer la fonction de Green d'un problème d'advection-diffusion à une dimension. L'équation se présente sous la forme suivante :

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2} + \frac{D}{H}\frac{\partial n(x,t)}{\partial x} \tag{B.1}$$

On définit la fonction de Green (aussi appelée propagateur en mécanique quantique) $G(x,t;x_0,t_0)$ telle que celle-ci vérifie :

$$n(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x,t;x_0,t_0)n(x_0,t_0)dx_0 \tag{B.2}$$

La solution exacte d'un problème d'advection-diffusion est ainsi obtenue en convoluant la fonction de Green par la condition initiale. Par ailleurs, la fonction de Green satisfait aussi l'équation (B.1). Par la suite on posera $t_0 = 0$. On définit alors la transformée de Laplace de la fonction de Green :

$$K(x,z;x_0) = \int_0^{+\infty} G(x,t;x_0)\ e^{-zt}dt \tag{B.3}$$

La transformée de l'équation satisfaite par la fonction de Green s'écrit alors :

$$z\,K(x,z;x_0) - \delta(x-x_0) = D\frac{\partial^2 K(x,t)}{\partial x^2} + \frac{D}{H}\frac{\partial K(x,t)}{\partial x} \tag{B.4}$$

où l'on aura utilisé les propriétés des transformées de Laplace ainsi que de la propriété suivante :

$$G(x,t=t_0;x_0) = \delta(x-x_0) \tag{B.5}$$

Nous prenons à présent la transformée de Fourier de l'équation (B.4). Nous définissons alors :

$$\Lambda(k,z:x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x,z;x_0)\ e^{ikx}dx$$

Ainsi :

$$z\Lambda(k,z:x_0) + (Dk^2 - i\frac{k\,D}{H})\Lambda(k,z:x_0) = e^{ikx_0}$$
$$\Lambda(k,z:x_0) = \frac{e^{ikx_0}}{Dk^2 - i\frac{k\,D}{H}} \tag{B.6}$$

Si l'on note $\xi(k,t:x_0)$ la transformation de Laplace inverse de $\Lambda(k,z:x_0)$; l'équation (B.6) s'écrit alors :

$$\xi(k,t:x_0) = exp\left(-t(Dk^2 - ik\frac{D}{H}) + ikx_0\right) \tag{B.7}$$

Finalement, la fonction de Green de ce problème est obtenue en effectuant la transformation de Fourier inverse de $\xi(k,t:x_0)$

$$G(x,t;x_0) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} exp\left(ik(x_0 + \frac{D\,t}{H} - x)\right)\, exp\left(-Dk^2t\right)\; dk$$

$$G(x,t;x_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\, exp\left(\frac{-(x - x_0 - \frac{D\,t}{H})^2}{4Dt}\right) \tag{B.8}$$

Annexe C

Correction pour les couches sphériques

Calculons, dans une géométrie sphérique, le trajet réel effectué par le rayon lumineux lors de son passage dans l'atmosphère. Les notations utilisées se réfèrent à la figure (C.1).

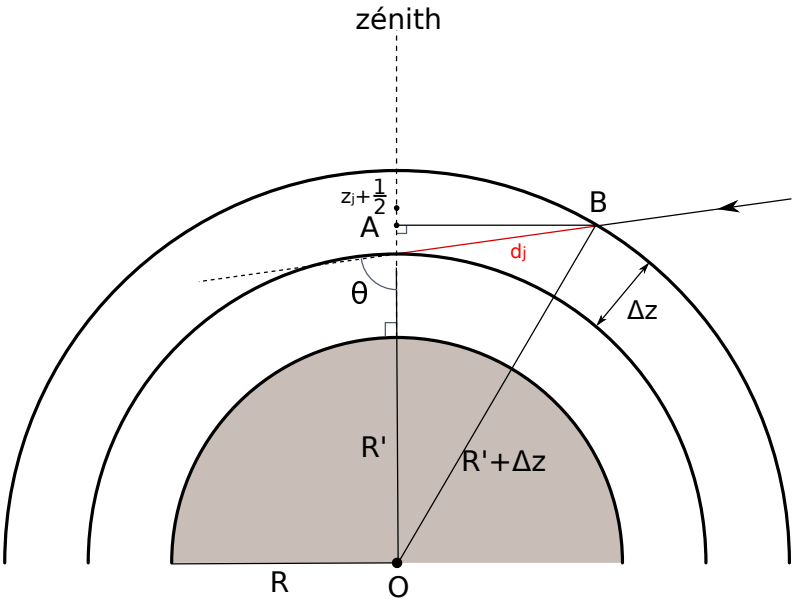

Figure C.1 – Trajet optique parcouru par un photon dans une atmosphère discrétisée en couches sphériques au niveau d'altitude considéré j. $z_{j+\frac{1}{2}}$ représente l'altitude évaluée au milieu de la cellule j. Notez que OA $\neq R' + z_{j+\frac{1}{2}}$.L'épaisseur des couches sphériques est Δz

Dans le triangle rectangle OAB :

$$\mathrm{OB}^2 = \mathrm{OA}^2 + \mathrm{AB}^2$$

Or,

$$\begin{cases} \mathrm{AB} = d_j \sin\theta \\ \mathrm{OA} - R = d_j \cos\theta \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{OB}^2 &= (d_j \cos\theta + R)^2 + (d_j \sin\theta)^2 \\
\mathrm{OB}^2 &= d_j^2 \cos^2\theta + 2R\cos\theta + R^2 + d_j^2 \sin^2\theta^2 \\
d_j^2 &+ 2d_j R\cos\theta + R^2 - (R+\Delta z)^2 = 0 \\
d_j^2 &+ 2d_j R\cos\theta + R^2 - 2R\Delta z - \Delta z^2 = 0
\end{aligned} \tag{C.1}$$

La résolution de (C.1) nous donne, pour seule solution physique :

$$d_j = R\left(\sqrt{\cos^2\theta + 2\frac{\Delta z}{R} + \frac{\Delta z^2}{R^2}} - \cos\theta\right) \tag{C.2}$$

Annexe D

Liste des publications

D.1 Hue et al. (2015a)

Article publié dans la revue Icarus intitulé :

"*2D photochemical modeling of Saturn's stratosphere. Part I : Seasonal variation of atmospheric composition without meridional transport*"

Icarus 257 (2015) 163–184

Contents lists available at ScienceDirect

Icarus

journal homepage: www.elsevier.com/locate/icarus

2D photochemical modeling of Saturn's stratosphere. Part I: Seasonal variation of atmospheric composition without meridional transport

V. Hue [a,b,*], T. Cavalié [c], M. Dobrijevic [a,b], F. Hersant [a,b], T.K. Greathouse [d]

[a] Université de Bordeaux, Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, UMR 5804, F-33270 Floirac, France
[b] CNRS, Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, UMR 5804, F-33270 Floirac, France
[c] Max Planck Institute for Solar System Research, Justus-von-Liebig-Weg 3, 37077, Göttingen, Germany
[d] Southwest Research Institute, San Antonio, TX 78228, United States

ARTICLE INFO

Article history:
Received 12 November 2014
Revised 31 March 2015
Accepted 1 April 2015
Available online 14 May 2015

Keywords:
Photochemistry
Saturn
Atmospheres, evolution

ABSTRACT

Saturn's axial tilt of 26.7° produces seasons in a similar way as on Earth. Both the stratospheric temperature and composition are affected by this latitudinally varying insolation along Saturn's orbital path. A new time-dependent 2D photochemical model is presented to study the seasonal evolution of Saturn's stratospheric composition. This study focuses on the impact of the seasonally variable thermal field on the main stratospheric C2-hydrocarbon chemistry (C_2H_2 and C_2H_6) using a realistic radiative climate model. Meridional mixing and advective processes are implemented in the model but turned off in the present study for the sake of simplicity. The results are compared to a simple study case where a latitudinally and temporally steady thermal field is assumed. Our simulations suggest that, when the seasonally variable thermal field is accounted for, the downward diffusion of the seasonally produced hydrocarbons is faster due to the seasonal compression of the atmospheric column during winter. This effect increases with increasing latitudes which experience the most important thermal changes in the course of the seasons. The seasonal variability of C_2H_2 and C_2H_6 therefore persists at higher-pressure levels with a seasonally-variable thermal field. Cassini limb-observations of C_2H_2 and C_2H_6 (Guerlet, S. et al. [2009]. Icarus 203, 214–232) are reasonably well-reproduced from the equator to 40° in both hemispheres in the 0.1–1 mbar pressure range. At lower pressure levels, the models only fit the Cassini observations in the northern hemisphere, from the equator to 40°N. Beyond 40° in both hemispheres, deviations from the pure photochemical predictions, mostly in the southern hemisphere, suggest the presence of large-scale stratospheric dynamics.

© 2015 Elsevier Inc. All rights reserved.

1. Introduction

Observations of Saturn in the infrared and millimetric range, performed by ISO or ground-based facilities gave us access to its disk-averaged stratospheric composition (see the review of Fouchet et al. (2009) for a complete list of observations), for which 1D photochemical models have done a fairly good job reproducing it (Moses et al., 2000a,b). Close-up observations, performed by the Voyager missions as well as recent ground-based observations, have unveiled variations with latitude of the temperature and the stratospheric composition (Ollivier et al., 2000a; Greathouse et al., 2005; Sinclair et al., 2014). The Cassini probe has now mapped (as a function of altitude and latitude) and monitored for almost 10 years, i.e., 1.5 Saturn season, the temperature and the main hydrocarbon emissions in Saturn's stratosphere (Howett et al., 2007; Fouchet et al., 2008; Hesman et al., 2009; Guerlet et al., 2009, 2010; Li et al., 2010; Fletcher et al., 2010; Sinclair et al., 2013, 2014).

We now have an impressive amount of data for which 1D photochemical models (e.g., Moses et al., 2000a,b, 2005; Ollivier et al., 2000b) have become insufficient in predicting the 3D properties of Saturn's stratosphere, especially in terms of dynamics (diffusion and advection). On the other hand, general circulation models (GCM) are being developed for Jupiter (Medvedev et al., 2013) and Saturn (Dowling et al., 2006, 2010; Friedson and Moses, 2012; Guerlet et al., 2014). Such models usually focus on dynamics and therefore are restricted in their description of the atmospheric chemistry as they are limited to only a few reactions, if any at all.

Liang et al. (2005) and Moses and Greathouse (2005) made the first attempts to construct latitude-altitude photochemical models for the giant planets, followed by Moses et al. (2007) who built a

* Corresponding author at: Université de Bordeaux, Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, UMR 5804, F-33270 Floirac, France. Tel.: +33 5 5777 6164.
E-mail address: Vincent.Hue@obs.u-bordeaux1.fr (V. Hue).

http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2015.04.001
0019-1035/© 2015 Elsevier Inc. All rights reserved.

2D-photochemical model for Saturn and who accounted for simple Hadley-type circulation cells as well as meridional diffusive transport. The quasi-two-dimensional model developed by Liang et al. (2005) does not fully account for the latitudinal transport as a diffusive correction is added at the end of the one-dimensional calculations. This model also does not account for evolution of the orbital parameters. Due to its very low obliquity, the seasonal effects on Jupiter should be mainly caused by its eccentricity and might be non negligible. On the other hand, the model developed by Moses and Greathouse (2005) accounts for the seasonal evolution of the orbital parameters as well as the variations in solar conditions. They have shown that, for Saturn, the seasonal effects on atmospheric composition are important, as Saturn's obliquity is slightly larger than the Earth's. Their model consists of a sum of 1D-photochemical model runs at different solar declinations and conditions. It does not include meridional transport processes nor the calculation of the actinic fluxes in 2D/3D. Saturn's high obliquity similarly impacts the stratospheric temperatures (Fletcher et al., 2010). This effect was accounted for by Moses and Greathouse (2005) in their photochemical model as part of a sensitivity case study, by locally warming their nominal temperature profile at two latitudes, according to the observations of Greathouse et al. (2005). In this sense, the photochemical model in Guerlet et al. (2010) represents an improvement from the previous model of Moses and Greathouse (2005) as it includes the latitudinal thermal gradient observed both by Fletcher et al. (2007) and Guerlet et al. (2009), but held constant with seasons. Finally, Moses et al. (2007) accounted for the meridional transport in a 2D-photochemical model, but similarly neglected the seasonal evolution of the stratospheric temperature. They were unable to reproduce the ground-based hydrocarbon observations prior to Cassini mission (Greathouse et al., 2005). After 10 years of Cassini measurements, data has shown that Saturn's stratospheric thermal structure is complex, with a 40 K pole-to-pole gradient after solstice (Fletcher et al., 2010), and thermal oscillations in the equatorial zone (Orton et al., 2008; Fouchet et al., 2008; Guerlet et al., 2011).

For the moment, there is no 2D photochemical model that simultaneously accounts for seasonal forcing, meridional transport and the evolution of the stratospheric temperature. In this paper, we present a new step toward this model, applied to Saturn. These latitudinally and seasonally variable 1D models, coupled by a 3D-radiative transfer model, can be seen as an intermediate class of model between the 1D photochemical models that have the most complete chemistries and the GCMs that are focused on 3D dynamics. In this paper, we present a restricted version of our full-2D model. The goal of this preliminary study is to evaluate the atmospheric chemical response to seasonal forcing in terms of solar radiation and atmospheric temperatures. The meridional transport is therefore set to zero for this study in order to focus on photochemical effects. In forthcoming papers we will focus on the effect of 2D advective and diffusive transport on the predicted abundances.

In the first part of this paper, we present in detail how the seasonally variable parameters are accounted for in the model, including Saturn's orbital parameters and the thermal field. Then, we describe the photochemical model, the chemical scheme used in that model and the 3D radiative transfer model used to calculate the attenuation of the UV radiation in the atmosphere. We afterwards describe the seasonal evolution of the chemical composition, first by assuming that the thermal field does not evolve with time and latitude, to compare with previous findings, then by considering a more realistic thermal field with spatio-temporal variations. We underline the effect of such thermal field variations on the chemical composition. Finally, we will compare our results with the Cassini/CIRS observations.

2. Seasonal modeling of the photochemistry

2.1. Introduction

The amount of solar radiation striking the top of the atmosphere at a given latitude varies with seasons because of Saturn's obliquity and eccentricity. Atmospheric heating occurs through methane near-IR absorption of this radiation. Cooling is preponderant in the mid-IR range, mainly through emissions from acetylene, ethane, and, to a lesser extent, methane (Yelle et al., 2001). These IR-emissions increase with increasing atmospheric temperatures and/or abundances of these compounds. Therefore, the temperature field, as a function of altitude and latitude, mostly depends on the seasonal distribution of these species and on their response to the seasonally varying insolation.

Methane, which is generally assumed to be well-mixed in Saturn's atmosphere (see e.g., Fletcher et al., 2009) and optically thick in its IR bands, can be used as a thermometer to constrain the thermal field (Greathouse et al., 2005). Asymmetries in Saturn's atmospheric temperatures have been observed as a function of season, from Voyager (Pirraglia et al., 1981; Hanel et al., 1981, 1982; Conrath and Pirraglia, 1983; Courtin et al., 1984) and ground-based observations (e.g., Gillett and Orton, 1975; Rieke, 1975; Tokunaga et al., 1978; Gezari et al., 1989; Ollivier et al., 2000a; Greathouse et al., 2005). These observations have been reproduced in an approximate sense by radiative transfer model predictions (Cess and Caldwell, 1979; Bézard et al., 1984; Bézard and Gautier, 1985).

The Cassini spacecraft arrived in Saturn's system in July 2004, shortly after its northern winter solstice (see Fig. 1). It has provided full-coverage of the temperatures for the upper troposphere and stratosphere ever since. It has given us the opportunity to observe seasonal changes in the temperature field for over 10 years. For instance, the North/South thermal asymmetry at the northern winter solstice has been observed: the southern hemisphere was experiencing summer and was found warmer than the northern one (Flasar et al., 2005; Howett et al., 2007; Fletcher et al., 2007). Subsequently, Cassini observed how the winter hemisphere evolves when emerging from the shadow of the rings and how the summer hemisphere cools down when approaching equinox (Fletcher et al., 2010; Sinclair et al., 2013).

The main driver for atmospheric chemistry comes from solar UV radiation. This radiation initiates a complex chemistry through methane photolysis leading to the production of highly reactive chemical radicals. The kinetics of the chemical reactions triggered by photolysis generally have a thermal dependence that can impact the overall production/loss rates of atmospheric constituents over the course of Saturn's long seasons.

Since we want to evaluate the atmospheric chemical response to seasonal forcing in terms of solar radiation and atmospheric temperatures, we thus compare the results of our model obtained in two different cases:

- The temperature field consists of a single profile applied to all latitudes and seasons in a similar way to previous 1D studies. This study case will be denoted (U)
- The temperature field is vertically, latitudinally and seasonally variable. This study case will be denoted (S)

We stress again that the latitudes are not connected in the following study, i.e., the meridional transport is set to zero, so as to better quantify the effects of a seasonally variable temperature field on the distribution of chemical species. We defer the study of meridional transport to a forthcoming paper.

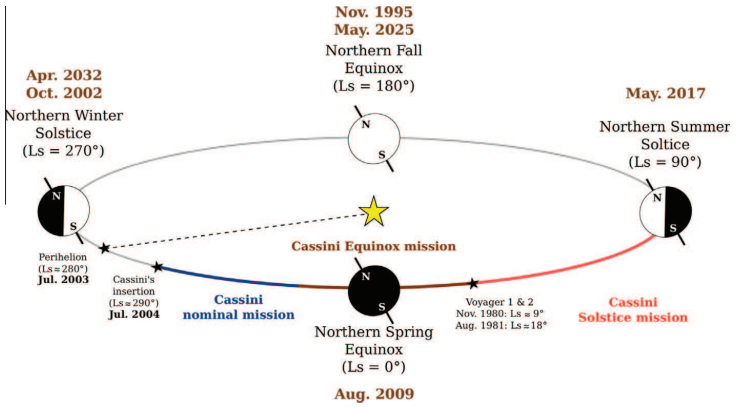

Fig. 1. Overview of Saturn's seasons. The position of Saturn on its orbit is defined by its heliocentric longitude (L_s). $L_s = 0°, L_s = 90°, L_s = 180°$ and $L_s = 270°$ correspond to Saturn's northern vernal equinox, summer solstice, autumnal equinox and winter solstice, respectively. The Cassini orbital insertion around Saturn occurred on July 1, 2004, shortly after the northern winter solstice (October 2002) and Saturn's perihelion (July 2003). Cassini's nominal, equinox and solstice missions are indicated. Voyager missions 1 and 2 flew by Saturn system on November 12, 1980 and on August 26, 1981, respectively, for their closest encounters.

2.2. Accounting for Saturn's eccentric orbit

Due to Kepler's second law, Saturn's southern summer is shorter and hotter than the northern one, as Saturn reaches its perihelion shortly after the southern summer solstice (see Fig. 2). In the present model, Saturn's elliptic orbit is sampled using a regularly spaced heliocentric longitude grid of 10°. From one orbital point to the next one, the integration time of the photochemical model is computed from the Kepler equation and Saturn's true anomaly. The true anomaly and heliocentric longitude are similar quantities, only differing by their relative origin, the former one being Saturn's perihelion whereas the latter being the Vernal equinox. The offset position in heliocentric longitude of Saturn's perihelion was set at 280.077° (Guerlet et al., 2014), a value based on J2000 parameters. Similarly to Moses and Greathouse (2005), integration over several orbits was needed for the simulations to converge down to the 100 mbar pressure level. Although the eddy diffusion coefficient profile as a function pressure was identical in every simulation, differences were found in the number of orbits required for convergence in the simulations depending on the thermal field. We will explain the reasons for these differences in Section 4.2.

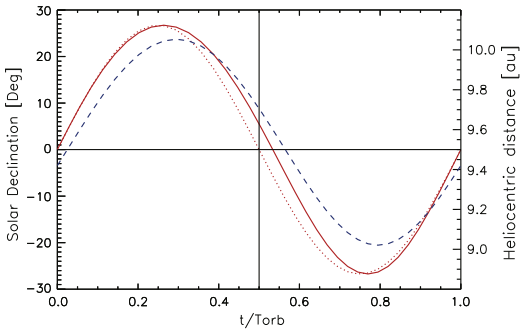

Fig. 2. Variation of solar declination (left scale) as a function of the orbital fraction, assuming Saturn's eccentricity (red solid line) and null eccentricity (red dotted line). The origin of the orbital fraction is taken at the northern spring equinox. The corresponding variation of the heliocentric distance (dashed line, right scale) is also plotted. Saturn's perihelion occurs shortly after the northern winter solstice. The solid vertical line at $t/T_{orb} = 0.5$ denotes the moment when the planet has spent half of its orbital period. At this point the subsolar point is still on the northern hemisphere, due to Saturn eccentricity. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

The variation of the solar declination as a function of the orbital fraction, starting from vernal equinox, is displayed in Fig. 2. As Saturn's perihelion occurs shortly after the southern summer solstice, the orbital fraction during which the subsolar point is on the northern hemisphere is longer than the opposite one. This is shown by the solid curve being shifted to the right, at orbital fraction of 0.5, with respect to the circular case (dotted line).

2.3. Temperature field

2.3.1. Spatially uniform thermal profile

In our first study case, the temperatures over the planet only vary with altitude and are constant with time and latitude, consistent with Moses and Greathouse (2005). We have taken the thermal profile that was used to obtain the reduced chemical scheme (Dobrijevic et al., 2011) we employ in our model. The temperatures below the 10^{-5} mbar pressure level come from a retrieval performed by Fouchet et al. (2008) on Cassini/CIRS data observed at a planetographic latitude of 20°S. Extrapolation to the upper stratosphere has been made using data from Smith et al. (1983) (see Fig. 4). This thermal profile is presented in Fig. 4. In what follows, we will refer to this case as the "spatially uniform" (U) temperature field case.

2.3.2. Seasonally variable thermal field

The second temperature field we considered comes from the seasonal radiative climate model of Greathouse et al. (2008), which has already been compared to Cassini/CIRS observations (Fletcher et al., 2010). This radiative transfer model takes into account heating and cooling from Saturn's major atmospheric compounds, i.e., CH_4, C_2H_2, and C_2H_6, as well as seasonal variation of Saturn's orbital parameters, i.e., solar declination, heliocentric distance and eccentricity. It also includes ring shadowing and accounts for Saturn's oblate shape. In this second study case, the temperature varies with altitude, latitude and time. This case will be referred to as the "seasonal" (S) temperature field case.

The seasonal thermal field used in this paper is shown in Fig. 3 as a function of planetocentric latitudes and heliocentric longitudes, and is presented for two pressure levels: 0.1 mbar and 10 mbar. Hereafter, all quoted latitudes are planetocentric, if not otherwise specified. The North–South asymmetry during the summer is caused by Saturn's eccentricity. The effects of ring shadowing are clearly observed at 0.1 mbar, around the solstices between 0° and 40° planetocentric latitude in the winter hemispheres. Time-lag between temperatures and seasons, due to the atmospheric thermal-inertia, can be seen at 10 mbar by the difference in temperature profile at 0.1 and 10 mbar. The thermal field has been computed by taking, as a first guess, the CH_4, C_2H_2 and C_2H_6 vertical distributions observed by Cassini (Guerlet et al., 2009) at planetographic latitude of 45°S and held fixed with time.

The temperature map predicted from the radiative climate model is calculated within the pressure range from 500 mbar to 10^{-6} mbar (Fletcher et al., 2010; Greathouse et al., 2008). Although the seasonal model of Greathouse et al. (2008) extends down to 500 mbar, temperatures are only accurate to 10 mbar as this model was created primarily to model the stratosphere. At lower altitudes, the model lacks aerosol absorption and scattering and convective adjustment. Due to this lack of aerosols, the tropospheric temperatures are lower by 5–15 K than measured by Cassini. We note this discrepancy, but are focused on understanding effect of temperature on stratospheric photochemistry occur at altitudes above the 10 mbar level where the physics are self consistent. Below the 500 mbar level we extrapolate the temperature assuming a dry adiabatic lapse rate, using a specific heat of c_p = 10,658 J kg^{-1} K^{-1} (Irwin, 2006) and a latitude-dependent gravity field (see Supplementary Materials of Guerlet et al., 2014). Above 10^{-3} mbar, where non-LTE effects dominate, the temperature was held constant, and no thermosphere is assumed above the stratosphere in this model. The lowest pressure level in our grid is set in order to ensure that each monochromatic optical depth is smaller than 1 in the UV at the top of the atmosphere. Fig. 4 displays the resulting temperature profiles at 4 latitudes: 80°S (upper-left panel), 60°S (upper-right panel), 40°S (lower left panel) and the equator (lower right panel). The colored solid lines represent the atmospheric temperatures inferred from the radiative climate model at solstices and equinoxes and the reconstruction procedure described above.

2.3.3. Thermal evolution

The first case studied in this paper, namely the spatially uniform thermal field does not require special care on how the pressure–altitude background is treated, as it remains constant all along the year. However, when the temperature changes, i.e., in the case of a seasonally variable thermal field, the pressure–altitude background also changes and has to be handled carefully.

Two ways of dealing with changes in the atmospheric pressure–temperature background in photochemical modeling exist. Either the altitude grid is held constant and the pressure varies with temperature, or the pressure grid is held constant and the altitude grid is free to contract or expand (e.g., Agúndez et al., 2014). Since the two approaches are self-consistent, we have chosen to hold the altitude grid constant and let the pressure grid vary with temperature.

This choice has been made to allow two latitudinally-contiguous numerical cells to exchange material through their common boundary, for future 2D-modeling including circulation and meridional advection.

The altitude-temperature grid at all latitudes and heliocentric longitudes is built assuming hydrostatic equilibrium. Variations in scale height due to Saturn's latitudinally and altitudinally-dependent gravity field and variations in the mean molecular mass in the upper atmosphere due to molecular diffusion are included when solving the hydrostatic equilibrium equation. The latitudinal-dependency adopted here follows the prescription of Guerlet et al. (2014). We have made sure that the pressure–temperature background using this prescription is consistent with the latitudinally dependent gravitational field published by Lindal et al. (1985) and combined with the Voyager 2 zonal wind measurements (Smith et al., 1982; Ingersoll and Pollard, 1982).

The effect on the pressure–altitude grid can be large as shown in Fig. 5, which presents this grid for 80°N at the equinoxes and solstices. Solid and dashed lines respectively represent this grid when the latitudinally-dependent gravity is included and when considering a constant surface gravity, set to the equatorial one. The pressure–altitude grid of the uniform model (see Section 2.3.1) is also shown (black solid line) for comparison. Differential surface gravity due to Saturn's high rotation rate results in more contracted atmospheric columns at polar latitudes. Hence, at the same altitude level, the pressure is lower at the poles relative to the equator when considering variable surface gravity. At a given latitude, the column also expands or contracts with temperature as shown in Fig. 5. This example at 80°N is extreme as the amplitude of the temperature variation with season is maximum at polar latitudes. The seasonal variation of the pressure–altitude grid is damped toward the equator, as the seasonal thermal gradient is reduced in this region.

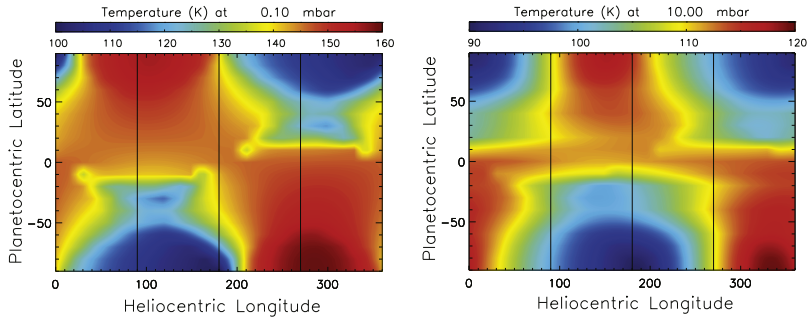

Fig. 3. Seasonal temperature field inferred from the radiative climate model of Greathouse et al. (2008) as a function of planetocentric latitude and heliocentric longitude. The temperature variation at 0.1 mbar is twice as large as that at 10 mbar due to the increase in thermal inertia with depth in the atmosphere (note the color range is stretched differently for the two plots). Left panel: Temperatures at 0.1 mbar. Right panel: Temperatures at 10 mbar. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

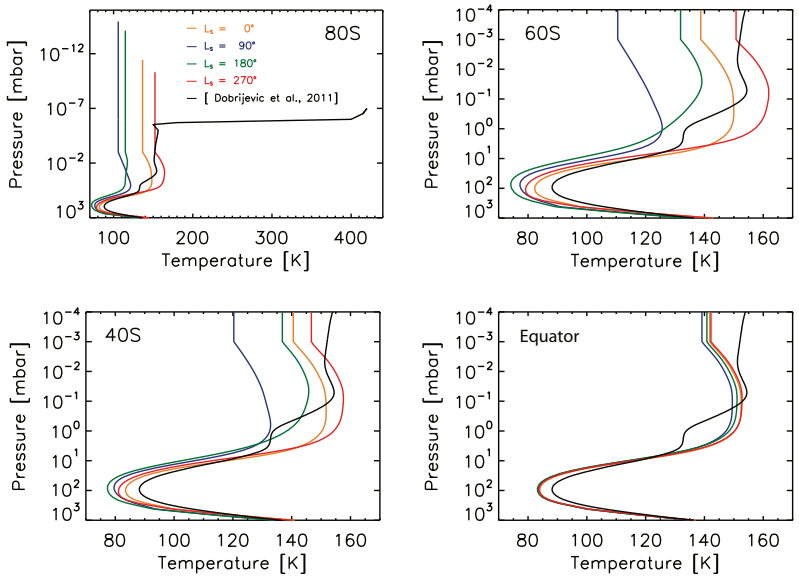

Fig. 4. Temperature profiles used in this work as a function of pressure. The colored lines depict the seasonally variable thermal field (S) predicted from the radiative climate model at the solstices and equinoxes, for 4 latitudes: 80°S (upper-left panel), 60°S (upper-right panel), 40°S (lower left panel) and the equator (lower left panel). $L_s = 0°$, 90°, 180° and 270° correspond to northern fall equinox, summer solstice, spring equinox and winter solstice, respectively (see Fig. 1). The black solid lines display the spatially uniform thermal field (U) we consider in this work. This profile comes from Cassini/CIRS observations (Fouchet et al., 2008) and Voyager 2 observations (Smith et al., 1983) (see text for details). (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

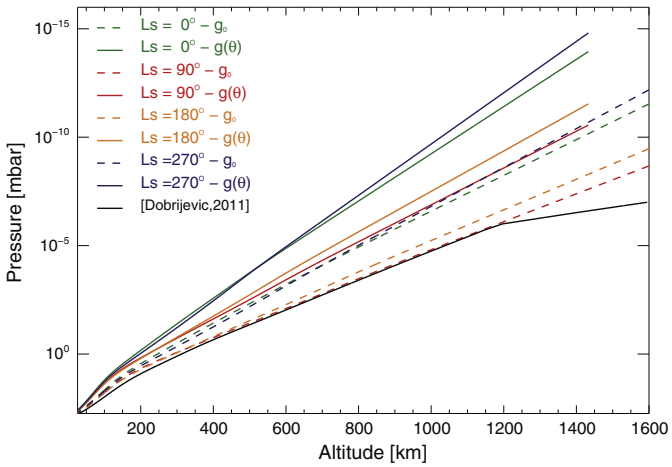

Fig. 5. Pressure–altitude grid at 80°N for the solstices and equinoxes, assuming a constant surface gravity (dashed colored lines) and a latitudinally-variable surface gravity (solid colored lines). $L_s = 0°$, 90°, 180° and 270° correspond to northern fall equinox, summer solstice, spring equinox and winter solstice, respectively (see Fig. 1). 0 km is equal to the 1 bar level. The black solid line represents the pressure–altitude grid of the uniform temperature profile. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

In the present paper, we have chosen to work with a common altitude grid for all latitudes and seasons that start at a common origin ($z = 0$ km and $P = 1$ bar). Above that origin, the pressure grid expands or contracts according to temperature changes. The mole fraction vertical profiles of the model species are expressed as a function of pressure and thus follow the same contraction/expansion as the pressure grid. Therefore, each time the temperature/pressure grid changes, the mole fraction profiles are interpolated onto the new pressure grid.

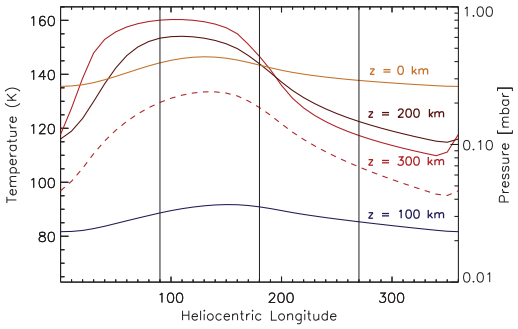

Fig. 6. Seasonal evolution of temperature (left scale, solid lines) and pressure (right scale, dashed line) at altitudes of 300 km (red lines), 200 km (brown), 100 km (blue) and 0 km (orange). The quantities are presented for a planetocentric latitude of 80°N, where the variations are most noticeable. The black solid lines indicate the position of the solstices and equinoxes (see Fig. 1). (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

It is instructive to represent the seasonal evolution of the temperature and pressure at a given latitude for a few altitude levels (see Fig. 6 for an illustration at 80°N). When the temperature rises, the atmospheric column expands, and the associated pressure at the same altitude increases. It should be noted that temperature and pressure are not totally in phase, as the pressure at a given altitude depends on the thermodynamical conditions of the altitude levels underneath. Therefore the temperature at a few altitude levels below the considered altitude are presented on the same figure. We note that the increase in the pressure at 300 km is in phase with the temperature changes at altitude levels below that level.

3. Latitudinally and seasonally variable 1D models

3.1. General description

In an atmosphere, the spatio-temporal distribution of each species' number density is governed by the continuity-transport equation, that is:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = P_i - n_i L_i - \nabla \cdot (\Phi_i) \quad (1)$$

where n_i (cm^{-3}) is the number density, P_i ($cm^{-3}\,s^{-1}$) the (photo) chemical production rate, L_i (s^{-1}) the (photo) chemical loss rate and Φ_i ($cm^{-2}\,s^{-1}$) is the particle flux due to transport. Longitudinal mixing timescales appear to be relatively short in Jupiter's atmosphere (e.g., Banfield et al., 1996) and deviations from the mean zonal temperatures are limited (Flasar et al., 2004). We assume the situation is similar at Saturn and we thus do not consider longitudinal variability in this study. The continuity equation is then solved on a 2D altitude-latitude spherical grid. We use a 13 km altitude grid resolution, in order to have at least 3 altitudinal numerical cells per scale height at all times throughout the year. The planet radius considered here is Saturn's mean radius, $R = 58{,}210$ km (Guillot, 2005), which corresponds to the altitude level $z = 0$ km. The flux Φ_i includes transport processes in the vertical and the meridional directions.

Taking these mixing processes into account at all scales and in detail would require a full hydrodynamical model, which is beyond the scope of this work. In our model, the physical processes that are accounted for through the vertical flux Φ_i^z, are eddy diffusion, molecular diffusion and vertical advection. This flux is expressed as:

$$\Phi_i^z = -D_i n_i \left(\frac{1}{y_i}\frac{\partial y_i}{\partial z} + \frac{1}{H_i} - \frac{1}{H}\right) - K_{zz} n_i \left(\frac{1}{y_i}\frac{\partial y_i}{\partial z}\right) + v_i^z n_i \quad (2)$$

where y_i is the mole fraction of species i, defined as the ratio between the number density of i over the total number density. H_i and H (cm) are respectively the specific and the mean density scale height, D_i ($cm^2\,s^{-1}$) the molecular diffusion coefficient, K_{zz} ($cm^2\,s^{-1}$) the vertical eddy diffusion coefficient and v_i^z ($cm\,s^{-1}$) the vertical wind. The numerical scheme used in this study is similar to the one used by Agúndez et al. (2014) in their pseudo-2D photochemical model except that we use an upwind scheme to treat the advective part of the molecular diffusion (Godunov, 1959). The meridional flux Φ_i^θ is set to zero for the current study.

The vertical eddy diffusion coefficient K_{zz} is a free parameter in the model to account for mixing processes caused by dynamics occurring at every scale. This parameter may vary with altitude and latitude, but our knowledge for giant planet stratospheres is very limited (see for instance Moreno et al., 2003 and Liang et al., 2005). This coefficient is related to the small-scale waves and is therefore expected to be influenced by the atmospheric number density (Lindzen, 1971, 1981). Consequently, 2D/3D models will probably have to account for its latitudinal and longitudinal variability. In this study, we consider that K_{zz} is fixed with respect to the pressure coordinate. Due to the lack of constraint on that parameter, we consider this does not vary with latitude. The reduced chemical scheme we use has been obtained using the K_{zz} profile of Dobrijevic et al. (2011). Therefore, we consistently take their K_{zz}. The molecular diffusion coefficient we adopt is based on experimental measurements of binary gas diffusion coefficients (Fuller et al., 1966, 1969). As a first step in this study, we set K_{yy}, v^z and v^θ to zero. These parameters will be studied in a forthcoming paper, either by trying to fit them from the observations or by testing outputs of the yet-to-be-finalized GCM of Guerlet et al. (2014).

At the lower boundary of the model (i.e., 1 bar), the H_2 and He mole fractions are set to 0.8773 and 0.118, respectively (Conrath and Gautier, 2000). The methane mole fraction was set to 4.7×10^{-3} according to recent Cassini/CIRS observations (Fletcher et al., 2009). At this boundary, all other compounds diffuse down to the lower troposphere at their maximum diffusion velocity, i.e., $v = -K_{zz}(0)/H(0)$. At the upper boundary of the model, all fluxes are set to zero except for atomic hydrogen. Following Moses et al. (2005), we set its influx to $\Phi_H = 1.0 \times 10^8$ $cm^{-2}\,s^{-1}$ at all latitudes.

3.2. Chemical scheme

In typical 1D photochemical models, the chemical schemes contain as many reactions as possible, i.e., usually hundreds, and numerous species. This makes it extremely difficult for current computers to solve Eq. (1) in a reasonable time when extending such models to 2D or 3D. Dobrijevic et al. (2011) have developed an objective methodology to reproduce the chemical processes for a subset of compounds of interest (usually observed compounds) with a limited number of reactions. These are extracted from a more complete chemical scheme by running a 1D photochemical model and applying propagation of uncertainties on chemical rates and a global sensitivity analysis.

Uncertainties in the chemical rate constants are a critical source of uncertainty in photochemical model predictions (Dobrijevic and Parisot, 1998), as chemical schemes generally include tens to hundreds of chemical compounds, non-linearly coupled in even more reactions. Propagating uncertainties on each chemical reaction, using a Monte Carlo procedure for instance, can lead to several orders of magnitude in uncertainty (Dobrijevic et al., 2003). By computing correlations between reaction rate uncertainties and photochemical model predictions, Dobrijevic et al. (2010a,b)

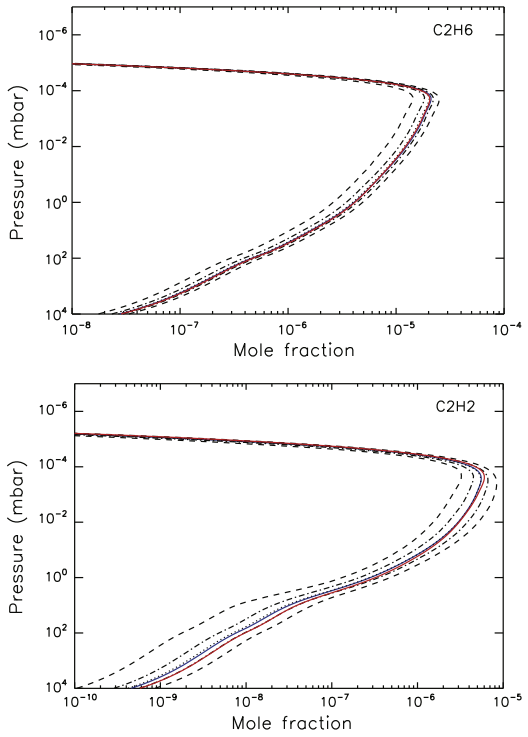

Fig. 7. Red solid line: C_2H_6 (top panel) and C_2H_2 (botom panel) vertical profile with the reduced chemical scheme. Blue line: nominal vertical profile obtained using the initial chemical scheme. Black dotted line: median profile of the full-scheme distribution. Black dashed-dotted lines: 5th and 15th 20-quantiles of the full-scheme distribution. Black dashed lines: 1st and 19th 20-quantiles of the full-scheme distribution. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

Table 1
List of the 22 chemical compounds included in the scheme.

He; H; H_2
CH; C; $^1CH_2$; $^3CH_2$; CH_3; CH_4
C_2H; C_2H_2; C_2H_3; C_2H_4; C_2H_5; C_2H_6
$O(^3P)$; $O(^1D)$; OH; H_2O
CO; CO_2; H_2CO

developed a global sensitivity analysis methodology to identify key reactions in chemical schemes. These reactions have a major impact on the results, either because their uncertainty is intrinsically high, or because they significantly contribute in the production/loss terms of the compound of interest (or one of the compounds related to it).

A reaction that has a low degree of significance means that changing its rate constant (within its uncertainty range) does not significantly change the results of the model, or well inside the model error bars. Building a reduced network then consists in removing reactions, and thus compounds once they are no longer linked by reactions, that have a very low degree of significance. The results stay very close to the median profile of the full chemical scheme for the remaining compounds.

A reduced chemical scheme is valid when it agrees with the full chemical scheme, given the uncertainties of each chemical compound profile. The initial scheme we consider includes 124 compounds, 1141 reactions and 172 photodissociation processes and comes from Loison et al. (2015). The compounds we have selected to build the reduced chemical scheme are the ones monitored by Cassini/CIRS and most relevant regarding stratospheric heating and cooling: CH_4, C_2H_2, and C_2H_6 (Guerlet et al., 2009; Sinclair et al., 2013). We based our reduction scheme on the model validation performed for Saturn's hydrocarbons by Cavalié et al. (2015). C_2H_2, and C_2H_6 vertical profiles using the reduced chemical scheme are in good agreement with the full chemical scheme results (Fig. 7). The reduced scheme produces vertical profiles that are within the 5th and 15th of the full-scheme 20-quantiles distribution for C_2H_6 at all pressure levels and for C_2H_2 above 10 mbar. Below 10 mbar, the C_2H_2 vertical profile is almost superimposed to the 15th 20-quantiles of the distribution.

Three main oxygen compounds have also been added to the reduced scheme which are present in Saturn's stratosphere (H_2O, CO, and CO_2) as ground work for a forthcoming paper on the spatial distribution of H_2O, following observations by Herschel (Hartogh et al., 2009, 2011). The oxygen species will not be used in the present study and will not be presented nor discussed any further. In the end, the reduced scheme used in the present study includes 22 compounds, 33 reactions, and 24 photodissociations, listed in Table 1. Such a reduced chemical scheme enables extending photochemical computations to 2D/3D. The chemical reaction rates and the photochemical reactions of the reduced chemical network are respectively listed in Table 2 and Table 3.

3.3. Actinic flux

The knowledge of the solar UV flux at any latitude/altitude/season is required to properly compute photodissociation coefficients. We use a full-3D spherical line-by-line radiative transfer model, improved over the model initially developed by Brillet et al. (1996), to account for the attenuation of solar UV in the atmosphere. It now accounts for the full 3D distribution of absorbers instead of assuming vertically homogeneous distributions in latitude and longitude as in Brillet et al. (1996). However, as stated previously, we consider here a zonally mixed atmosphere and limit variability to altitude and latitude. Absorption is formally calculated by the exact computation of the optical path. Rayleigh diffusion is also accounted for using single photon ray tracing in a Monte Carlo procedure. The wavelengths considered here range from 10 nm to 250 nm, because the hydrocarbons considered in this study do not substantially absorb beyond these limits. The radiative transfer procedure uses the altitude-latitude absorption and diffusion coefficients, extrapolated onto a 3D atmosphere assuming zonal homogeneity. Correspondence between subsolar and planetocentric coordinates is then made assuming Saturn's orbital parameters at the moment of the Kronian year, i.e., when the altitude-latitude-longitude actinic flux needs to be computed. Saturn's ellipsoidal shape is not taken into account, while the elliptical orbit is. The elliptical orbit causes a peak in actinic flux during southern summer.

The daily-averaged actinic flux ($W\,m^{-2}$) at the top of the atmosphere is shown in Fig. 8. Actinic flux, unlike solar insolation, does not refer to any specifically oriented collecting surface. This is a fundamental quantity for photochemistry, since we consider that molecules do not preferentially absorb radiation with respect to any particular orientation in space. This quantity is therefore not corrected by the cosine of the incident angle, unlike insolation. From this 3D actinic flux, the daily-averaged insolation is computed. As a comparison with Figs. 8 and 9 presents the daily-averaged solar insolation ($W\,m^{-2}$) received by a horizontal unit surface in Saturn's atmosphere. Following Moses and Greathouse (2005), we use a solar constant of 14.97 $W\,m^{-2}$ for

Table 2
List of reactions of the reduced network (references can be found in Loison et al. (2015)). $k(T) = \alpha \times (T/300)^{\beta} \times \exp(-\gamma/T)$ in cm^3 $molecule^{-1}$ s^{-1} or cm^6 $molecule^{-1}$ s^{-1}. $k_{adduct} = (k_0[M]F + k_r)k_\infty/k_0[M] + k_\infty$ with $\log(F) = \log(F_c)/1 + \left[\log(k_0[M] + k_{capture})/N\right]^2$, $F_c = 0.60$ and $N = 1$. Please refer to Hébrard et al. (2013) for details about the semi-empirical model.

	Reactions		Rate coefficients
R1	H + CH	→ C + H_2	$1.24 \times 10^{-10} \times (T/300)^{0.26}$
R2	H + $^3CH_2$	→ CH + H_2	$2.2 \times 10^{-10} \times (T/300)^{0.32}$
R3	H + $^3CH_2$	→ CH_3	$k_0 = 3.1 \times 10^{-30} \times \exp(457/T)$
			$k_\infty = 1.5 \times 10^{-10}$
			$k_r = 0$
R4	H + CH_3	→ CH_4	$k_0 = 8.9 \times 10^{-29} \times (T/300)^{-1.8} \times \exp(-31.8/T)$
			$k_\infty = 3.2 \times 10^{-10} \times (T/300)^{0.133} \times \exp(-2.54/T)$
			$k_r = 1.31 \times 10^{-16} \times (T/300)^{-1.29} \times \exp(19.6/T)$
R5	H + C_2H_2	→ C_2H_3	$k_0 = 2.0 \times 10^{-30} \times (T/300)^{-1.07} \times \exp(-83.8/T)$
			$k_\infty = 1.17 \times 10^{-13} \times (T/300)^{8.41} \times \exp(-359/T)$
			$k_r = 0$
R6	H + C_2H_3	→ C_2H_2 + H_2	6.0×10^{-11}
R7	H + C_2H_3	→ C_2H_4	$k_0 = 3.47 \times 10^{-27} \times (T/300)^{-1.3}$
			$k_\infty = 1.0 \times 10^{-10}$
			$k_r = 0$
R8	H + C_2H_4	→ C_2H_5	$k_0 = 1.0 \times 10^{-29} \times (T/300)^{-1.51} \times \exp(-72.9/T)$
			$k_\infty = 6.07 \times 10^{-13} \times (T/300)^{-5.31} \times \exp(174/T)$
			$k_r = 0$
R9	H + C_2H_5	→ C_2H_6	$k_0 = 2.0 \times 10^{-28} \times (T/300)^{-1.5}$
			$k_\infty = 1.07 \times 10^{-10}$
			$k_r = 0$
R10	H + C_2H_5	→ CH_3 + CH_3	$k_0 = k_\infty - k_{adduct}$
R11	C + H_2	→ $^3CH_2$	$k_0 = 7.0 \times 10^{-32} \times (T/300)^{-1.5}$
			$k_\infty = 2.06 \times 10^{-11} \times \exp(-57/T)$
			$k_r = 0$
R12	CH + H_2	→ CH_3	$k_0 = 6.2 \times 10^{-30} \times (T/300)^{-1.6}$
			$k_\infty = 1.6 \times 10^{-10} \times (T/300)^{-0.08}$
			$k_r = 0$
R13	CH + CH_4	→ C_2H_4 + H	$1.05 \times 10^{-10} \times (T/300)^{-1.04} \times \exp(-36.1/T)$
R14	$^1CH_2$ + H_2	→ $^3CH_2$ + H_2	$1.6 \times 10^{-11} \times (T/300)^{-0.9}$
R15	$^1CH_2$ + H_2	→ CH_3 + H	$8.8 \times 10^{-11} \times (T/300)^{0.35}$
R16	$^3CH_2$ + H_2	→ CH_3 + H	$8.0 \times 10^{-12} \times \exp(-4500/T)$
R17	$^3CH_2$ + CH_3	→ C_2H_4 + H	1.0×10^{-10}
R18	$^3CH_2$ + C_2H_3	→ C_2H_2 + CH_3	3.0×10^{-11}
R19	$^3CH_2$ + C_2H_5	→ C_2H_4 + CH_3	3.0×10^{-11}
R20	CH_3 + CH_3	→ C_2H_6	$k_0 = 1.8 \times 10^{-26} \times (T/300)^{-3.77} \times \exp(-61.6/T)$
			$k_\infty = 6.8 \times 10^{-11} \times (T/300)^{-0.359} \times \exp(-30.2/T)$
			$k_r = 0$
R21	C_2H + H_2	→ C_2H_2 + H	$1.2 \times 10^{-11} \times \exp(-998/T)$
R22	C_2H + CH_4	→ C_2H_2 + CH_3	$1.2 \times 10^{-11} \times \exp(-491/T)$
R23	C_2H_3 + H_2	→ C_2H_4 + H	$3.45 \times 10^{-14} \times (T/300)^{2.56} \times \exp(-2530/T)$
R24	C_2H_3 + CH_4	→ C_2H_4 + CH_3	$2.13 \times 10^{-14} \times (T/300)^{4.02} \times \exp(-2750/T)$
R25	O(^{3}P) + CH_3	→ CO + H_2 + H	2.9×10^{-11}
R26	O(^{3}P) + CH_3	→ H_2CO + H	1.1×10^{-10}
R27	O(^{3}P) + C_2H_5	→ OH + C_2H_4	3.0×10^{-11}
R28	O(^{1}D) + H_2	→ OH + H	1.1×10^{-10}
R29	OH + H_2	→ H_2O + H	$2.8 \times 10^{-12} \times \exp(-1800/T)$
R30	OH + CH_3	→ H_2O + $^1CH_2$	3.2×10^{-11}
R31	OH + CH_3	→ H_2CO + H_2	8.0×10^{-12}
R32	OH + CO	→ CO_2 + H	1.3×10^{-13}
R33	H_2CO + C	→ CO + $^3CH_2$	4.0×10^{-10}

these calculations. In both figures, the effect of Saturn's elliptical orbit is obvious. Since Saturn reaches its perihelion shortly after the summer solstice, the amount of solar flux is more important at this time. The dark blue areas in the winter hemispheres indicate polar nights.

Ring shadowing effects due to the A–B–C rings and to the Cassini division are also included. Brinkman and McGregor (1979) and Bézard (1986) have first calculated ring shadowing in atmospheric models, however we adopt the prescription of Guerlet et al. (2014), which is more suited for implementation in our photochemical model. This method calculates whether or not a point on the planet at a given latitude and longitude is under the shadow of the rings. If this is the case, the solar flux at this point is reduced by the ring opacity. We adopt the normal opacity profile of the rings from Guerlet et al. (2014), which is based on more than 100 stellar occultations measured by the UVIS instrument aboard Cassini (Colwell et al., 2010). Finally, these normal opacities are corrected to account for the incidence angle of radiation over the rings. Diffusion effects from the ring are not included. We account for the latitudinal extent of the numerical cells in our calculations. Here we present results from simulations that use 10°-wide latitudinal cells. Therefore, the ring occultation is averaged over these 10°-wide cells. Each of

Table 3
Photodissocation processes (references can be found in Loison et al., 2015).

	Photodissociations	
R34	$OH + h\nu$	$\rightarrow O(^1D) + H$
R35	$H_2O + h\nu$	$\rightarrow H + OH$
R36		$\rightarrow H_2 + O(^1D)$
R37		$\rightarrow H + H + O(^3P)$
R38	$CO + h\nu$	$\rightarrow C + O(^3P)$
R39	$CO_2 + h\nu$	$\rightarrow C + O(^1D)$
R40		$\rightarrow CO + O(^3P)$
R41	$H_2 + h\nu$	$\rightarrow H + H$
R42	$CH_4 + h\nu$	$\rightarrow CH_3 + H$
R43		$\rightarrow {}^1CH_2 + H + H$
R44		$\rightarrow {}^1CH_2 + H2$
R45		$\rightarrow {}^3CH_2 + H + H$
R46		$\rightarrow CH + H_2 + H$
R47	$CH_3 + h\nu$	$\rightarrow {}^1CH_2 + H$
R48	$C_2H_2 + h\nu$	$\rightarrow C_2H + H$
R49	$C_2H_3 + h\nu$	$\rightarrow C_2H_2 + H$
R50	$C_2H_4 + h\nu$	$\rightarrow C_2H_2 + H_2$
R51		$\rightarrow C_2H_2 + H + H$
R52		$\rightarrow C_2H_3 + H$
R53	$C_2H_6 + h\nu$	$\rightarrow C_2H_4 + H_2$
R54		$\rightarrow C_2H_4 + H + H$
R55		$\rightarrow C_2H_2 + H_2 + H_2$
R56		$\rightarrow CH_4 + H_2 + H_2$
R57		$\rightarrow CH_3 + CH_3$

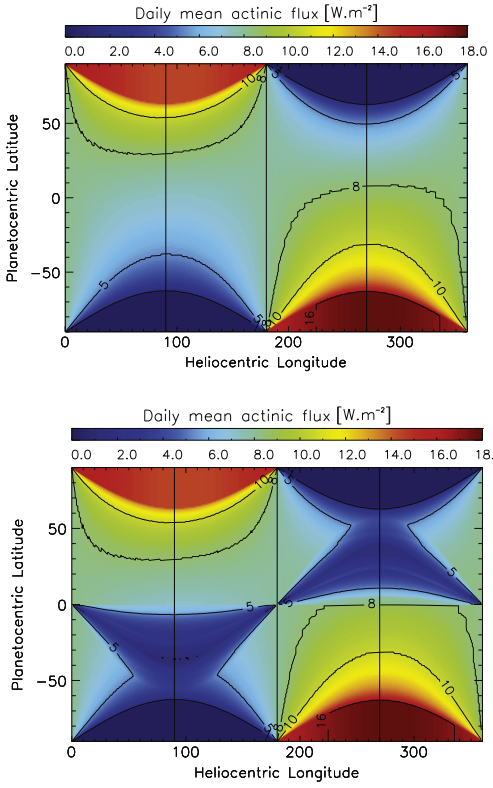

Fig. 8. Daily mean actinic flux in ($W\,m^{-2}$) as a function of planetocentric latitude and heliocentric longitude. Ring shadowing is included in the lower panel. The black solid lines indicate the position of the solstices and equinoxes (see Fig. 1). (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

the 10°-wide cells have been sampled over 0.1°-wide sub-cell. The effect of ring shadowing can be seen at mid latitudes in the winter hemispheres in Figs. 8 and 9.

4. Results

In this section, we first present results from our photochemical model using the spatially uniform thermal field (U) described in Section 2.3.1 in order to compare with existing models (Moses and Greathouse, 2005). We detail the variability in hydrocarbon abundances as a function of altitude/latitude/time only due to the variation of the heliocentric distance of Saturn and of the latitude of the sub-solar point. Then, we give a brief overview of the influence of the rings on chemistry. Finally, we present the effect induced by the seasonal temperature field (S) and compare the results with the spatially uniform case. The interest here lies in the fact that we first present photochemical results using a simple test-case, i.e., a spatio-temporally uniform case previously studied (Moses and Greathouse, 2005), before adding more complexity by considering a more realistic thermal field.

4.1. Seasonal variability with the spatially uniform thermal field

We present here the results from seasonal simulations using the spatially uniform (U) temperature field, with an emphasis on

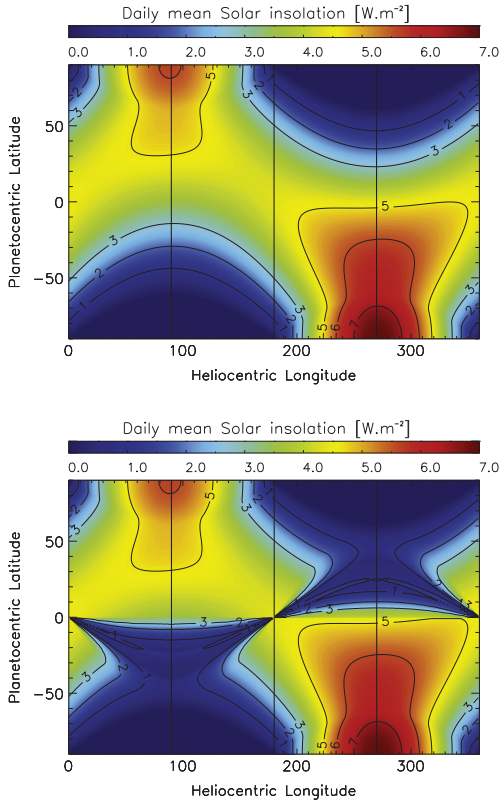

Fig. 9. Daily mean insolation in ($W\,m^{-2}$) as a function of planetocentric latitude and heliocentric longitude (i.e., seasons) received by a horizontal unit surface in Saturn's atmosphere. Ring shadowing is included in the lower panel. The black solid lines indicate the position of the solstices and equinoxes (see Fig. 1).

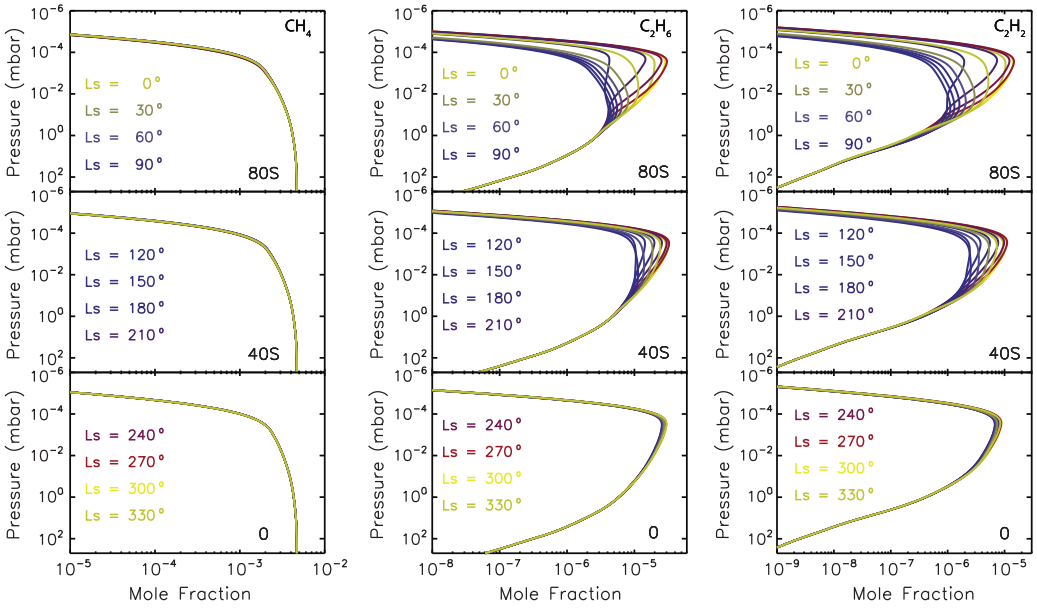

Fig. 10. Seasonal evolution of CH_4 (left), C_2H_6 (center) and C_2H_2 (right) vertical profiles computed for the whole Kronian year (360° in heliocentric longitude using a 30° step). Three latitudes are presented: 80°S (top), 40°S (middle) and the equator (bottom). CH_4 does not show any strong seasonal variability, even at high latitudes. Its shape is controlled by vertical mixing rather than photolysis (Romani and Atreya, 1988). The seasonal variability on C_2H_6 and C_2H_2 is clearly seen at low-pressure levels and high latitudes due to the large insolation variation at such latitudes over one Kronian year. The (U) thermal field has been used for these calculations.

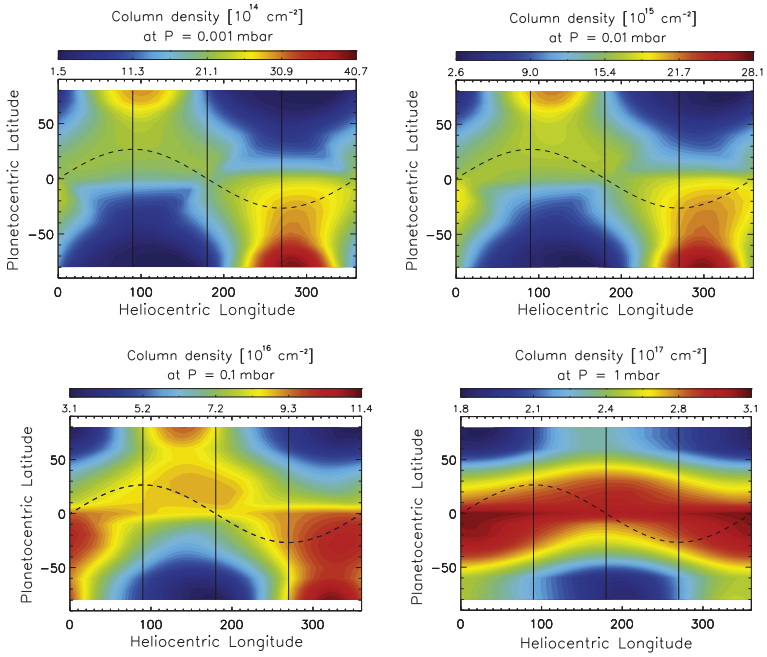

Fig. 11. C_2H_2 column density (cm^{-2}) above 10^{-3} mbar (top left), 10^{-2} mbar (top right), 0.1 mbar (bottom left), and 1 mbar (bottom right). Ring shadowing is clearly seen around the winter solstice in the winter hemisphere. The solid line indicate the solstices and equinoxes, while the dashed line indicates the position of the subsolar point along the year. The North–South asymmetry between the summer hemispheres is caused by Saturn's eccentricity, its perihelion occurring shortly after the southern summer solstice. In both summer hemispheres, after the summer solstice, the C_2H_2 column densities reach a maximum which is shifted in time with respect to the maximum insolation level, i.e., at the solstice itself.

methane, ethane and acetylene as they are the most important compounds with respect to the radiative heating/cooling of the atmosphere (Yelle et al., 2001).

4.1.1. Methane (CH_4), ethane (C_2H_6) and acetylene (C_2H_2)

The vertical profiles of CH_4, C_2H_6, and C_2H_2, using the spatially uniform temperature field, are displayed in Fig. 10.

CH_4 does not exhibit strong seasonal variations, as eddy mixing and molecular diffusion, rather than photolysis, are the major processes controlling the shape of its vertical distribution (Romani and Atreya, 1988). Indeed, due to its relatively high abundance, CH_4 is never depleted enough to show seasonal variations.

The seasonal variability on C_2H_6 is clearly seen at low-pressure levels. The shape of its vertical profile is mostly governed by reaction R20 ($CH_3 + CH_3 \rightarrow C_2H_6$). Methyl is produced from the CH_4 photolysis around 10^{-4} mbar. At higher pressures, C_2H_6 is mostly in diffusive equilibrium (see Zhang et al., 2013 for instance) and its shape is governed by the slow diffusion of C_2H_6 produced at lower pressure levels. The seasonal variability of this compound is correlated with insolation and is therefore maximum around the poles.

C_2H_2 shows a seasonal variability similar to C_2H_6, with some differences around the 1 mbar pressure level, because C_2H_2 has substantial production at this pressure level by reactions R21 ($C_2H + H_2 \rightarrow C_2H_2 + H$) and R6 ($H + C_2H_3 \rightarrow C_2H_2 + H_2$), and depletion by R48 ($C_2H_2 + h\nu \rightarrow C_2H + H$) and R5 ($H + C_2H_2 \rightarrow C_2H_3$).

4.1.2. Evolution of the C_2H_2 column density

The C_2H_2 column densities computed for pressures lower than 10^{-3} mbar, 10^{-2} mbar, 0.1 mbar and 1 mbar are presented in Fig. 11, as a comparison with Fig. 8 of Moses and Greathouse (2005). The results concerning the temporal evolution of this column density are in good agreement. The differences in the column density absolute values can be attributed to differences in the temperature/pressure background, the eddy diffusion profile or the chemical network. At 10^{-3} mbar, an asymmetry between northern and southern summer solstices is caused by Saturn's eccentricity. The maximum value in column density is reached around the southern summer pole, shortly after the southern summer solstice, at $L_s \approx 280°$. The signature of the rings is clearly visible at low latitudes near the solstices in the winter hemisphere. The amount of radicals (and therefore chemical compound produced from radicals) is reduced (see for instance Edgington et al., 2012) due to the partial absorption of the UV radiation by Saturn's rings. At higher pressure levels, the ring signature is damped, and disappears almost completely at 0.1 mbar. From that pressure level to higher ones, the abundance of C_2H_2 is mainly controlled by the downward diffusion of C_2H_2 produced at lower pressure levels. Therefore, from that pressure level, the column density features (e.g., maxima and minima) are increasingly phase-lagged with increasing pressure. These plots also show that the maximum value of the C_2H_2 column density is shifted from high latitudes to equatorial latitudes with increasing pressure in agreement with previous work of Moses and Greathouse (2005). Indeed, this column density mimics the seasonal solar actinic flux at high altitudes (around 10^{-3} - mbar), while it follows the annually averaged actinic flux at lower altitudes (at 1 mbar and below) where the column density is maximum at the equator.

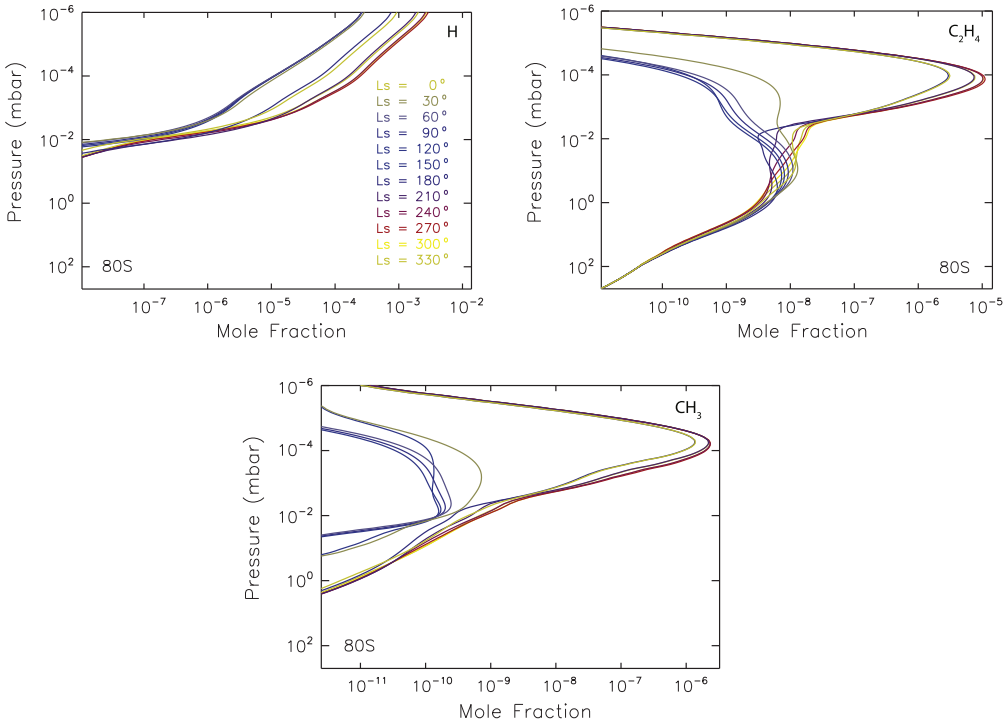

Fig. 12. Seasonal evolution of the mole fraction of atomic hydrogen (H, top left), ethylene (C_2H_4, top right), methyl (CH_3, bottom) as a function of pressure and heliocentric distance (L_s) at 80°S. The profiles are presented using a 30° step in L_s.

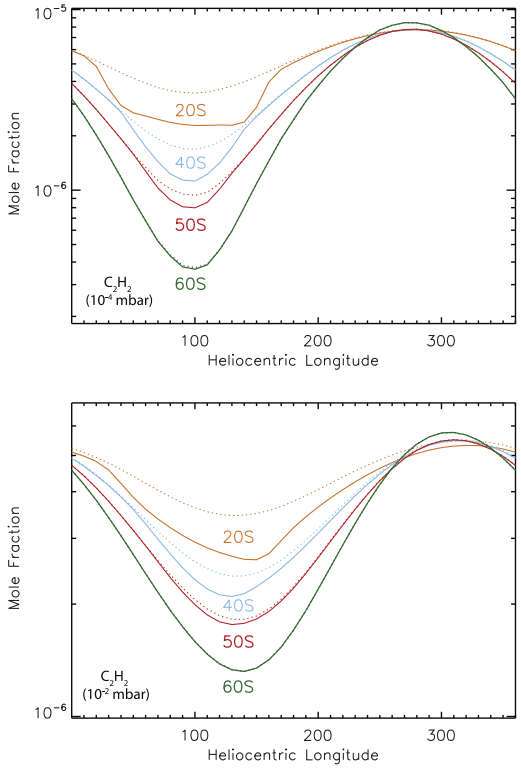

Fig. 13. C_2H_2 mole fraction at 10^{-4} mbar (top) and 10^{-2} mbar (bottom) as a function of heliocentric longitude. The solid lines include ring-shadowing effects, whereas the dotted lines do not include this effect. These effects are only visible from the equator to ±50°. High latitudes are alternately in polar day and polar night. The mole fraction minima and maxima are damped and phase-lagged at 10^{-2} mbar with respect to 10^{-4} mbar.

4.1.3. Other species

The seasonal evolution of the vertical profiles of several other compounds of interest are presented in Fig. 12 for 80°S, where variability is expected to be most noticeable. Radicals, such as atomic hydrogen (H) and methyl (CH_3), show a strong seasonal variability, as they mainly result from the photolysis of CH_4 and depend therefore on insolation conditions. These short-lived radicals undergo a drastic decrease in their abundances in winter conditions at this latitude, i.e., when CH_4 photolysis is stopped by the polar night. Ethylene (C_2H_4) also shows significant seasonal changes around 10^{-4} mbar as they mainly result from reactions involving CH radicals and methane (R13: $CH + CH_4 \rightarrow C_2H_4 + H$). Below that level, C_2H_4 production rate through reaction R7 ($H + C_2H_3 \rightarrow C_2H_4$) becomes increasingly important, consistently with Moses and Greathouse (2005), to be its main production process around 1 mbar.

4.1.4. Impact of the rings on chemistry

The impact of the UV absorption by the rings on the seasonal evolution of C_2H_2 and C_2H_6 mole fractions are depicted in Fig. 13 and 14. As expected from geometrical considerations, and given the latitudinal extent of the numerical cells of the model, the ring shadowing effect is maximum at latitudes below 50° in the winter hemisphere, at the solstice itself, i.e., when the shadow cast by the ring on the planet are the most extended in that hemisphere. The impact of the ring shadowing is more localised in time at a latitude of 40° than at a latitude of 20° in the winter hemisphere. At these latitudes, the main impact on chemistry of the ring shadowing effect comes from Saturn B ring. At a latitude of 20° in the winter hemisphere, the ring shadowing effects are effective over 140° in L_s, while at a latitude of 40°, they are effective over 80° in L_s. At higher pressure levels, and similarly to the column density, the mole fraction minima and maxima are damped and phase-lagged.

4.2. Accounting for the seasonal temperature field

In this section, we present results from the seasonal simulations using the seasonal (S) thermal profiles. The vertical profiles of CH_4, C_2H_6, and C_2H_2, using this thermal field are displayed in Fig. 15. These profiles have to be compared with Fig. 10, where the (U) thermal field was used.

Taking the (S) field into account leads to differences with respect to the (U) case in the amplitude of the seasonal variability of C_2H_2 and C_2H_6 at pressure levels ranging from 10^{-5} to 10^{-1} mbar. C_2H_2 now shows a small seasonal variability at pressure levels ranging from 0.5 to 10 mbar, which was not the case previously. The position of the homopause is also expected to vary, as the molecular diffusion coefficient has a thermal dependency ($D_i \propto T^{1.75}/p$). Using the (S) field, the homopause is generally shifted to a lower pressure, due to the fact that the (U) thermal field corresponds to summer conditions at latitude of 20° in the summer hemisphere.

The seasonal evolutions of the C_2H_2 and C_2H_6 mole fractions at three pressure levels (10^{-4}, 10^{-2} and 1 mbar) and considering the

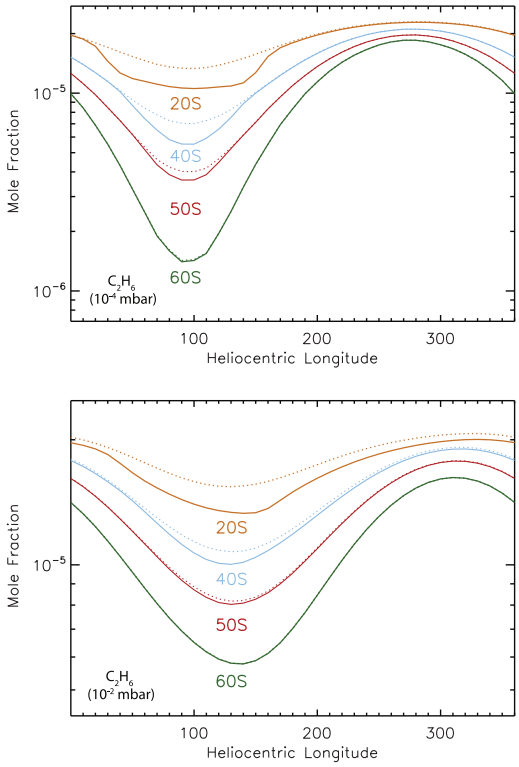

Fig. 14. Same as Fig. 13 for C_2H_6. Solid and dotted lines represent photochemical predictions with and without ring shadowing, respectively.

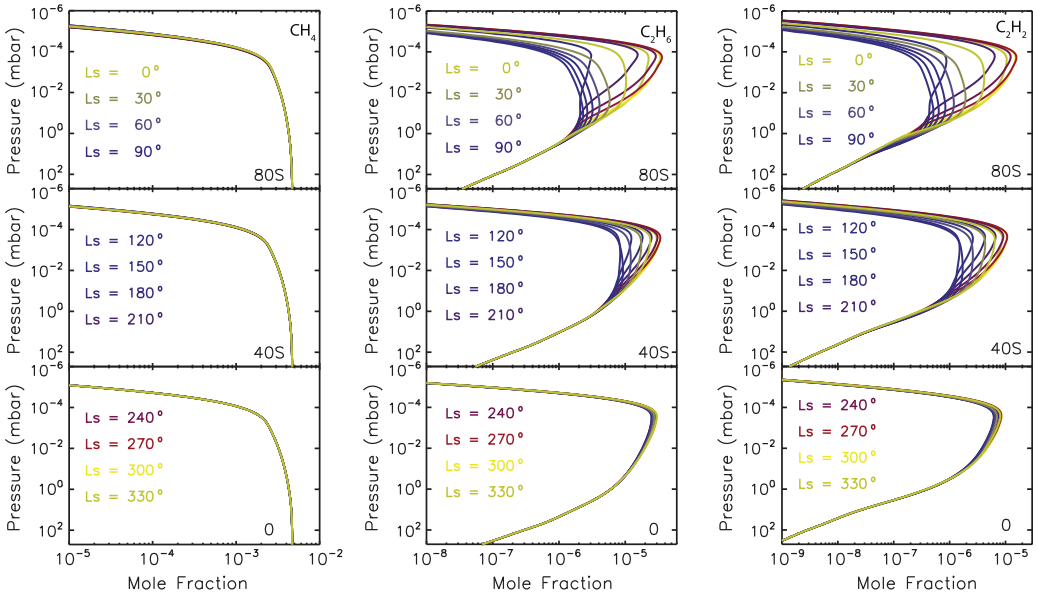

Fig. 15. Seasonal evolution of CH_4 (left), C_2H_6 (center) and C_2H_2 (right) vertical profiles computed for the whole Kronian year (360° in heliocentric longitude using a 30° step) and using the seasonal (S) thermal field.

(S) and (U) thermal fields are shown in Figs. 16, 18 and 20. For the sake of comprehension, the seasonal evolution of temperatures at these same pressure levels are shown alongside as well as the position of the different solstices and equinoxes. We only present these seasonal evolutions at a few latitudes in the southern hemisphere, although the same occurs in the northern hemisphere. Therefore, in what follows, summer and winter refer to these seasons in the southern hemisphere, if not otherwise specified.

• Fig. 16: At 10^{-4} mbar, C_2H_2 and C_2H_6 mole fractions, as predicted using both (S) and (U) thermal fields, evolve in phase. Around the summer solstice ($L_s = 270°$), the abundance of these compounds is increased when considering the (S) thermal field and they both show a positive abundance gradient from the equator to the south pole. Note that, when considering the (U) field, C_2H_6 shows a very small abundance gradient at the summer solstice.

The differences in C_2H_2 and C_2H_6 abundances between both (S) and (U) thermal field calculations never exceed 50% except at high latitudes at summer solstice where C_2H_2 and C_2H_6 abundances are enhanced by a factor of 1.4 and 1.5, respectively. The small bump observed at the equator with both thermal fields is due to the absence of ring shadowing due to the thin nature of the rings. The ring opacity on the UV field is averaged over the latitudinal extent of the numerical cells, which are 10°-wide here. A local maximum on the UV field is expected at the equator at $L_s = 0°$ and 180°, i.e., when the projection of the rings over Saturn's planetary disk is negligible, given the latitudinal extent of the numerical cells. The temperatures at 40°S for L_s ranging from 50° to 140° vary abruptly with times due to the shadowing from the different rings. The temperature of the (U) thermal field at this pressure level is 1 K warmer than the one of (S) thermal field at latitude of 80°S around the summer solstice.

At 10^{-4} mbar, the C_2H_2 production is mainly controlled by reactions R50 ($C_2H_4 + h\nu \rightarrow C_2H_2 + H_2$) and R51 ($C_2H_4 + h\nu \rightarrow C_2H_2 + H + H$) as displayed on Fig. 17 (left panel). The integrated production rates above that pressure level computed using the (S) thermal field are always greater than the ones computed with the (U) field. These differences are caused by the temperature which affects the position of the homopause and allows the UV radiation to penetrate deeper in the (U) thermal field case. This ultimately leads to an increase in the integrated production rate above 10^{-4} mbar of CH radical from methane photolysis. Since the (U) thermal field is hotter than the (S) thermal field at all times along the year, the integrated production rates of C_2H_2 and C_2H_6 above 10^{-4} mbar in the former case are always expected to be greater than the (U) case. From this radical, C_2H_4 is produced through reaction R13, and then photolysed through reactions R50 and R51. We note that the differences in the integrated production rates between these two thermal fields reach a minimum at 40°N around the northern winter solstice ($L_s = 270°$) while, at the same time, the C_2H_2 mole fraction becomes more important when considering the (U) thermal field than when using the (S) thermal field. These differences are produced by the decrease in the diffusion timescale due to the contraction of the atmospheric column which cools down around the winter solstice as explained below.

A similar behavior is observed for C_2H_6 (Fig. 17, right panel) whose integrated production rates are controlled by reaction R20. We can however note that, at 80°S and around the winter solstice ($L_s = 90°$) the integrated production rate considering the (S) thermal field is more important than the one using (U) thermal field, consistent with the predicted greater abundance of C_2H_6 at that time.

• Fig. 18: At 10^{-2} mbar, C_2H_2 is less abundant at every latitude when the (S) field is accounted for. Its abundance gradually increases with latitude from the equator to the south pole during the summer season. However, at this pressure level, the peak in the C_2H_2 and C_2H_6 abundances during summer is occurring earlier at high latitudes than at mid-latitudes due to Saturn's obliquity. C_2H_6 becomes as abundant with the (S) thermal field as it was with the (U) thermal field during the summer season. A slight dephasing is noted between

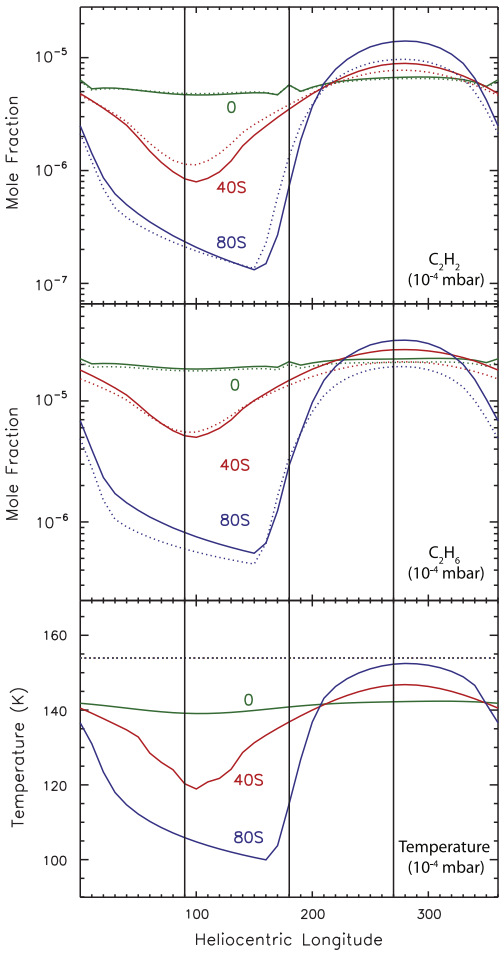

Fig. 16. Evolution of the C_2H_2 mole fraction (top panel), the C_2H_6 mole fraction (middle panel) and temperature (bottom panel) at 10^{-4} mbar. The evolution of mole fractions and temperature is plotted as a function of heliocentric longitude for latitudes of 80°S, 40°S and at the equator. Values obtained with the (S) and (U) thermal fields are displayed with solid and dotted lines, respectively. The black solid lines indicate the position of the solstices and equinoxes (see Fig. 1).

the two thermal field calculations when C_2H_2 and C_2H_6 reach both their maximal and minimal values. At 80°S, the abundance of C_2H_2 and C_2H_6 is decreased by a factor 2.3 and 2.1, respectively, during the winter season when we consider the (S) thermal field. At this pressure level, the temperatures of the (U) field are 2 K and 6 K warmer than the equatorial temperatures of the (S) field at the summer solstice and the winter solstice respectively.

At 10^{-2} mbar, the C_2H_2 production is mainly controlled by reaction R6. The seasonal evolution of the integrated production rate of this reaction above this pressure level is presented in Fig. 19 (left panel) at latitudes of 80°S and 40°N. Around the summer solstice (L_s = 270° for 80°S and L_s = 90° for 40°N), the integrated production rate of reaction R6 in the (U) and (S) cases are very similar, consistent with the predicted C_2H_2 mole fraction. Around the winter solstice (L_s = 90° for 80°S and L_s = 270° for 40°N), the (S) integrated production rate is higher than the (U) one, also consistent with the predicted C_2H_2 mole fractions.

Similarly to the situation at lower pressure levels, the integrated C_2H_6 production rate (Fig. 19, right panel) is controlled by reaction R20. The integrated production rates of this reaction are very similar between the two thermal field cases, all along the year except around the southern winter solstice at high latitudes. Indeed, the integrated production rate become less important in the (S) case than in the (U) case.

At this pressure level, the differences between the two thermal field cases observed in the C_2H_2 and C_2H_6 abundances are mainly controlled by two quantities. First, a higher integrated production rate above that level will produce a greater quantity of the considered molecule. At the same time, the contraction of the atmospheric column during the winter season will increase the diffusion of the produced hydrocarbons to higher pressure levels. This former effect is clearly noticed for C_2H_6 at 40°N during the northern winter season where its integrated production rate above that level with the (S) thermal field is slightly greater than the one with the (U) thermal field, while its predicted abundance is lower in the (S) case than in the (U) case.

• Fig. 20: At 1 mbar, C_2H_2 still shows seasonal variability while C_2H_6 seasonal variability is negligible with the (U) thermal field. The variability of these compounds persists at higher-pressure level when the (S) thermal field is accounted for. The dephasing between the two thermal field calculations which was observed at 10^{-2} mbar is now enhanced here. C_2H_6 is slightly more abundant at the equator using the (S) field, and has now a steeper abundance gradient toward the South pole. The temperature of the (U) field corresponds to temperatures of the (S) field at 40°S during the winter solstice.

Note that the resolution of the model in the pressure space varies with thermodynamic conditions as discussed in Section 2.3.2, while the vertical resolution of the model is constant. The altitudinal resolution of the model has been doubled in order to assess if the differences observed between the two thermal fields at high latitudes in the winter hemisphere where not due to numerical artifact. The results obtained were identical.

It is clear from Figs. 18 and 20 that accounting for the (S) thermal field leads to a decrease in the seasonal lag of C_2H_6 and C_2H_2 at pressure levels higher than 10^{-2} mbar. We also noted that these two compounds still show seasonal variability at 1 mbar while this variability has already vanished for C_2H_6 with the (U) thermal field. The temporal positions of the maximum and minimum abundance values as a function of pressure, corresponding to summer and winter conditions (hereafter called summer peak and winter hollow, respectively), are displayed in Fig. 21. We note an increase in the phase lag between the (U) and the (S) thermal field calculations with increasing pressure from the 10^{-2} mbar to the 1 mbar pressure level. At 1 mbar, the depletion in the C_2H_6 abundance due to low-insolation winter conditions (winter hollow) is occurring 90° in heliocentric longitude earlier with the (S) thermal field than with the (U) thermal field. Similarly, the increase in C_2H_6 abundance due to summer conditions (summer peak) is occurring 40° in heliocentric longitude earlier.

We can note here some discrepancies between both our study cases and the following statement previously made by Moses and Greathouse (2005): *"Our assumption of a constant thermal structure with time and latitude introduce mole-fractions errors of a few percent but will not affect our overall conclusions."* This statement seems to be clearly in disagreement with the results presented in Figs. 16, 18 and 20 where the differences between the (U) and (S) cases are well beyond a few percent. The fact that we did not reach the same conclusions lies in the different approach we had. In the present model, we assumed that the compounds mole fractions followed the atmospheric contraction/dilatation in the pressure space with changing thermodynamic conditions (see Section 2.3.3). Therefore, when the atmosphere column contracts,

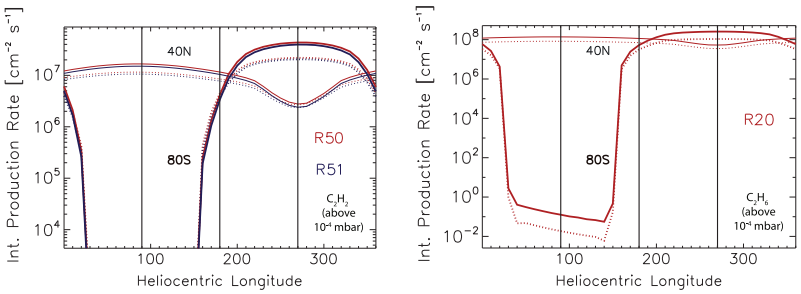

Fig. 17. Seasonal evolution of the integrated production rate above 10^{-4} mbar of the main reactions leading to the production of C_2H_2 (left panel) and C_2H_6 (right panel). For the sake of clarity these integrated production rates are presented at 80°S (thick lines) and 40°N (thin lines). Calculations that include the (S) and (U) thermal field are displayed with solid and dotted lines, respectively.

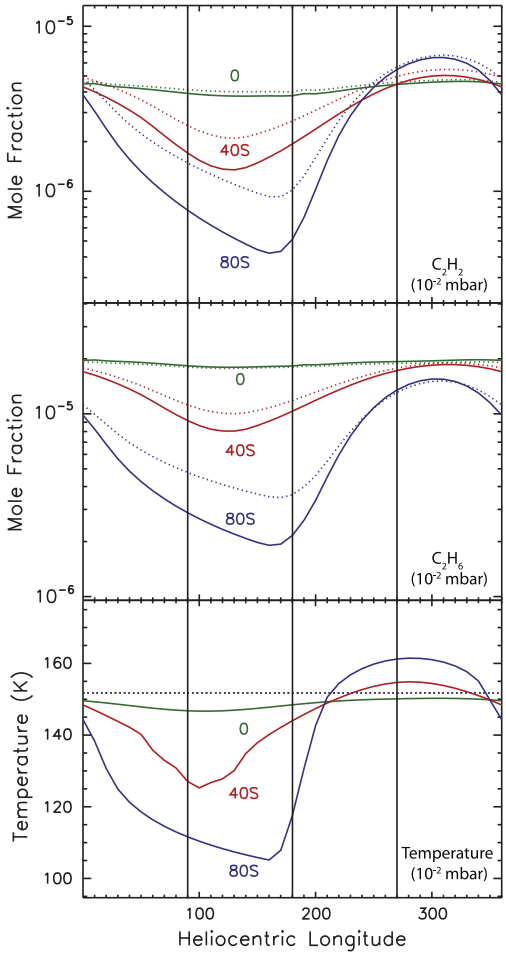

Fig. 18. Same as Fig. 16 at 10^{-2} mbar.

the mole fraction vertical gradients in altitude are increased and the diffusion to higher pressure levels becomes faster. On the other hand, when the thermal structure does not evolve with time (i.e., the (U) study case), our approach is identical to the work of Moses and Greathouse (2005).

The diffusion timescale is therefore decreased at all times in the (S) model with respect to the (U) model, due to the thermal evolution of the (S) model. Consequently, this decrease in the diffusion timescale shifts to higher pressures the level where the seasonal variations vanish. This effect is maximized at the poles where the seasonal variations in temperature are important.

We remind the reader that we assumed a seasonally and latitudinally constant eddy diffusion profile, due to the lack of constraint on this free-parameter.

5. Comparison with Cassini/CIRS data

After Cassini's arrival in the Saturn system, observations of hydrocarbons have been performed with an unprecedented spatial and temporal coverage, either with nadir (Howett et al., 2007; Hesman et al., 2009; Sinclair et al., 2013) or limb (Guerlet et al., 2009, 2010) observing geometries. Howett et al. (2007) reported the meridional variability of C_2H_6 and C_2H_2 from 15°S to almost 70°S at a pressure level around 2 mbar between June 2004 ($L_s \approx 292°$) and November 2004 ($L_s \approx 298°$) with Cassini/CIRS. The C_2H_2 distribution was found to peak around 30°S and decreases towards both the equator and the South Pole. C_2H_6 showed a rather different and puzzling behavior, with an increasing abundance southward from the equator, confirming the earlier findings of Greathouse et al. (2005) and Simon-Miller et al. (2005).

Sinclair et al. (2013) reported observations of C_2H_6 and C_2H_2 around the 2.1 mbar pressure level, acquired in nadir observing mode with a good spatial coverage, from South to North Pole. These observations range in time from March 2005 ($L_s \approx 307°$) to September 2012 ($L_s \approx 37°$). However, the most recent ones were contaminated with the signature of Saturn's 2011 Great Storm (Fletcher et al., 2011; Fischer et al., 2011; Sánchez-Lavega et al., 2011), which stratospheric aftermath was studied extensively by Fletcher et al. (2012). Their retrieval suggests that C_2H_2 is abundant at the equator and decreases toward the poles. Similarly to previous findings, C_2H_6 showed a behavior different from C_2H_2. The observed trend suggests an enrichment in C_2H_6 at high southern latitudes.

The observations retrieved by Guerlet et al. (2009, 2010) from Cassini/CIRS limb-scans, enabled constraining the vertical distributions of C_2H_2 and C_2H_6 from 5 mbar to 5 μbar. The retrieved mole fraction meridional profiles of C_2H_2 and C_2H_6 at 1 mbar are

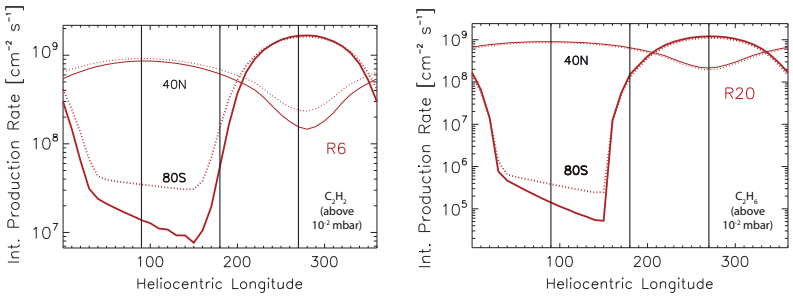

Fig. 19. Same as Fig. 17 for 10^{-2} mbar.

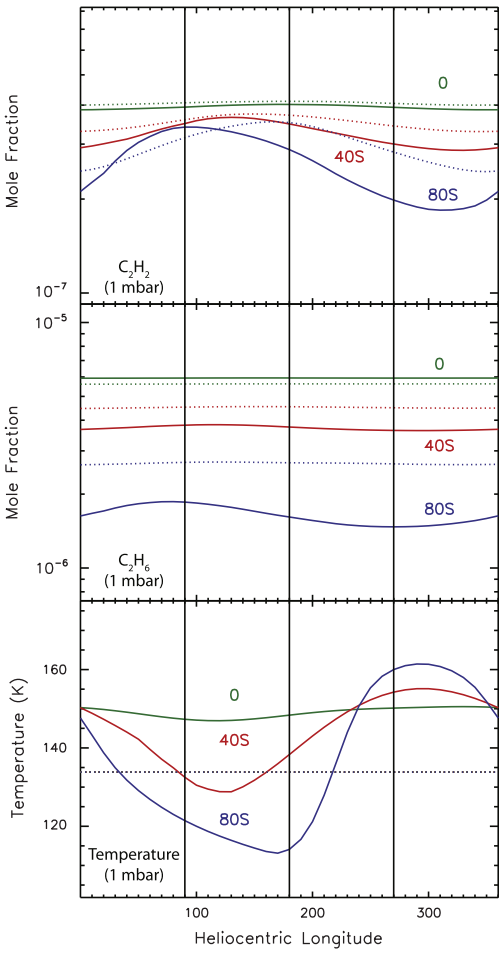

Fig. 20. Same as Fig. 16 at 1 mbar.

presented in Fig. 22 for a better comparison with already published nadir observations (Howett et al., 2007; Sinclair et al., 2013). When considering the meridional profiles only, the systematic errors are not considered and therefore the observational errors have been reduced of 20% in Fig. 22. We chose not to rescale our predictions to superimpose them to the observations, although it is occasionally observed in the literature. Dobrijevic et al. (2003, 2010a) showed that uncertainty propagations in giant planet photochemistry lead to uncertainties of about an order of magnitude in the C2 species' abundances at around the 1 mbar pressure level. Recent improvement on the chemical scheme greatly reduced these uncertainties (Hébrard et al., 2013; Dobrijevic et al., 2014; Loison et al., 2015) (see Fig. 7) by a factor of 1.8 for C_2H_6 and a factor of 4.2 for C_2H_2. The absolute differences between the photochemical predictions and the observations shall not be seen as a concern if it remains within the photochemical uncertainties. What can (and have to) be compared between observations and models are the general trends seen in the meridional distributions at the relevant pressure levels.

The Cassini limb-observations offer latitude and altitude information. The retrieved abundances of these two molecules over the pressure sensitivity range are presented in Fig. 23 at a few observed planetographic latitudes. We have selected these latitudes in order to display the different features noted when confronting these observations with the model, e.g., a large over-prediction of their abundance at high southern latitudes and low pressure level, a good agreement at mid-to-low latitudes, and an under-prediction at mid-to-high northern latitudes and high pressure levels, especially noted for C_2H_6. It is worth presenting a comparison with these data in two-dimensional plots for the sake of clarity. The relative differences between the Cassini observations of C_2H_6 and C_2H_2 from the photochemical predictions using

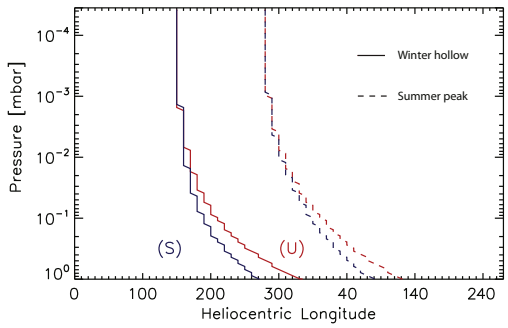

Fig. 21. Evolution of the seasonal maximum value (*summer peak*, dashed lines) and minimum value (*winter hollow*, solid lines) reached by the C_2H_6 mole fraction as a function of pressure at 80°S. Calculations using the (S) and the (U) thermal fields are denoted by blue and red colors, respectively. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

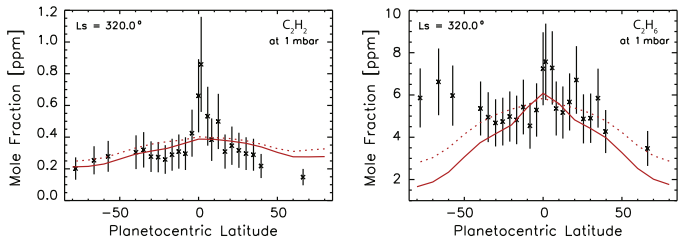

Fig. 22. Comparison between the Cassini/CIRS limb observations (Guerlet et al., 2009) for heliocentric longitudes ranging from $L_s \approx 300^\circ$ to $L_s \approx 340^\circ$ and the photochemical model predictions. Photochemical predictions are presented for a heliocentric longitude of 320°. C_2H_2 and C_2H_6 are respectively shown in the left and right panels. Model outputs using the (S) and (U) thermal fields are denoted by solid and dotted lines, respectively. No rescaling factors have been applied, see text for details.

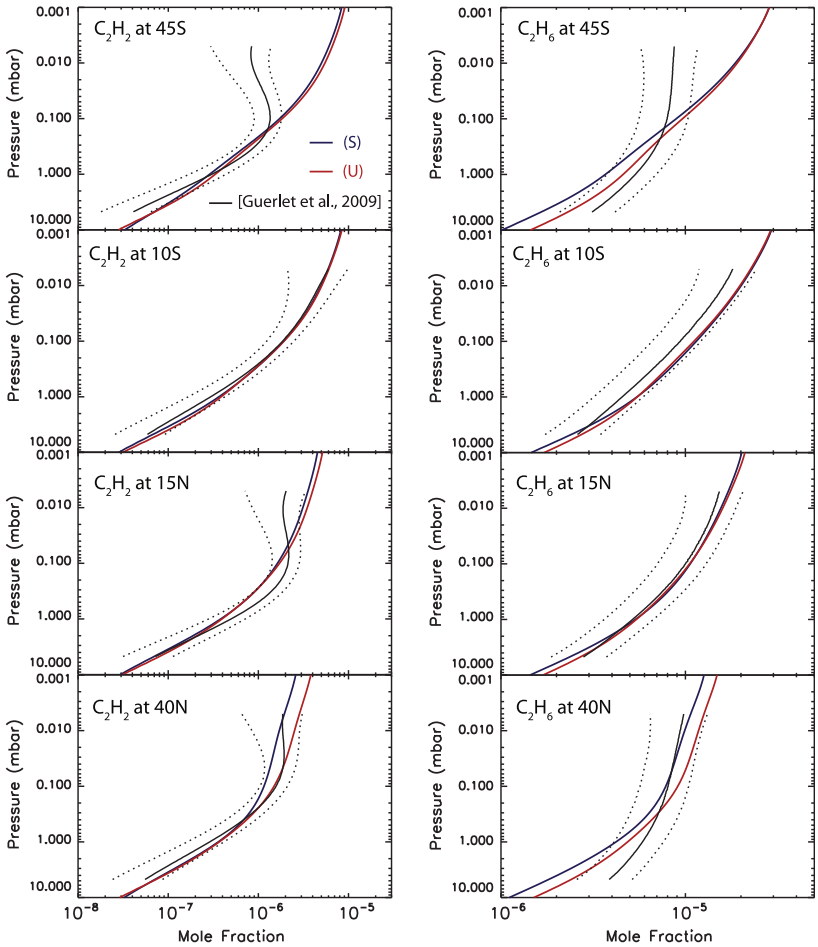

Fig. 23. Comparison between the C_2H_2 (left panels) and C_2H_6 (right panel) retrieved abundances with the photochemical predictions over the pressure sensitivity range at few observed planetographic latitudes. Photochemical predictions that uses the (S) and (U) thermal field are displayed by solid blue and red colors, respectively. Solid and dotted black lines represent the observed abundances of Guerlet et al. (2009) with the $1-\sigma$ uncertainties, respectively. Photochemical predictions are presented for a heliocentric longitude of 320°. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

(S) thermal field are displayed in Fig. 24 using a logarithmic scale. The positive and negative values therefore denote the regions where the photochemical model under and over-predicts the abundance of these compounds, respectively. The quantity $log(y_i^{CIRS}/y_i^{PM})$ is plotted as a function of the pressure range and the latitude, where y_i denotes respectively the mole fraction of

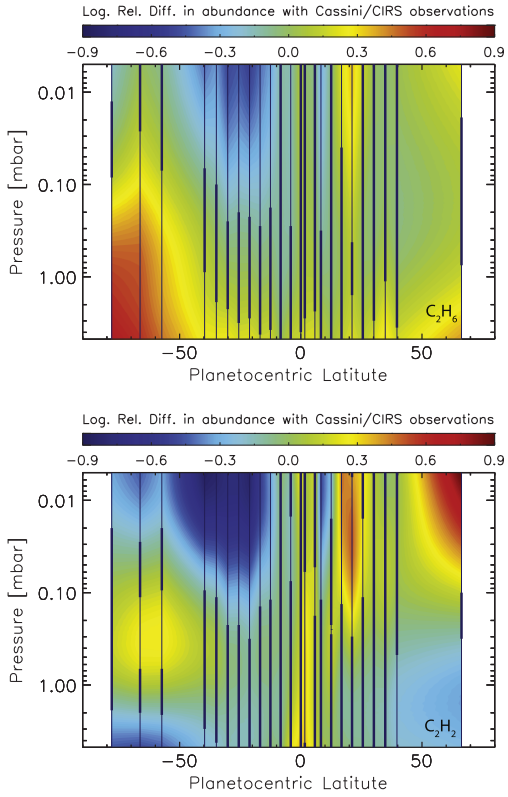

Fig. 24. Comparison between observations (Guerlet et al., 2009) and photochemical predictions as a function of the pressure sensitivity range of limb observations and planetocentric latitudes. C_2H_6 and C_2H_2 are presented in the upper and lower panel, respectively. The observing period ranges from $L_S = 300°$ and $L_S = 340°$. Observations are compared to photochemical predictions at $L_S = 320°$. The logarithm of the difference between Cassini observations of these compounds and the photochemical predictions that use (S) thermal field is plotted here. Positive/negative values denote an under/over-prediction of the photochemical models. The vertical lines denote the latitudes for which observations have been made. The thick portions of those lines show the region where the photochemical predictions are within the observation uncertainties. Uncertainties on the photochemical predictions are not taken into account. No scaling factor have been applied.

species *i*, while *PM* stands for photochemical model. Because the latitudinal coverage of Cassini limb-observations is limited, we have indicated the latitude of each observation by black vertical lines.

5.1. C_2H_2

At the 1 mbar pressure level (Fig. 22), our photochemical model simulations agree reasonably well with the meridional trend seen in the C_2H_2 meridional profiles, namely the poleward decrease of its abundance, as reported by Guerlet et al. (2009, 2010) and Sinclair et al. (2013). Differences are observed in the equatorial regions, at latitudes lower than 15° and Northward of 35°N.

Below the 0.1 mbar pressure level (see Fig. 24), the agreement with the C_2H_2 distribution reported by Guerlet et al. (2009) is within the uncertainty range of the observations from the equator to ± 40°. The agreement is however poor at lower-pressure levels and high-southern latitudes, where C_2H_2 abundance tends to be over-predicted.

In the equatorial zone, the differences between our photochemical predictions and the observations change sharply over a short latitudinal range. Fig. 22 shows that our model does not reproduce the equatorial peak of C_2H_2 abundance (between 5°S and 5°N roughly). This peak is thought to be caused by Saturn's thermal Semi-Annual Oscillation (SSAO) (Orton et al., 2008; Fouchet et al., 2008; Guerlet et al., 2009, 2011).

In the southern hemisphere, from 10°S to 50°S, we over-predict the C_2H_2 mole fraction at pressures lower than 0.1 mbar. This feature is also observed when comparing C_2H_6 predictions to observations and is discussed below.

5.2. C_2H_6

Moses and Greathouse (2005) have shown that the seasonal variability of C_2H_6 at pressures higher than 0.8 mbar was negligible, because the timescale driving this compound's abundance becomes longer than the Saturn year below that pressure level.

Due to the larger chemical evolution timescale of C_2H_6 with respect to C_2H_2, this compound is expected to be more sensitive to transport processes than the latter one. In addition to that, the uncertainties on the reactions involved in the production or destruction of C_2H_2 lead to an important error bar on its vertical

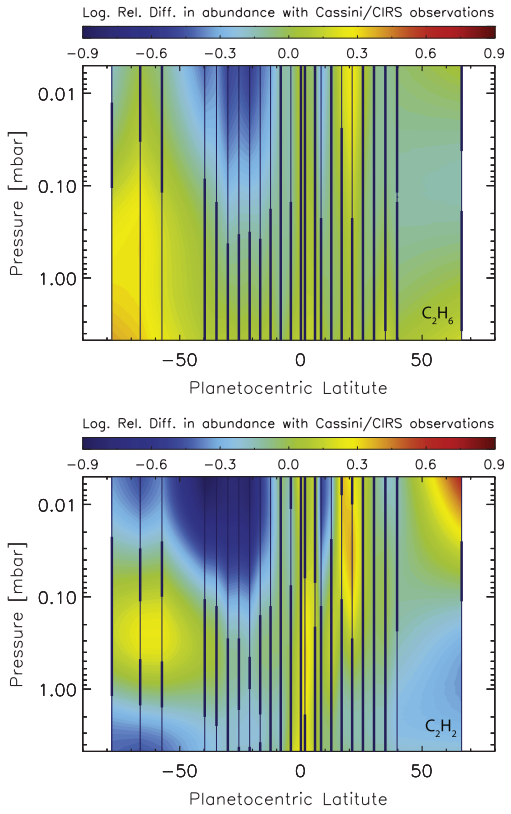

Fig. 25. Same as Fig. (24) using the photochemical predictions that use (U) thermal field.

profile (recall Fig. 7), whereas the predicted shape of C_2H_6 has smaller error bars. Therefore, C_2H_6 is a compound that should be first used to trace dynamics rather than C_2H_2. C_2H_6 is reasonably well reproduced from the equator to 40° in both hemispheres below the 0.1 mbar pressure level. An equatorial peak similar to the one observed in the C_2H_2 meridional profile (see Fig. 22), though with a smaller relative amplitude, is present in the C_2H_6 meridional profile and could also be caused by the SSAO. Similarly to C_2H_2, we underpredict C_2H_6 abundance from 40°S to south pole below the 0.1 mbar pressure level, and we overpredict its abundance at latitudes ranging from 10°S to 40°S above the 0.1 mbar pressure level. These similar over/underprediction seen in C_2H_2 and C_2H_6 could be caused by large scale dynamical cell redistributing species meridionally in Saturn's stratosphere, as suggested by Guerlet et al. (2009, 2010), Sinclair et al. (2013).

At the 1 mbar pressure level (Fig. 22), the photochemical predictions that use the (S) thermal field predict a steeper equator-to-pole gradient, which arise from the faster diffusion to higher-pressure levels when considering the (S) thermal field. Fitting these meridional profiles with dynamical processes could help to constrain meridional mixing processes and will be the object of a forthcoming study.

5.3. Does accounting for the seasonal evolution of the thermal field better fit Cassini data?

Fig. 25 presents the comparison between Cassini-limb observations with photochemical predictions using the (U) thermal field in a similar way as Fig. 24. C_2H_6 is better predicted using (U) thermal field below 1 mbar while C_2H_2 is better predicted at all pressure levels using (S) thermal field. The region where C_2H_6 was widely under-predicted with the (S) thermal field from mid-southern latitude to South pole (recall Fig. 24), is now slightly reduced, but it remains significant.

The evolution of the Chi-Square goodness-of-fit between the predicted C_2H_2 and C_2H_6 abundance (using both thermal fields) and Cassini observations for every observed latitudes is shown in Fig. 26. These values are computed first by interpolation of the photochemical prediction on the observed latitudes and pressure levels, then the Chi-Square coefficient presented in Fig. 26 is computed and summed over the observed latitudinal range. Using the (S) thermal field in the predicted C_2H_6 profile represents a slight improvement at pressures lower than 0.1 mbar. However, in the lower stratosphere, from 0.2 mbar to 5 mbar, the predicted C_2H_6 shape is better reproduced using the (U) thermal field. C_2H_2 is better reproduced using the (S) thermal field at all pressure levels.

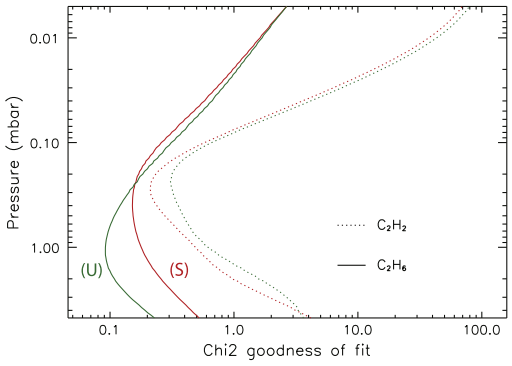

Fig. 26. Evolution of the χ square goodness-of-fit factor for C_2H_2 (dotted lines) and C_2H_6 (solid lines) over the sensitivity pressure ranges of the Cassini/CIRS limb observation mode. This factor is presented when using (S) and (U) thermal fields, denoted by the blue and red lines respectively. This factor is summed for all observed latitudes. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

5.4. Discussion

As noted above, it has been shown that both C_2H_6 and C_2H_2 were overpredicted at mid-southern latitudes and above 0.1 mbar, while C_2H_6 was underpredicted at high-southern latitudes and below 0.1 mbar (recall Fig. 24). It can be pointed out that the eddy diffusion coefficient used in this work was possibly not the most optimal one. We remind the reader that the coefficient used here was chosen so that it provides a satisfactory fit of the CH_4 vertical profile in comparison to Voyager/UVS and Cassini/CIRS data (Smith et al., 1983; Dobrijevic et al., 2011).

However, when looking carefully at the southern mid latitudes in Figs. 23 and 24, where we overpredict the C_2H_6 abundance above 0.1 mbar and underpredict its abundance below 1 mbar, a diffusion coefficient greater in the upper stratosphere (above 0.1 mbar) and smaller below that level might provide a better fit at these latitudes. We have performed a sensitivity study on that parameter by using several dozen different eddy diffusion coefficients. The seasonal model was run from the converged state with the nominal eddy diffusion profile presented in this work. From that point, the eddy diffusion profile was modified and several additional iterations over Saturn orbits were necessary for the system to converge, depending on the new eddy diffusion coefficient. Several different eddy diffusion coefficients provide a better fit of mid-latitudes in the southern hemisphere, but at the same time the good agreement in the northern hemisphere vanishes.

All along this study, we have assumed an eddy coefficient constant with latitudes. However, the sensitivity study on that free parameter has shown us that some latitudes that were not properly reproduced with an eddy diffusion coefficient based on globally averaged observations could be reproduced when adjusting this coefficient. In principle, it could therefore be possible to fit all the observed latitudes by finding the most adapted diffusion coefficient at each latitude. We have not explored this possibility more extensively since the meridional variability of that parameter has not yet been demonstrated with the observation of the latitudinal variability of CH_4 homopause.

Another likely possibility would be the existence of large scale meridional transport (diffusive and/or advective), as the associated atmospheric motions might be an important source of departure from the photochemical predictions (Moses and Greathouse, 2005; Guerlet et al., 2009, 2010; Friedson and Moses, 2012; Sinclair et al., 2013). However, it is difficult to assess the validity of this hypothesis without further numerical testing. Such work is deferred to a later paper. The recommended methodology would be first to retrieve the latitudinal variability of the CH_4 homopause in order to better constrain the latitudinal variability of the eddy diffusion coefficient before fitting the Cassini/CIRS observations with meridional transport.

Predictions of the existence of large-scale circulation have already been studied using numerical models. Conrath et al. (1990), using a 2D zonally averaged model, have predicted a summer-to-winter pole stratospheric circulation cell for Saturn at solstice with upwelling around the summer pole and downwelling around the winter pole. They also found a double circulation cell at equinox, with upwelling at equator and downwelling at both poles. However their calculations did not include aerosols heating which is known to impact the radiative budget in the atmosphere. Afterwards, West et al. (1992) included such heating for a jovian-like planet and showed that circulation was altered above 100 mbar, with downwelling at equator and upwelling at the

poles. We note that they have not presented the effect of aerosol heating on a Saturn-like planet at solstice. Recently, Friedson and Moses (2012) predicted a seasonally reversing circulation cell using a 3D GCM, with upwelling at the equator and downwelling at low latitudes in the winter hemisphere. The next step of this study is to evaluate whether these predicted circulation patterns are sufficient for our full 2D photochemical model to reproduce the Cassini data.

6. Summary and perspectives

We have developed a latitudinally and seasonally variable photochemical model for giant planets and we have adapted it first to Saturn. The model takes into account photochemistry, vertical mixing, Saturn's obliquity, and variation of seasonally dependent orbital parameters such as subsolar latitude, heliocentric distance and ring shadowing. Meridional transport (both advective and diffusive) as well as vertical advective transport have been coded in the model but have been switched off for the current study. The present model is therefore run as a sum of 1D seasonally variable models calculated at different latitudes. This is the first step toward a full-2D model as it is already coupled to a full-3D radiative transfer model. This first paper is dedicated to the study of the photochemical effects involved by a seasonally variable thermal field, which relies on predictions from a radiative climate model (Greathouse et al., 2008).

Seasonal variability of C_2H_2 and C_2H_6 – The seasonal variations of the C2-hydrocarbon mole fractions such as C_2H_2 (acetylene) and C_2H_6 (ethane) are important at pressure levels lower than 0.1 mbar and at high latitudes. These compounds are known to act as the main stratospheric coolants (Yelle et al., 2001) and we therefore have emphasized their seasonal variabilities in this work. These hydrocarbons are produced by chemical reactions involving radicals which strongly depend on insolation. Including the ring shadowing effect generally results in lowering the mole fraction of hydrocarbons at latitudes that are under the shadow of the rings. The decrease in the mole fraction of these compounds caused by the rings is more important for C_2H_2 than for C_2H_6. This decrease tends to vanish at higher-pressure levels.

Accounting for a seasonally variable thermal field – We found that including a seasonally variable thermal field mainly impacts the seasonal evolution of the hydrocarbon mole fractions in two ways. First, the modification of the thermal field amplitude will affect the position of the methane homopause and will impact consequently the integrated production rates of radicals above the pressure level of 10^{-4} mbar. Then, accounting for a seasonally variable thermal field will affect the diffusion of these produced hydrocarbons through the contraction and dilatation of the atmospheric columns. This will compress the vertical distribution of the atmospheric compounds and will therefore increase the diffusion of these compounds to higher pressure levels. Because the former effect is correlated with the seasonal variation of temperature of the atmospheric column, it is therefore increased with increasing latitude, i.e., where the seasonal thermal gradients are strong. At 10^{-4} mbar, C_2H_2 and C_2H_6 seasonal abundance gradients are generally enhanced. At this pressure level and during the summer season, C_2H_6 shows a positive equator-to-summer pole (North or South) gradient. At 10^{-2} mbar, the seasonal abundance gradients are also increased: the abundance of C_2H_6 and C_2H_2 are respectively decreased by a factor of 2.1 and 2.3 at a latitude of 80° during winter, with respect to the (U) study case. We do not reach the same conclusions than Moses and Greathouse (2005) about the thermal sensitivity of the photochemical model. While our (U) study case is similar to their approach, our (S) study case is, on the other hand, different in a way that the compounds mole fractions are assumed to follow the atmospheric contraction/dilatation in the pressure space with changing thermodynamic conditions. This consequently affects the downward diffusion of the seasonally produced photochemical by-products.

Comparison with Cassini/CIRS data – The Cassini spacecraft has now provided an important amount of data that includes good spatial and temporal coverage (Sinclair et al., 2013) as well as good vertical sensitivity (Guerlet et al., 2009, 2010). Our model reproduces reasonably well the meridional distributions of C_2H_2 and C_2H_6 up to mid-latitudes, even without meridional circulation. However, the overall decrease of C_2H_6 from the south pole towards the north pole at L_s = 320° is not reproduced. An interesting feature has been noted: our model tends to underpredict C_2H_6 abundance from 40°S to South pole at pressure levels ranging from 5 mbar to 0.1 mbar and overpredict its abundance at latitude ranging from 10°S to 40°S at pressure ranging from 5×10^{-3} to 0.1 mbar. These results are consistent with previous findings of Guerlet et al. (2009, 2010) and Sinclair et al. (2013). This interesting feature is also observed for C_2H_2, although in a less pronounced way. The forthcoming step is to turn on the meridional transport to evaluate if it can help better fit to the Cassini data.

Coupling radiative climate model and photochemical model Accounting for these results may have important implications for radiative climate models and GCMs because the predicted temperatures from these models are very sensitive to the amount of these coolants (Greathouse et al., 2008). From 0.1 to 10^{-4} mbar, where their seasonal variability is important, the increase in the amount of these coolants during the summer season will likely counteract the increase in the atmospheric heating caused by the increase in the solar insolation at high-latitudes. Depending on the relative magnitudes of the photochemical timescale over the thermal inertia timescale, the peak in the predicted temperatures at high-latitudes could happen earlier around the summer solstice than previously predicted using a radiative climate model which uses time-independent abundances of atmospheric coolants. The predicted temperatures are therefore expected to start decreasing earlier after summer solstice than what would be predicted with a model that held the amount of these atmospheric coolants constant over time. Moreover, the effect on the lower-stratosphere could be also interesting, as we showed that accounting for the seasonal evolution of the thermal field impacts the phase-lag and the seasonal variability in this region.

Acknowledgments

This work has been supported by the *Investissements d'avenir* program from *Agence Nationale de la Recherche* under the reference ANR-10-IDEX-03-02 (IdEx Bordeaux). Part of this work was done by V.H. at Southwest Research Institute, San Antonio. We thank Julianne Moses and an anonymous reviewer for their constructive comments on the manuscript. We thank Jean Brillet for providing his line-by-line radiative transfer model as well as for useful discussions. We thank Sandrine Guerlet for providing their published Cassini data and for useful discussions. We acknowledge Eric Hébrard for useful discussions on chemistry, Franck Selsis for interesting comments on photochemical models, James Sinclair, Christophe Cossou and Marcelino Agundez for useful comments and discussions. We thank Aymeric Spiga and Melody Sylvestre for useful discussions.

References

Agúndez, M. et al., 2014. Pseudo 2D chemical model of hot-Jupiter atmospheres: Application to HD 209458b and HD 189733b. Astron. Astrophys. 564, A73.
Banfield, D. et al., 1996. 2 μm spectrophotometry of jovian stratospheric aerosols–scattering opacities, vertical distributions, and wind speeds. Icarus 121, 389–410.

Bézard, B. 1986. Variations saisonnières de la structure thermique et composition chimique de jupiter, saturne et uranus. Ph.D. Thesis.

Bézard, B., Gautier, D., 1985. A seasonal climate model of the atmospheres of the giant planets at the Voyager encounter time. I – Saturn's stratosphere. Icarus 61, 296–310.

Bézard, B., Gautier, D., Conrath, B., 1984. A seasonal model of the Saturnian upper troposphere Comparison with Voyager infrared measurements. Icarus 60, 274–288.

Brillet, J. et al., 1996. A three-dimensional simulation of transmitted light through planetary atmospheres using Monte-Carlo methods. Adv. Space Res. 17, 223–226.

Brinkman, A.W., McGregor, J., 1979. The effect of the ring system of the solar radiation reaching the top of Saturn's atmosphere – Direct radiation. Icarus 38, 479–482.

Cavalié, T. et al. 2015. The photochemical response to the variation of temperature in Saturn's 2011–2012 stratospheric vortex. Astron. Astrophys. (revised).

Cess, R.D., Caldwell, J., 1979. A Saturnian stratospheric seasonal climate model. Icarus 38, 349–357.

Colwell, J.E. et al., 2010. Cassini UVIS stellar occultation observations of Saturn's rings. Astron. J. 140, 1569–1578.

Conrath, B.J., Gautier, D., 2000. Saturn helium abundance: A reanalysis of Voyager measurements. Icarus 144, 124–134.

Conrath, B.J., Pirraglia, J.A., 1983. Thermal structure of Saturn from Voyager infrared measurements – Implications for atmospheric dynamics. Icarus 53, 286–292.

Conrath, B.J., Gierasch, P.J., Leroy, S.S., 1990. Temperature and circulation in the stratosphere of the outer planets. Icarus 83, 255–281.

Courtin, R. et al., 1984. The composition of Saturn's atmosphere at northern temperate latitudes from Voyager IRIS spectra – NH_3, PH_3, C_2H_2, C_2H_6, CH_3D, CH_4, and the Saturnian D/H isotopic ratio. Astrophys. J. 287, 899–916.

Dobrijevic, M., Parisot, J.P., 1998. Effect of chemical kinetics uncertainties on hydrocarbon production in the stratosphere of Neptune. Planet. Space Sci. 46, 491–505.

Dobrijevic, M. et al., 2003. Effect of chemical kinetic uncertainties on photochemical modeling results: Application to Saturn's atmosphere. Astron. Astrophys. 398, 335–344.

Dobrijevic, M. et al., 2010a. Key reactions in the photochemistry of hydrocarbons in Neptune's stratosphere. Planet. Space Sci. 58, 1555–1566.

Dobrijevic, M. et al., 2010b. Comparison of methods for the determination of key reactions in chemical systems: Application to Titan's atmosphere. Adv. Space Res. 45, 77–91.

Dobrijevic, M., Cavalié, T., Billebaud, F., 2011. A methodology to construct a reduced chemical scheme for 2D-3D photochemical models: Application to Saturn. Icarus 214, 275–285.

Dobrijevic, M. et al., 2014. Coupling of oxygen, nitrogen, and hydrocarbon species in the photochemistry of Titan's atmosphere. Icarus 228, 324–346.

Dowling, T.E. et al., 2006. The EPIC atmospheric model with an isentropic/terrain-following hybrid vertical coordinate. Icarus 182, 259–273.

Dowling, T.E. et al. 2010. New radiative transfer capability in the EPIC atmospheric model with application to Saturn and Uranus. In: AAS/Division for Planetary Science Meeting Abstracts #42, vol. 42. Bulletin of the American Astronomical Society. p. 1021.

Edgington, S.G. et al. 2012. Photochemistry in Saturn's ring shadowed atmosphere: Production rates of key atmospheric molecules and preliminary analysis of observations. American Geophysical Union (Fall). Abstracts B1946.

Fischer, G. et al., 2011. A giant thunderstorm on Saturn. Nature 475 (7354), 75–77.

Flasar, F.M. et al., 2004. An intense stratospheric jet on Jupiter. Nature 427, 132–135.

Flasar, F.M. et al., 2005. Temperatures, winds, and composition in the Saturnian system. Science 307, 1247–1251.

Fletcher, L.N. et al., 2007. Characterising Saturn's vertical temperature structure from Cassini/CIRS. Icarus 189, 457–478.

Fletcher, L.N. et al., 2009. Methane and its isotopologues on Saturn from Cassini/CIRS observations. Icarus 199, 351–367.

Fletcher, L.N. et al., 2010. Seasonal change on Saturn from Cassini/CIRS observations, 2004–2009. Icarus 208, 337–352.

Fletcher, L.N. et al., 2011. Thermal structure and dynamics of Saturn's northern springtime disturbance. Science 332 (6036), 1413–1417.

Fletcher, L.N. et al., 2012. The origin and evolution of Saturn's 2011–2012 stratospheric vortex. Icarus 221, 560–586.

Fouchet, T. et al., 2008. An equatorial oscillation in Saturn's middle atmosphere. Nature 453, 200–202.

Fouchet, T., Moses, J.I., Conrath, B.J. 2009. Saturn: Composition and Chemistry. p. 83.

Friedson, A.J., Moses, J.I., 2012. General circulation and transport in Saturn's upper troposphere and stratosphere. Icarus 218, 861–875.

Fuller, E.N., Schettler, P.D., Giddings, J.C., 1966. New method for prediction of binary gas-phase diffusion coefficients. Ind. Eng. Chem. 58 (5), 18–27.

Fuller, E.N., Ensley, K., Giddings, J.C., 1969. Diffusion of halogenated hydrocarbons in helium. The effect of structure on collision cross sections. J. Phys. Chem. 73 (11), 3679–3685.

Gezari, D.Y. et al., 1989. New features in Saturn's atmosphere revealed by high-resolution thermal infrared images. Nature 342, 777–780.

Gillett, F.C., Orton, G.S., 1975. Center-to-limb observations of Saturn in the thermal infrared. Astrophys. J. 195, L47–L49.

Godunov, S., 1959. A difference scheme for numerical solution of discontinuous solution of hydrodynamic equations. Math. Sbornik 47, 271–306.

Greathouse, T.K. et al., 2005. Meridional variations of temperature, C_2 H_2 and C_2H_6 abundances in Saturn's stratosphere at southern summer solstice. Icarus 177, 18–31.

Greathouse, T.K. et al. 2008. A general radiative seasonal climate model applied to Saturn, Uranus, and Neptune. American Geophysical Union (Fall). Abstracts B6.

Guerlet, S. et al., 2009. Vertical and meridional distribution of ethane, acetylene and propane in Saturn's stratosphere from CIRS/Cassini limb observations. Icarus 203, 214–232.

Guerlet, S. et al., 2010. Meridional distribution of CH_3C_2H and C_4 H_2 in Saturn's stratosphere from CIRS/Cassini limb and nadir observations. Icarus 209, 682–695.

Guerlet, S. et al., 2011. Evolution of the equatorial oscillation in Saturn's stratosphere between 2005 and 2010 from Cassini/CIRS limb data analysis. Geophys. Res. Lett. 38, 9201.

Guerlet, S. et al., 2014. Global climate modeling of Saturn's atmosphere. Part i: Evaluation of the radiative transfer model. Icarus 238 (0), 110–124.

Guillot, T., 2005. The interiors of giant planets: Models and outstanding questions. Annu. Rev. Earth Planet. Sci. 33, 493–530.

Hanel, R. et al., 1981. Infrared observations of the Saturnian system from Voyager 1. Science 212, 192–200.

Hanel, R. et al., 1982. Infrared observations of the Saturnian system from Voyager 2. Science 215, 544–548.

Hartogh, P. et al., 2009. Water and related chemistry in the Solar System. A guaranteed time key programme for Herschel. Planet. Space Sci. 57, 1596–1606.

Hartogh, P. et al., 2011. Direct detection of the Enceladus water torus with Herschel. Astron. Astrophys. 532, L2.

Hébrard, E. et al., 2013. Photochemistry of C_3H_p hydrocarbons in Titan's stratosphere revisited. Astron. Astrophys. 552, A132.

Hesman, B.E. et al., 2009. Saturn's latitudinal C_2H_2 and C_2H_6 abundance profiles from Cassini/CIRS and ground-based observations. Icarus 202, 249–259.

Howett, C.J.A. et al., 2007. Meridional variations in stratospheric acetylene and ethane in the southern hemisphere of the saturnian atmosphere as determined from Cassini/CIRS measurements. Icarus 190, 556–572.

Ingersoll, A.P., Pollard, D., 1982. Motion in the interiors and atmospheres of Jupiter and Saturn – Scale analysis, anelastic equations, barotropic stability criterion. Icarus 52, 62–80.

Irwin, P., 2006. Giant Planets of Our Solar System: An Introduction. Springer Praxis Books/Astronomy and Planetary Sciences Series. Springer.

Li, L. et al., 2010. Saturn's emitted power. J. Geophys. Res. (Planets) 115, 11002.

Liang, M.-C. et al., 2005. Meridional Transport in the Stratosphere of Jupiter. Astrophys. J. 635, L177–L180.

Lindal, G.F., Sweetnam, D.N., Eshleman, V.R., 1985. The atmosphere of Saturn – An analysis of the Voyager radio occultation measurements. Astron. J. 90, 1136–1146.

Lindzen, R., 1971. Tides and gravity waves in the upper atmosphere (internal gravity waves and tidal oscillations excitation mechanism in upper atmosphere). In: Mesospheric Models and Related Experiments, 122130.

Lindzen, R.S., 1981. Turbulence and stress owing to gravity wave and tidal breakdown. J. Geophys. Res.: Oceans (1978–2012) 86 (C10), 9707–9714.

Loison, J.C. et al., 2015. The neutral photochemistry of nitriles, amines and imines in the atmosphere of titan. Icarus 247, 218–247. http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2014.09.039.

Medvedev, A.S., Sethunadh, J., Hartogh, P., 2013. From cold to warm gas giants: A three-dimensional atmospheric general circulation modeling. Icarus 225, 228–235.

Moreno, R. et al., 2003. Long-term evolution of CO, CS and HCN in Jupiter after the impacts of Comet Shoemaker-Levy 9. Planet. Space Sci. 51, 591–611.

Moses, J.I., Greathouse, T.K., 2005. Latitudinal and seasonal models of stratospheric photochemistry on Saturn: Comparison with infrared data from IRTF/TEXES. J. Geophys. Res. (Planets) 110, 9007.

Moses, J.I. et al., 2000a. Photochemistry of Saturn's atmosphere. I. Hydrocarbon chemistry and comparisons with ISO observations. Icarus 143, 244–298.

Moses, J.I. et al., 2000b. Photochemistry of Saturn's atmosphere. II. Effects of an influx of external oxygen. Icarus 145, 166–202.

Moses, J.I. et al., 2005. Photochemistry and diffusion in Jupiter's stratosphere: Constraints from ISO observations and comparisons with other giant planets. J. Geophys. Res. 110, 8001.

Moses, J.I. et al. 2007. Meridional distribution of hydrocarbons on Saturn: Implications for stratospheric transport. In: Planetary Atmospheres. pp. 85–86.

Ollivier, J.L. et al., 2000a. Seasonal effects in the thermal structure of Saturn's stratosphere from infrared imaging at 10 microns. Astron. Astrophys. 356, 347–356.

Ollivier, J.L., Dobrijévic, M., Parisot, J.P., 2000b. New photochemical model of Saturn's atmosphere. Planet. Space Sci. 48, 699–716.

Orton, G.S. et al., 2008. Semi-annual oscillations in Saturn's low-latitude stratospheric temperatures. Nature 453, 196–199.

Pirraglia, J.A. et al., 1981. Thermal structure and dynamics of Saturn and Jupiter. Nature 292, 677–679.

Rieke, G.H., 1975. The thermal radiation of Saturn and its rings. Icarus 26, 37–44.

Romani, P.N., Atreya, S.K., 1988. Methane photochemistry and methane production on Neptune. Icarus 74, 424–445.

Sánchez-Lavega, A. et al., 2011. Deep winds beneath Saturn's upper clouds from a seasonal long-lived planetary-scale storm. Nature 475, 71–74.

Simon-Miller, A.A. et al. 2005. Cassini CIRS measurements of benzene, propane and carbon dioxide on Saturn. In: AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts #37, vol. 37. Bulletin of the American Astronomical Society. p. 682.

Sinclair, J.A. et al., 2013. Seasonal variations of temperature, acetylene and ethane in Saturn's atmosphere from 2005 to 2010, as observed by Cassini-CIRS. Icarus 225, 257–271.
Sinclair, J.A. et al., 2014. From Voyager-IRIS to Cassini-CIRS: Interannual variability in Saturn's stratosphere? Icarus 233, 281–292.
Smith, B.A. et al., 1982. A new look at the Saturn system – The Voyager 2 images. Science 215, 504–537.
Smith, G.R. et al., 1983. Saturn's upper atmosphere from the Voyager 2 EUV solar and stellar occultations. J. Geophys. Res. 88, 8667–8678.
Tokunaga, A.T. et al., 1978. Spatially resolved infrared observations of Saturn. II – The temperature enhancement at the South Pole of Saturn. Icarus 36, 216–222.
West, R.A., Friedson, A.J., Appleby, J.F., 1992. Jovian large-scale stratospheric circulation. Icarus 100, 245–259.
Yelle, R.V., Griffith, C.A., Young, L.A., 2001. Structure of the jovian stratosphere at the Galileo probe entry site. Icarus 152, 331–346.
Zhang, X., Shia, R.-L., Yung, Y.L., 2013. Jovian stratosphere as a chemical transport system: Benchmark analytical solutions. Astrophys. J. 767, 172.

D.2 Hue et al. (2015b)

Article soumis[1] le 13 Mars 2015 dans la revue Icarus intitulé :

"*2D photochemical modeling of Saturn's stratosphere. Part II : Feedback between composition and temperature*"

1. L'article est actuellement en révision. Les résultats présentés dans le chapitre 3 comportent la version corrigée de l'article.

2D photochemical modeling of Saturn's stratosphere. Part II: Feedback between composition and temperature

V. Hue[a,b,*], T. K. Greathouse[c], T. Cavalié[d], M. Dobrijevic[a,b], F. Hersant[a,b]

[a] *Université de Bordeaux, Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, UMR 5804, F-33270 Floirac, France*
[b] *CNRS, Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, UMR 5804, F-33270, Floirac, France*
[c] *Southwest Research Institute, San Antonio, TX 78228, United States*
[d] *Max-Planck-Institut für Sonnensystemforschung, 37077, Göttingen, Germany*

Abstract

Keywords: **Giant planets, Stratosphere, Thermal Structure, Photochemistry, Composition**

1. Introduction

Similar to the Earth, Saturn's obliquity of 26.7° produces seasons forced by its 29.5 years orbital period. Insolation thus varies with latitude along that cycle. The atmospheric response to this forcing has been witnessed by Cassini spacecraft clearly in the stratospheric temperature and subtly chemical composition (Fletcher et al., 2010; Orton et al., 2008; Sinclair et al., 2013).

Saturn's stratospheric thermal structure is controlled by the heating due to near-IR methane (CH_4) absorption bands while the cooling is dominated by mid-IR emission lines of acetylene (C_2H_2), ethane (C_2H_6) and CH_4 (Greathouse et al., 2008). Saturn's stratospheric composition is, on the other hand, controlled by CH_4 photolysis in the UV spectral range. The recombination of the radicals produced by this photolysis initiates the production of numerous hydrocarbons, C_2H_6 and C_2H_2 being the most abundant ones (e.g. Moses and Greathouse 2005; Hue et al. 2015).

Consequently, there is an interesting feedback to study here. The seasonally variable insolation received by Saturn as a function of latitude produces variations in the atmospheric heating/cooling rates, while producing, at the same time, variations in the amount of coolants due to photochemical processes. These processes have different timescales, meaning only a 3D-GCM that would simultaneously solves the photochemistry, radiative and dynamical equations would be trustworthy. Such a solution requires computational means that are beyond our capabilities at the moment.

Therefore, the problem is usually decoupled using different numerical tools. The effect of solar energy input on the Saturn's stratospheric temperature is inferred from radiative-convective equilibrium models (see e.g. Bezard and Gautier 1985; Greathouse et al. 2008; Guerlet et al. 2014)

*Tel: +33-5-5777-**6164**
Email address:
Vincent.Hue@obs.u-bordeaux1.fr (V. Hue)

while its effect on the atmospheric composition is inferred from photochemical models (Moses and Greathouse, 2005; Dobrijevic et al., 2011; Hue et al., 2015).

The already existing radiative-convective equilibrium models generally assume a meridionally uniform distribution of atmospheric coolants (Greathouse et al., 2008; Guerlet et al., 2014). These assumed spatial distributions of coolants come from Cassini/CIRS observations (Guerlet et al., 2009, 2010) or ground-based observations (Greathouse et al., 2005). However, the time-dependence of the spatial distribution of coolant has been neglected so far. The main reason being that little temporal coverage of the observed distribution of hydrocarbons exists.

Moreover, until recently the photochemical models published in the literature (Moses and Greathouse, 2005; Guerlet et al., 2010) did not account for the temporal evolution of temperature and only tested the influence of its spatial variability as sensitivity cases. Hue et al. (2015) made a first attempt to use a realistic thermal field, i.e. a thermal field that evolves with latitude and time, in a pseudo-2D photochemical model. In this work, the stratospheric temperatures were computed by the radiative equilibirum model of Greathouse et al. (2008). Even in the latter study, the problem stayed uncoupled: the feedback between chemistry and temperature was never accounted for. In this paper, we study how the temperature is affected by using a more realistic distribution of atmospheric coolants and how such a temporally variable thermal field impacts the atmospheric composition in return. Furthermore, in the framework of the future development of more complex models that will solve at the same time the hydrodynamics and photochemical equations, we aim to asses if a stationary state can be reached in such an approach.

In the first part of this paper, we describe how the two numerical models have been coupled. Then, we present the feedback of each model on one another, i.e. the impact of a seasonally variable chemical composition on the predicted stratospheric temperature and vice-versa. Finally, we compare the iterated thermal field and abundance distributions with observations.

2. Description of the model

We first briefly decribe here the photochemical model used to compute the chemical composition. Then, we describe the radiative equilibrium model used to compute the stratospheric temperatures. A more detailed decription of these models can be found in the associated publications.

2.1. Photochemical model

The photochemical model used to compute the chemical abundances is the pseudo-2D (altitude-latitude) time-dependent model presented in Hue et al. (2015). This model accounts for the variation of the seasonally dependent orbital parameters such as the subsolar latitude and the heliocentric distance. The ring shadow effects on the atmospheric chemistry are accounted for, following the prescription of Guerlet et al. (2014), and are based on stellar occultation measurements published by Colwell et al. (2010). The chemical scheme used in this model is based on the work of Loison et al. (2014), in which the chemical scheme has been greatly improved thanks to previous work (Hébrard et al., 2013; Dobrijevic et al., 2014). Following the methodology

of Dobrijevic et al. (2011), the chemical scheme has been reduced by Cavalié et al. (2015) in terms of number of species and reactions to make it useable by 2D-3D photochemical models of Saturn.

The photochemical equations were integrated over Saturn's sampled orbit. The hydrocarbon chemistry is mainly driven by methane photolysis that occurs in the higher stratosphere (around 10^{-4} mbar). From there, the produced hydrocarbons diffuse down to the lower stratosphere. Several orbits were necessary for the abundances to converge down to the 1 bar pressure level.

Finally, the pressure-temperature background used in the photochemical model comes from the radiative equilibrium model described below.

2.2. Radiative model

The temperature field is inferred from the multi-layer radiative equilibrium model developed by Greathouse et al. (2008). Consistently with the photochemical model presented above, it accounts for the same evolution in the seasonally variable parameters. The ring shadowing effects are accounted for following the formalism of Bézard (1986) and Moses and Greathouse (2005). The heating due to CH_4 absorption in the near-infrared, visible and UV spectral range is included as well as C_2H_2, C_2H_4 and C_2H_6 absorption in the UV range in a direct beam radiative transfer model (following the Beer-Lambert law). Cooling within the mid- to far-infrared range due to CH_4, C_2H_2 and C_2H_6 line emissions is included and follows the formalism of Goukenleuque et al. (2000). The continuum emission in the far-infrared range due to collision-induced absorption of H_2-H_2, H_2-He and H_2-CH_4 is accounted for using the formalism of Borysow et al. (1985); Borysow and Frommhold (1986); Borysow et al. (1988).

The spectroscopic line information are taken from GEISA03 (Jacquinet-Husson et al., 1999), HITRAN (Rothman et al., 2005) and from (Vander Auwera et al., 2007). From this information, κ-coefficient tables are produced for each molecule. This allows to modify each molecule abundance within a run independently from one another, while avoiding the re-calculation of the full κ-coefficient tables each time one of the absorbers/coolants abundance is altered. This allows a substantial reduction of the computational cost.

The C_2H_2 and C_2H_6 distributions which were assumed for the first run come from Cassini/CIRS observations at planetographic latitude of 45°S published by Guerlet et al. (2009). These vertical profiles are kept constant with latitude and time to compute the initial thermal field.

3. Thermal and chemical feedbacks

We here describe how the two models have been coupled. First, we run the radiative equilibrium model assuming the uniform distribution of absorbers and coolants retrieved by Guerlet et al. (2009). Then, we used the resulting thermal field as an input to the photochemical model. The seasonal distribution of abundance obtained at this point of the study is identical to the one presented by Hue et al. (2015), i.e. their (S) thermal field study case. Then, the radiative equilibrium model was run again accounting for the seasonal distribution of absorbers and coolants obtained from the photochemical model.

A chart showing the way the two models have been coupled is displayed in Fig. 1. The linestyles used in the following plots are presented in this figure.

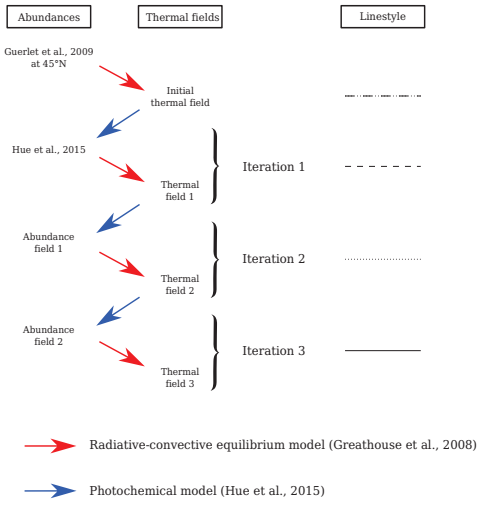

Figure 1: Presentation of the model of Greathouse et al. (2008) and the model of Hue et al. (2015). We used the linestyle associated to each iteration presented in this figure in the following plots. The use of the initial thermal field in the photochemical model reproduces the results of the (S) thermal field of Hue et al. (2015). Red arrows denote the runs of the radiative equilibrium model with a given abundance distribution while blue arrows denote the runs of the photochemical model with a given thermal field.

These steps were repeated until the convergence between the two models was reached, i.e. when there were no significant modifications of the thermal field or the abundance distribution of absorbers/coolants from one step to the other.

Greathouse et al. (2008) showed that, depending on the stratospheric level considered, the chemical species that is responsible for the main cooling effect is expected to vary. For instance, they showed that C_2H_2 is the main coolant at 10^{-2} mbar, while C_2H_6 generally dominates the cooling at 0.1 mbar. Between 0.1 and 10^{-2} mbar, C_2H_2, C_2H_6 and CH_4 are the main coolants. In the lower stratosphere, at 10 mbar, the collision-induced absorption of H_2-H_2, H_2-He and H_2-CH_4 is predicted to be the main cooling mechanism, in addition to a small contribution from C_2H_6.

Here we will present the seasonal evolution of the temperature at the different iterations, as well as the C_2H_2 and C_2H_6 abundances at 10^{-2} mbar (Fig. 2) and 1 mbar (Fig. 4) where they dominate the cooling. Hue et al. (2015) showed that the impact of a seasonally variable thermal field on the chemical composition was maximum where the seasonal thermal gradients were also maximum, i.e. the higher the latitude, the stronger these effects. Therefore, we will only present the results at 80°S and 40°N, where the feedback between chemistry and stratospheric temperature is expected to be strong. The same general trends are observed at both latitudes, although more pronounced at 80°S. Therefore, in the following sections, we focus mainly on discussing the results at 80°S. For the sake of comprehension, the linestyles has been kept coherent between temperatures and hydrocarbon abundances (see Fig. 1). We stopped iterating between the models when no differences

from one step to the next were observed. Therefore, the predicted thermal and abundance distributions field at the last iteration must be seen as the converged thermal and abundance distributions field.

3.1. Thermal and chemical feedbacks in the upper stratosphere (10^{-2} mbar)

At 10^{-2} mbar (Fig. 2), the initial run of the radiative model predicts that the temperature (upper panel) reaches a maximum shortly after the summer solstice. Since this thermal field accounts for a uniform distribution of coolants, the solar zenith angle and Saturn's heliocentric distance are the main quantities driving the stratospheric temperature peak at this pressure level.

After the first iteration, we noticed important changes in the thermal field at 80°S, because the radiative equilibrium model now assumes a seasonally variable distribution of coolants. The seasonal temperature peak at 10^{-2} mbar is now occurring before the southern summer solstice. The origin of this early temperature peak is caused by the small amount of C_2H_2 and C_2H_6 during the early spring season in the southern hemisphere from mid- to high-latitudes, as predicted by the photochemical model (lower panel on Fig. 2). Indeed, the photochemical model predicts that the amount of C_2H_2 and C_2H_6 are maximum after the summer solstice. Therefore, in the early spring season, the increase in the upper-stratospheric temperature, mainly due to CH_4 near-IR absorption is not efficiently compensated by the mid- to far-IR cooling of C_2H_2 and C_2H_6, whose abundances are low at that time of the year. Later during that season, when the CH_4 UV-photolysis has led to the production of substantial amounts of C_2H_2 and C_2H_6, the temperature at this level shows the opposite trend and starts decreasing from mid-spring until the summer season in the southern hemisphere. Similarly, during the autumn and winter seasons, the predicted amount of C_2H_2 and C_2H_6 at iteration 1 are now lower than in the initial one. Due to this lower amount of coolants, the predicted thermal field is hotter than the one using the initial distribution of abundances.

The seasonal evolution of the thermal field at the following iterations are very similar to the ones predicted at iteration 1, except during the spring season where little differences are noted. The convergence is reached at iteration 3.

The moment of the year when the initial thermal field and the converged thermal field reach a maximum is displayed in Fig. 5. At 80°S, the seasonal temperature peak is shifted with respect to the maximum insolation (which occurs at $L_S = 270°$ in the southern hemisphere) due to Saturn's perihelion. Indeed, this maximum occurs at $L_S = 280°$. The temperature peak at iteration 3 now occurs 40° earlier in heliocentric longitude with respect to the initial thermal field.

The modification of the thermal field affects the seasonal distribution of C_2H_2 and C_2H_6, as shown by Hue et al. (2015). First, the modification of the thermal field amplitude will affect the location of the homopause, by shifting it to lower-pressure levels if the thermal field becomes hotter than the initial one. This shift in the position of the homopause will therefore modify the integrated production rates of radicals, which affects the production of hydrocarbons. Then, the increase in the seasonal thermal gradient will affect the diffusion of the photolysis by-products to higher-pressure levels, throughout a greater seasonal contraction/dilation of the atmo-

spheric column. Indeed, Hue et al. (2015) showed that, when the atmosphere contracts during winter time, the vertical mole fraction gradient on the altitude grid increases and causes the compounds to diffuse faster toward the lower atmosphere.

This last feedback on the predicted distribution of hydrocarbons is mainly observed during the southern winter season although that effect is not significant when compared to Cassini's limb observations error bars. The predicted temperatures at iteration 1 are greater than the initial ones during the winter season, therefore the contraction of the atmospheric column during that season is less important. This therefore makes the predicted abundances of C_2H_2 and C_2H_6 stay higher through iterations 2 and 3.

Additionally, the Southern early spring peak in the thermal field at iteration 1, causes C_2H_2 and C_2H_6 to be more abundant at iteration 2 and 3 than at iteration 1 during that same season, although this effect is small. Indeed, the shift of the homopause to higher-pressure level, caused by the hotter thermal field, triggers the production of a slightly higher amount of C_2H_2 and C_2H_6 above that level. In that region, C_2H_2 is mainly produced through the C_2H_4 photolysis and C_2H_6 through the CH_3-CH_3 reaction.

An identical behavior has been noticed at 40°N (Fig. 2, blue and green lines). At this latitude, the thermal and chemical feedbacks are similar to the one observed at 80°S, although less pronounced due to the lower seasonal variation of insolation. The southern early spring temperature peak is also noted as well as the subsequent feedback between chemical composition and atmospheric temperature at the next iterations.

The seasonal evolution of the initial ther-

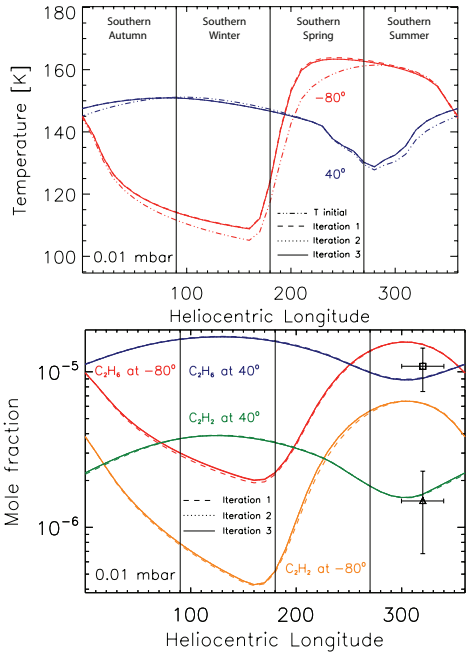

Figure 2: Seasonal evolution of temperature (upper panel) and hydrocarbon abundances (C_2H_2 and C_2H_6, lower panel) at 10^{-2} mbar and planetographic latitudes of 40°N and 80°S. The various linetypes depict the different iterations. At 40°N, C_2H_2 is displayed in green and C_2H_6 in blue. At 80°S, C_2H_2 is displayed in orange and C_2H_6 in red. The square and triangle data points respectively represent the observed C_2H_6 and C_2H_2 hydrocarbon abundances observed by Cassini (Guerlet et al., 2009) and used to compute the initial thermal field. These initial hydrocarbon distributions come from Cassini/CIRS observations and are assumed to be constant with latitude and time during the first run of the radiative equilibrium model. The horizontal uncertainty on Cassini/CIRS observations comes from the temporal range over which these observations have been performed.

mal field as well as the converged thermal field (i.e. iteration 3) at 10^{-2} mbar are presented in Fig. 3. The blue feature at mid-latitudes in the winter hemisphere, centered around the winter solstice in this hemisphere is caused by the ring shadowing effect (see Moses and Greathouse 2005; Hue et al. 2015). The time-shift in heliocentric longitude (or L_s) of the temperature peak in the spring season increases with increasing latitude.

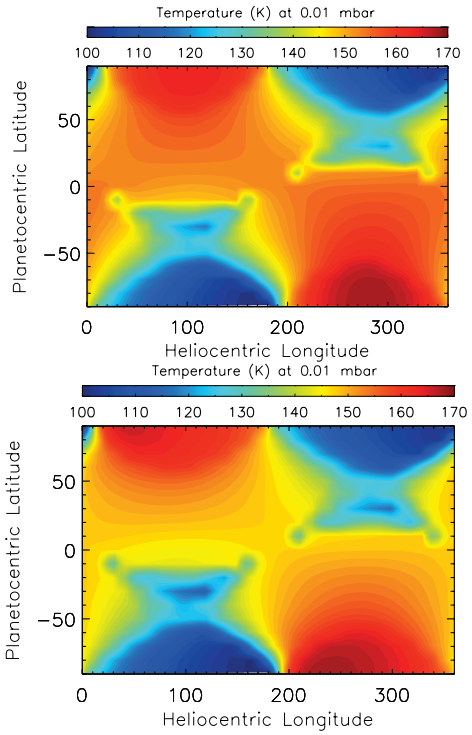

Figure 3: Thermal field at 10^{-2} mbar as a function of planetographic latitude and heliocentric longitude. The upper panel depicts the initial thermal field that assumes a spatio-temporally uniform distribution of C_2H_2 and C_2H_6. The lower panel presents the converged thermal field, after 3 iterations with the 2D-photochemical model.

At 10^{-2} mbar, the feedback between chemical composition and stratospheric temperatures is important, due to the highly variable amount of C_2H_2 and C_2H_6. However, this situation is no longer true at higher-pressure level, as recent photochemical models of Moses and Greathouse (2005) and Hue et al. (2015) have shown that the seasonal variability was decreasing with increasing pressure.

3.2. Thermal and chemical feedbacks in the lower stratosphere (1 mbar)

At 1 mbar (Fig. 4), the feedback between chemical composition and stratospheric temperatures is less pronounced than it is in the upper stratosphere. The shift in the moment when the summer temperature peak occurs in the converged thermal field with respect to the initial thermal field becomes progressively less important with increasing pressure, as shown in Fig. 5. The deeper in the atmosphere, the less important the shift in the moment where the summer temperature peak occurs.

At this pressure level, the summer temperature peak of the converged thermal field is occurring shortly after the summer solstice, similarly to the behavior of the initial thermal field. The seasonal variability of C_2H_6 is small while it is still significant for C_2H_2, in agreement with Moses and Greathouse (2005) and Hue et al. (2015). C_2H_6 is the main coolant at 1 mbar almost all along the year except at high latitudes during the winter season, where the collision-induced far-IR opacities dominates (Greathouse et al., 2005). Thus, the thermal feedback that results from accounting for a seasonally variable atmospheric composition with respect to a supposed constant hydrocarbon distribution is weak here,

due to the predicted low seasonal variability of that compound.

The C_2H_6 abundance from mid- to polar latitudes are underpredicted with respect to the Cassini observations that were used as a-priori to compute the initial thermal field. This underprediction increases with latitude up to 72% at 80°S and at heliocentric longitude of 260°. The predicted thermal fields at iterations 1 to 3 are subsequently hotter than the initial one. The seasonal gradient in the thermal field is increased when accounting for the seasonally variable hydrocarbon distribution. This increase in the seasonal gradient becomes gradually more important with increasing latitudes.

C_2H_6 is mainly produced by the CH_3-CH_3 reaction around 10^{-4} mbar and then diffuses to higher-pressure levels. The seasonal evolution of C_2H_6 at pressure levels higher than 10^{-4} mbar is therefore related to the seasonal evolution of C_2H_6 at 10^{-4} mbar. A clear correlation is observed between the seasonal evolution of C_2H_6 at 10^{-2} mbar and 1 mbar, between the different iterations at 80°S. Indeed, the increase noted at 1 mbar in the C_2H_6 abundance from winter until summer seasons at iteration 2 and 3 corresponds to the increase at lower pressure level during the winter season.

On the other hand, C_2H_2 main production regions are deeper in the atmosphere than the one of C_2H_6. Indeed, C_2H_6 has a major production region around 10^{-4} mbar while C_2H_2 is mainly produced around 10^{-2} mbar and around 1 mbar. At the latter two levels, the impact of the thermal field amplitude on the reaction rates is negligible. Therefore, the influence of the thermal field on the C_2H_2 1 mbar abundance is mainly caused by the increase in the thermal field variability and the subsequent faster diffusion of C_2H_2 from lower pressure levels at iterations 2 and 3.

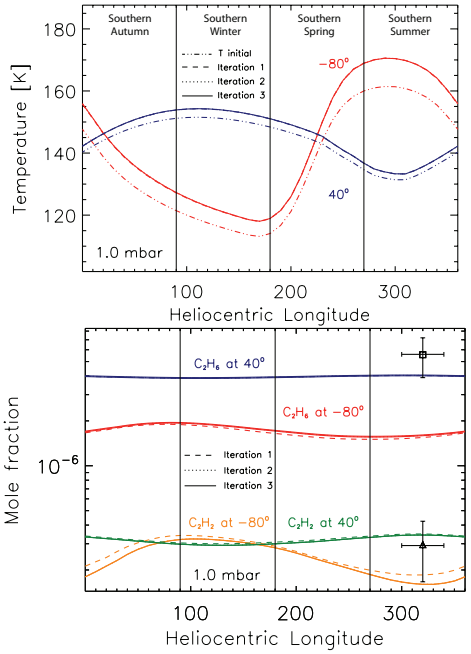

Figure 4: Same as Fig. 2 for pressure level of 1 mbar.

4. Comparison with Cassini observations

Thanks to the Cassini mission, observations of Saturn's stratospheric temperature and hydrocarbon emission have been performed with an unprecedented spatial and temporal coverage, either in nadir (Sinclair et al., 2013; Fletcher et al., 2010) or limb (Guerlet et al., 2009, 2010, 2011) observing geometries. Due to the very small feedback the thermal field has on the abundance distribution (refer to the bottom plots of Figs. 2 and 4), i.e. the abundance changes are not significant when compared

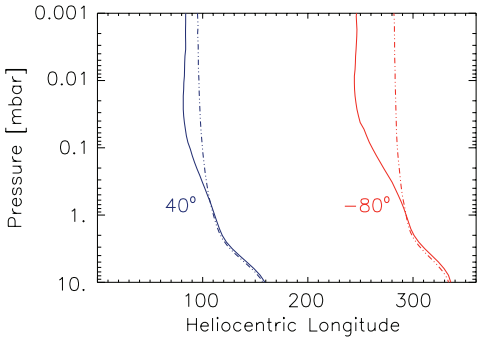

Figure 5: Evolution of the heliocentric longitude of the seasonal temperature peak as a function of pressure. The initial thermal fields and the converged thermal field are displayed by the dashed-double dotted lines and the solid lines, respectively. Planetographic latitudes of 40°N and 80°S are represented in blue and red, respectively.

to the observation error bars, we only focused on how the converged thermal field fits the published observations of temperature. We refer the reader to the paper from Hue et al. (2015) presenting the photochemical model for a comparison between the abundance field and the photochemical predictions. We present now a comparison between the initial and converged thermal fields with Cassini observations of the stratospheric temperature both in limb and nadir observing geometry.

4.1. Comparison with nadir-observations

Nadir observations of temperature provide a good monitoring of the spatial and temporal evolution of Saturn's stratospheric temperature at 1 mbar. The evolution of the temperature at this pressure level is presented in Fig. 6. The observed temperatures were averaged into 1 year-long temporal bins, i.e. 2005-2006 ($L_s \approx 300°$-$313°$, Fig 6a); 2010-2011 ($L_s \approx 5°$-$17°$, Fig 6b) and 2013-2014 ($L_s \approx 41°$-$52°$, Fig 6c). The meridional profile of the initial thermal field and the converged thermal field are presented over the same period, i.e. $L_s = 306°$ for the 300°-313° period, $L_s = 11°$ for the 5°-17° period and $L_s = 46°$ for the 41°-52° period.

The equatorial temperatures predicted by the initial thermal field and the converged one are in very good agreement one another. Indeed, as shown in Figs. 2 and 4, the higher the latitude, the greater the feedback between the abundance and the thermal fields is. Due to the equatorial low feedback as well as the good reproduction of the a-priori abundance values in that region used to compute the initial thermal field, the predicted temperatures in the equatorial region at iteration 3 are close to the initial ones. However, the predicted thermal fields, both the initial and converged one, cannot explain the temperature peak in the equatorial region observed by Cassini in 2005-2006 as well as the temperature minima observed in 2013-2014. These local extrema in the temperature field are associated with the Saturn's Semi-Annual Oscillation (SSAO) (Fouchet et al., 2008; Orton et al., 2008; Guerlet et al., 2011). We remind the reader that neither the photochemical nor the radiative equilibrium model aim to reproduce this phenomenon which can be only studied in the framework of a 3D-GCM.

The local minimum predicted in 2005-2006 (Fig. 6a) between 20°N and 30°N is caused by the ring occultation (see for instance Greathouse et al. 2008 and Hue et al. 2015). Because of the thermal inertia at this pressure level, these effects are still observed in 2010-2011 (Fig. 6b) in the northern hemisphere, although the ring shade is on the southern hemisphere at that time of the year. Finally, in 2013-2014 (Fig. 6c), these effects are observed in the southern hemi-

sphere, between 20°S and 30°S. These local minimums, linked to the ring occultation, are consistent with the radiative model of Guerlet et al. (2014), but disagree with the observations, which never show such feature under the ring. A dynamical scenario involving heating associated with subsidence under the ring's shadow was previously proposed by Guerlet et al. (2009, 2010), and is consistent with the predicted circulation of Friedson and Moses (2012).

From Fig. 6 it is clear that accounting for the feedback between the chemical composition and the atmospheric temperature does not better fit the absolute value of the temperature observed by Cassini. However, accounting for this feedback modifies the meridional gradient of the predicted temperature.

The southern meridional gradient of the predicted temperature for the 2005-2006 period (Fig. 6a) is increased at iteration 3 with respect to the initial one. This gradient (0.23 K/°) is significantly closer to the value observed by Cassini (0.39 K/°) than the one predicted assuming a uniform distribution of absorbers and coolants (0.13 K/°). At the same period in the northern hemisphere, the meridional gradient of the thermal field at iteration 3 is slightly flattened with respect to the initial one. This converged thermal field gradient (0.12 K/°) represents a slight improvement with respect to the initial one (0.2 K/°) at latitudes ranging from 50°N to almost 80°N, when compared to Cassini observations.

The southern meridional thermal gradient is also modified for the 2010-2011 period (Fig. 6b), for which the converged thermal field predicts a flatter southern meridional gradient while the initial one predicts a negative equator-to-south pole thermal gradient. The converged thermal field is closer to the slightly increasing observed thermal gradient in that hemisphere.

In 2013-2014 (Fig. 6c), the converged thermal field predicts that both the northern and southern temperature meridional gradients are flatter than the initial one. In the southern hemisphere between 40°S and 70°S, the converged thermal field predict a meridional gradient of -0.23 K/° while the initial one predict a gradient of -0.33 K/°, the converged one being therefore closer from the observed value of -0.15 K/°.

Although accounting for the feedback between the thermal field and the chemical composition does not provide a better overall fit of the temperature absolute value measured by Cassini, it however brings the meridional thermal gradients closer to the ones observed by Cassini. Generally, the converged thermal field predicts a greater meridional thermal gradient in both hemisphere than the one predicted by the initial thermal field. Indeed, this gradient becomes flatter when the initial thermal field predicts a negative equator-to-pole gradient, i.e. the temperature decreases with increasing latitude, while this gradient is increased when the initial thermal field predict either a flat or a positive equator-to-pole gradient.

4.2. Comparison with limb-observations

Despite the lower temporal coverage of the Cassini limb-observations, these data provide valuable information on the vertical structure of the atmospheric emission and therefore serve as good vertical constrains of stratospheric temperature and strongest emitting hydrocarbons. Guerlet et al. (2009) retrieved the vertical structure of the temperature, as well as C_2H_2 and C_2H_6, from roughly 5 mbar to 5×10^{-3} mbar and over a temporal window ranging from

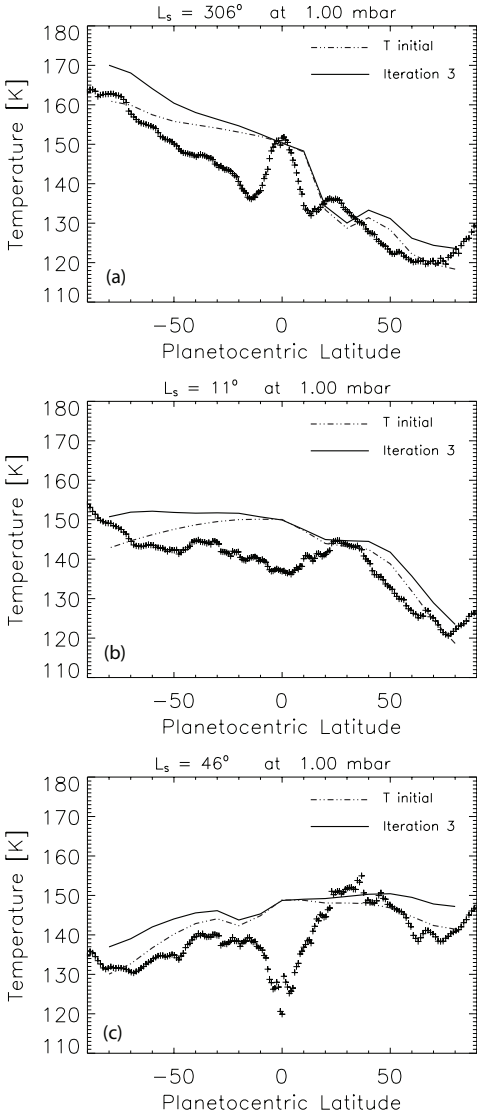

Figure 6: Temporal evolution of the meridional profile of temperature at 1 mbar, in 2005-2006 (top panel), 2010-2011 (middle panel) and 2013-2014 (lower panel) observed by Cassini (Fletcher et al., 2015a,b). Prediction of the meridional temperature profile assuming the initial distribution of absorbers and coolants and at iteration 3 are denoted by dashed-triple dotted and dotted lines, respectively. The errors bar on the temperature have not been overplotted, for the sake of clarity. The typical errors on temperature are ± 2-3 K.

L_s = 300° to 340°. We present a comparison between the thermal field that assumes the initial distribution of absorbers and coolants as well as the converged thermal field with the observations of the temperature in Fig. 7.

Similarly to the comparison with Cassini nadir observations, the converged thermal field at L_S = 320° generally suggests an increase in the meridional thermal gradient. Because the equatorial zone is altered by the SSAO and there is a lack of data in the northern hemisphere, we discuss only the predicted meridional gradient in the southern hemisphere.

At a pressure level of 10^{-2} mbar (Fig. 7a), Cassini observations tend to suggest a flat meridional thermal gradient in the southern hemisphere. This gradient is in better agreement with the predicted gradient of the initial thermal field (0.11 K/°) than with the converged one (0.2 K/°). However, at 10^{-1} mbar (Fig. 7b and 1 mbar (Fig. 7c), the increased meridional gradient predicted by the converged thermal field (0.23 K/° and 0.22 K/° for Fig. 7b and Fig. 7c, respectively) is in better agreement with the Cassini observations than the initial one (0.10 K/° and 0.11 K/° for Fig. 7b) and Fig. 7c, respectively).

4.3. Discussions

As noted above, accounting for the feedback between the abundance and thermal fields does not represent an improvement in terms of the temperature predicted absolute value when compared to Cassini observations. Indeed, the temperatures predicted by the converged thermal field are generally warmer than the observed values by up to 10 K while the initial thermal field most of the time predicts temperature closer from the observed value. We

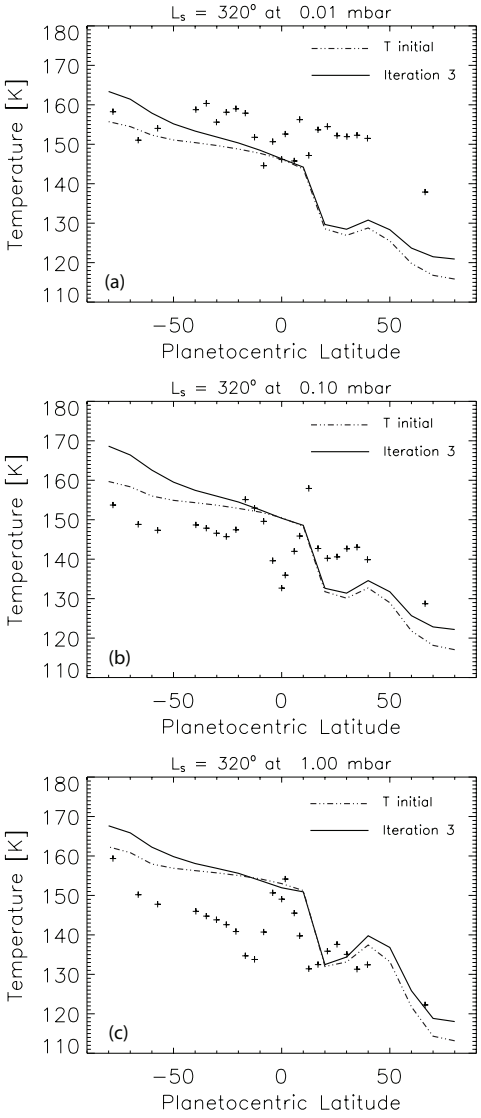

Figure 7: Comparison between retrieved temperature of Guerlet et al. 2009 and predicted thermal field at $L_s = 320°$. Dashed triple-dotted lines and dotted lines assume repectively the initial and converged distribution of absorbers and coolants. Upper, middle and lower panel denote the evolution of these stratospheric temperatures at 10^{-2}, 10^{-1} and 1 mbar, respectively. The typical uncertainties on temperature are ± 1-2 K

found that the only benefit of accounting for this feedback is that it provides a better fit to the observed meridional temperature gradients. We remind the reader that neither the photochemical model nor the radiative equilibrium model account for the atmospheric dynamics. Dynamics are expected to modify the distribution of absorbers and coolants and therefore impact the thermal field. Therefore, it seems that only a 3D-GCM that simultaneously accounts for the hydrocarbon chemistry produced by the methane photolysis would be trusworthy in the atmospheric temperature predictions. Furthermore, the temperature perturbations caused by the SSAO could also only be investigated within the framework of such a model.

The few existing 3D-GCM of Saturn (Friedson and Moses, 2012; Guerlet et al., 2014) do not account for the hydrocarbon chemistry, as they generally assume an observed vertical profile of C_2H_2 and C_2H_6, and a predicted vertical profile of CH_4. These profiles are assumed to be meridionally uniform and without any temporal evolution.

At the moment, the present coupling between photochemical model and radiative equilibrium model represents the most reliable description of the feedback between the abundance and thermal field in Saturn, despite the fact that it does not yet include the atmospheric dynamic. Such a coupling should be investigated in 3D-GCM.

5. Conclusions

In this work, we have coupled a radiative equilibrium model (Greathouse et al., 2008) to a photochemical model (Hue et al., 2015) in order to study Saturn's stratospheric composition and temperature. The

former one gives a prediction of the thermal field in Saturn's stratosphere given an a-priori hydrocarbon distribution while the latter one gives an a-priori prediction of this hydrocarbon distribution, given a pressure-temperature background. These hydrocarbons are crucial as they rule Saturn's atmospheric heating and cooling rates and therefore its temperature (Bezard and Gautier, 1985; Greathouse et al., 2008; Guerlet et al., 2014). This temperature and its seasonal evolution are also important because it has been shown that they influence the atmospheric chemistry (Hue et al., 2015). The photochemical and the radiative equilibrium models both account for the evolution of the seasonally variable parameters such as obliquity, eccentricity of Saturn's orbit and ring shadowing.

The radiative model was first used to compute the thermal field, using Cassini limb observations of Guerlet et al. (2009) as a-priori. This first run of the radiative model was previously compared to Cassini observations of temperature by Fletcher et al. (2010). The computed thermal field was then used as the background pressure-temperature in the photochemical model, similarly to the previous work of Hue et al. (2015), in which the results were compared to Cassini observations (Guerlet et al., 2009). The abundance field computed by the photochemical model was then injected into the radiative equilibrium model, and so on. Several iterations between the radiative equilibrium model and the photochemical model were needed for the thermal and abundance fields to converge.

This study suggests two major new insights:

• The feedback between the radiative equilibrium model and the photochemical model predicts that the moment of the year when the temperature peaks at high latitudes is affected. Indeed, when using the meridionally uniform spatial distribution of absorbers and coolants, this peak to expected to occur at the solstice itself. However, when accounting for the seasonal evolution of absorbers and coolants, this peak is shifted earlier during the spring season, even before solstice. The main stratospheric coolants in Saturn atmosphere are C_2H_2 and C_2H_6. At the beginning of the spring season at high latitudes, which just experienced winter, the amount of these coolants is low due to the previous winter's low insolation level. Therefore, the amount of these coolants is not high enough to efficiently cool the stratosphere, which causes this early temperature peak. By the middle of the spring season, the amount of coolants becomes high enough so that the stratosphere cools slowly all along the summer season. This effect is particularly pronounced at low-pressure level, where the C_2H_2 and C_2H_6 chemical timescale are short, and progressively disappears at higher-pressure levels.

• Accounting for that feedback modifies the predicted temperature meridional gradient. Indeed, the predicted temperature meridional gradient of the converged thermal field is generally increased with respect to the initial thermal field that accounts for a meridionally and temporally uniform distribution of atmospheric absorbers and coolants. Hue et al. (2015) have indeed shown that the impact which results from accounting for a seasonally variable thermal field increases with latitude. Although the absolute temperatures predicted by the converged thermal field are generally in worst agreement with Cassini observations with respect to the initial thermal field, the predicted temperature meridional gradient is

generally closer from the one observed.

It is remarquable to note that very little a-priori information from observations were used to compute the thermal and abundance converged field. In fact, the only parameter used in the photochemical model as well as in the radiative equilibrium model is the eddy diffusion coefficient that rules how fast the methane photolysis by-products diffuse down to the lower stratosphere.

Finally, this work underlines the importance of coupling the chemistry with the radiative calculations, as demonstrated by the sensitivity of the feedback that the amount of coolant has on the predicted temperature. Despite the moderate agreement with Cassini data we found in terms of temperature absolute values, this is nevertheless the approach to follow toward a better comprehension of the seasonal evolution of the giant planet stratospheric thermal field as well as the potential radiatively-driven circulations.

6. Acknowledgement

This work has been supported by the *Investissements d'avenir* program from *Agence Nationale de la Recherche* under the reference ANR-10-IDEX-03-02 (IdEx Bordeaux). Part of this work was done by V.H. at Southwest Research Institute, San Antonio.

References

Bézard, B., 1986. Variations saisonnières de la structure thermique et composition chimique de jupiter, saturne et uranus. Ph.D. thesis.

Bezard, B., Gautier, D., Feb. 1985. A seasonal climate model of the atmospheres of the giant planets at the Voyager encounter time. I - Saturn's stratosphere. Icarus 61, 296–310.

Borysow, A., Frommhold, L., May 1986. Theoretical collision-induced rototranslational absorption spectra for the outer planets - H2-CH4 pairs. Astrophys. J.l 304, 849–865.

Borysow, J., Frommhold, L., Birnbaum, G., Mar. 1988. Collison-induced rototranslational absorption spectra of H2-He pairs at temperatures from 40 to 3000 K. Astrophys. J.l 326, 509–515.

Borysow, J., Trafton, L., Frommhold, L., Birnbaum, G., Sep. 1985. Modeling of pressure-induced far-infrared absorption spectra Molecular hydrogen pairs. Astrophys. J.l 296, 644–654.

Cavalié, T., Dobrijevic, M., Fletcher, L. N., Loison, J. C., Hickson, K. M., Hue, V., Hartogh, P., 2015. The photochemical response to the variation of temperature in Saturn's 2011-2012 stratospheric vortex. Astron. Astrophys., in prep.

Colwell, J. E., Esposito, L. W., Jerousek, R. G., Sremčević, M., Pettis, D., Bradley, E. T., 2010. Cassini UVIS Stellar Occultation Observations of Saturn's Rings. Astron. J. 140, 1569–1578.

Dobrijevic, M., Cavalié, T., Billebaud, F., 2011. A methodology to construct a reduced chemical scheme for 2D-3D photochemical models: Application to Saturn. Icarus 214, 275–285.

Dobrijevic, M., Hébrard, E., Loison, J. C., Hickson, K. M., 2014. Coupling of oxygen, nitrogen, and hydrocarbon species in the photochemistry of Titan's atmosphere. Icarus 228, 324–346.

Fletcher, L. N., Achterberg, R. K., Greathouse, T. K., Orton, G. S., Conrath, B. J., Simon-Miller, A. A., Teanby, N., Guerlet, S., Irwin, P. G. J., Flasar, F. M., Jul. 2010. Seasonal change on Saturn from Cassini/CIRS observations, 2004-2009. Icarus 208, 337–352.

Fletcher, L. N., Irwin, P. G. J., Sinclair, J. A., Orton, G. S., Giles, R. S., Hurley, J., Gorius, N., Achterberg, R. K., Hesman, B. E., Bjoraker, G. L., Apr. 2015a. Seasonal evolution of Saturn's polar temperatures and composition. Icarus 250, 131–153.

Fletcher, L. N., Moses, J. I., Greathouse, T. K., Guerlet, S., West, R., 2015b. Saturn's seasonally changing stratosphere and troposphere: Thermal structure, composition, and chemistry. In: Baines, K., Flasar, M., Krupp, N., Stallard, T. (Eds.), Saturn in the 21st Century. Cambridge University Press.

Fouchet, T., Guerlet, S., Strobel, D. F., Simon-Miller, A. A., Bézard, B., Flasar, F. M., 2008. An equatorial oscillation in Saturn's middle at-

mosphere. Nature 453, 200–202.

Friedson, A. J., Moses, J. I., 2012. General circulation and transport in Saturn's upper troposphere and stratosphere. Icarus 218, 861–875.

Goukenleuque, C., Bézard, B., Joguet, B., Lellouch, E., Freedman, R., Feb. 2000. A Radiative Equilibrium Model of 51 Peg b. Icarus 143, 308–323.

Greathouse, T. K., Lacy, J. H., Bézard, B., Moses, J. I., Griffith, C. A., Richter, M. J., 2005. Meridional variations of temperature, C $_2$H $_2$ and C $_2$H $_6$ abundances in Saturn's stratosphere at southern summer solstice. Icarus 177, 18–31.

Greathouse, T. K., Strong, S., Moses, J., Orton, G., Fletcher, L., Dowling, T., Dec. 2008. A General Radiative Seasonal Climate Model Applied to Saturn, Uranus, and Neptune. AGU Fall Meeting Abstracts, B6.

Guerlet, S., Fouchet, T., Bézard, B., Flasar, F. M., Simon-Miller, A. A., May 2011. Evolution of the equatorial oscillation in Saturn's stratosphere between 2005 and 2010 from Cassini/CIRS limb data analysis. Journal of Geophysical Research (Planets) 38, 9201.

Guerlet, S., Fouchet, T., Bézard, B., Moses, J. I., Fletcher, L. N., Simon-Miller, A. A., Michael Flasar, F., 2010. Meridional distribution of CH_3C_2H and C_4H_2 in Saturn's stratosphere from CIRS/Cassini limb and nadir observations. Icarus 209, 682–695.

Guerlet, S., Fouchet, T., Bézard, B., Simon-Miller, A. A., Michael Flasar, F., 2009. Vertical and meridional distribution of ethane, acetylene and propane in Saturn's stratosphere from CIRS/Cassini limb observations. Icarus 203, 214–232.

Guerlet, S., Spiga, A., Sylvestre, M., Indurain, M., Fouchet, T., Leconte, J., Millour, E., Wordsworth, R., Capderou, M., Bzard, B., Forget, F., 2014. Global climate modeling of saturns atmosphere. part i: Evaluation of the radiative transfer model. Icarus 238 (0), 110 – 124.

Hébrard, E., Dobrijevic, M., Loison, J. C., Bergeat, A., Hickson, K. M., Caralp, F., 2013. Photochemistry of C_3H_p hydrocarbons in Titan's stratosphere revisited. Astron. Astrophys. 552, A132.

Hue, V., Cavalié, T., Dobrijevic, M., Hersant, F., Greathouse, T. K., 2015. 2D photochemical modeling of Saturn's stratosphere. Part I: Seasonal variation of atmospheric composition. Icarus, In revision.

Jacquinet-Husson, N., Arie, E., Ballard, J., Barbe, A., Bjoraker, G., Bonnet, B., Brown, L. R., Camy-Peyret, C., Champion, J. P., Chedin, A., Chursin, A., Clerbaux, C., Duxbury, G., Flaud, J.-M., Fourrie, N., Fayt, A., Graner, G., Gamache, R., Goldman, A., Golovko, V., Guelachvili, G., Hartmann, J. M., Hilico, J. C., Hillman, J., Lefevre, G., Lellouch, E., Mikhailenko, S. N., Naumenko, O. V., Nemtchinov, V., Newnham, D. A., Nikitin, A., Orphal, J., Perrin, A., Reuter, D. C., Rinsland, C. P., Rosenmann, L., Rothman, L. S., Scott, N. A., Selby, J., Sinitsa, L. N., Sirota, J. M., Smith, A. M., Smith, K. M., Tyuterev, V. G., Tipping, R. H., Urban, S., Varanasi, P., Weber, M., May 1999. The 1997 spectroscopic GEISA databank. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 62, 205–254.

Loison, J., Hébrard, E., Dobrijevic, M., Hickson, K., Caralp, F., Hue, V., Gronoff, G., Venot, O., Benilan, Y., 2014. The neutral photochemistry of nitriles, amines and imines in the atmosphere of titan. Icarus (0), –.

Moses, J. I., Greathouse, T. K., 2005. Latitudinal and seasonal models of stratospheric photochemistry on Saturn: Comparison with infrared data from IRTF/TEXES. Journal of Geophysical Research (Planets) 110, 9007.

Orton, G. S., Yanamandra-Fisher, P. A., Fisher, B. M., Friedson, A. J., Parrish, P. D., Nelson, J. F., Bauermeister, A. S., Fletcher, L., Gezari, D. Y., Varosi, F., Tokunaga, A. T., Caldwell, J., Baines, K. H., Hora, J. L., Ressler, M. E., Fujiyoshi, T., Fuse, T., Hagopian, H., Martin, T. Z., Bergstralh, J. T., Howett, C., Hoffmann, W. F., Deutsch, L. K., van Cleve, J. E., Noe, E., Adams, J. D., Kassis, M., Tollestrup, E., 2008. Semi-annual oscillations in Saturn's low-latitude stratospheric temperatures. Nature 453, 196–199.

Rothman, L. S., Jacquemart, D., Barbe, A., Chris Benner, D., Birk, M., Brown, L., Carleer, M., Chackerian Jr, C., Chance, K., Coudert, L. e. a., et al., 2005. The¡ i¿ hitran¡/i¿ 2004 molecular spectroscopic database. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 96 (2), 139–204.

Sinclair, J. A., Irwin, P. G. J., Fletcher, L. N., Moses, J. I., Greathouse, T. K., Friedson, A. J., Hesman, B., Hurley, J., Merlet, C., 2013. Seasonal variations of temperature, acetylene and

ethane in Saturn's atmosphere from 2005 to 2010, as observed by Cassini-CIRS. Icarus 225, 257–271.

Vander Auwera, J., Moazzen-Ahmadi, N., Flaud, J.-M., Jun. 2007. Toward an Accurate Database for the 12 μm Region of the Ethane Spectrum. Astrophys. J.l 662, 750–757.

Bibliographie

Agúndez, M., Parmentier, V., Venot, O., Hersant, F., Selsis, F., Apr. 2014. Pseudo 2D chemical model of hot-Jupiter atmospheres : application to HD 209458b and HD 189733b. Astron. Astrophys. 564, A73.

Allen, C. W., Cox, A. N., 2000. Allen's astrophysical quantities. Springer Science & Business Media.

Allen, M., Yung, Y. L., Waters, J. W., May 1981. Vertical transport and photochemistry in the terrestrial mesosphere and lower thermosphere /50-120 km/. Journal of Geophysical Research 86, 3617–3627.

Appleby, J. F., Jun. 1990. CH4 nonlocal thermodynamic equilibrium in the atmospheres of the giant planets. Icarus 85, 355–379.

Appleby, J. F., Hogan, J. S., 1984. Radiative-convective equilibrium models of jupiter and saturn. Icarus 59 (3), 336 – 366.

Atreya, S. K., Donahue, T. M., Festou, M., Jul. 1981. Jupiter - Structure and composition of the upper atmosphere. Astrophys. J. 247, L43–L47.

Baldwin, M., Gray, L., Dunkerton, T., Hamilton, K., Haynes, P., Randel, W., Holton, J., Alexander, M., Hirota, I., Horinouchi, T., et al., 2001. The quasi-biennial oscillation. Reviews of Geophysics 39 (2), 179–229.

Beer, R., Sep. 1975. Detection of carbon monoxide in Jupiter. Astrophys. J. Lett. 200, L167–L169.

Bézard, B., Drossart, P., Encrenaz, T., Feuchtgruber, H., Dec. 2001. Benzene on the Giant Planets. Icarus 154, 492–500.

Bézard, B., Gautier, D., Feb. 1985. A seasonal climate model of the atmospheres of the giant planets at the Voyager encounter time. I - Saturn's stratosphere. Icarus 61, 296–310.

Bézard, B., Griffith, C. A., Kelly, D. M., Lacy, J. H., Greathouse, T., Orton, G., Jan. 1997. Thermal Infrared Imaging Spectroscopy of Shoemaker-Levy 9 Impact Sites : Temperature and HCN Retrievals. Icarus 125, 94–120.

Birnbaum, G., Borysow, A., Orton, G. S., Sep. 1996. Collision-Induced Absorption of H $_2$-H $_2$and H $_2$-He in the Rotational and Fundamental Bands for Planetary Applications. Icarus 123, 4–22.

Bishop, J., Romani, P. N., Atreya, S. K., Jan. 1998. Voyager 2 ultraviolet spectrometer solar occultations at neptune : photochemical modeling of the 125- ;165 nm lightcurves. Planetary and Space Science 46, 1–20.

Bjoraker, G. L., Stolovy, S. R., Herter, T. L., Gull, G. E., Pirger, B. E., Jun. 1996. Detection of Water after the Collision of Fragments G and K of Comet Shoemaker-Levy 9 with Jupiter. Icarus 121, 411–421.

Borysow, A., Frommhold, L., May 1986. Theoretical collision-induced rototranslational absorption spectra for the outer planets - H2-CH4 pairs. Astrophys. J. 304, 849–865.

Borysow, J., Frommhold, L., Birnbaum, G., Mar. 1988. Collison-induced rototranslational absorption spectra of H2-He pairs at temperatures from 40 to 3000 K. Astrophys. J. 326, 509–515.

Borysow, J., Trafton, L., Frommhold, L., Birnbaum, G., Sep. 1985. Modeling of pressure-induced far-infrared absorption spectra Molecular hydrogen pairs. Astrophys. J. 296, 644–654.

Brillet, J., Parisot, J. P., Dobrijevic, M., Leflochmoen, E., Toublanc, D., 1996. A three-dimensional simulation of transmitted light through planetary atmospheres using Monte-Carlo methods. Adv. Space Res. 17, 223–226.

Brinkman, A. W., McGregor, J., 1979. The effect of the ring system of the solar radiation reaching the top of Saturn's atmosphere - Direct radiation. Icarus 38, 479–482.

Brown, P. N., Byrne, G. D., Hindmarsh, A. C., Sep. 1989. Vode : a variable-coefficient ode solver. SIAM J. Sci. Stat. Comput. 10 (5), 1038–1051.
URL http://dx.doi.org/10.1137/0910062

Butchart, N., 2014. The brewer-dobson circulation. Reviews of Geophysics 52 (2), 157–184.

Byrne, G. D., Hindmarsh, A. C., Nov. 1999. Pvode, an ode solver for parallel computers. Int. J. High Perform. Comput. Appl. 13 (4), 354–365.
URL http://dx.doi.org/10.1177/109434209901300405

Bézard, B., 1986. Variations saisonnières de la structure thermique et composition chimique de jupiter, saturne et uranus. Ph.D. thesis.

Cabannes, J., Rocard, Y., 1929. La théorie électromagnétique de maxwell-lorentz et la diffusion moléculaire de la lumière. J. Phys. Radium 10 (2), 52–71.

Cadle, R. D., Jul. 1962. The Photochemistry of the Upper Atmosphere of Jupiter. Journal of Atmospheric Sciences 19, 281–285.

Carlson, B. E., Caldwell, J., Cess, R. D., Aug. 1980. A model of Saturn's seasonal stratosphere at the time of the Voyager encounters. Journal of Atmospheric Sciences 37, 1883–1885.

Carlson, R., Smythe, W., Baines, K., Barbinis, E., Becker, K., Burns, R., Calcutt, S., Calvin, W., Clark, R., Danielson, G., Davies, A., Drossart, P., Encrenaz, T., Fanale, F., Granahan, J., Hansen, G., Herrera, P., Hibbitts, C., Hui, J., Irwin, P., Johnson, T., Kamp, L., Kieffer, H., Leader, F., Lellouch, E., Lopes-Gautier, R., Matson, D., McCord, T., Mehlman, R., Ocampo, A., Orton, G., Roos-Serote, M., Segura, M., Shirley, J., Soderblom, L., Stevenson, A., Taylor, F., Torson, J., Weir, A., Weissman, P., Oct. 1996. Near-Infrared Spectroscopy and Spectral Mapping of Jupiter and the Galilean Satellites : Results from Galileo's Initial Orbit. Science 274, 385–388.

Cavalié, T., Billebaud, F., Biver, N., Dobrijevic, M., Lellouch, E., Brillet, J., Lecacheux, A., Hjalmarson, Å., Sandqvist, A., Frisk, U., Olberg, M., Bergin, E. A., Odin Team, Nov. 2008. Observation of water vapor in the stratosphere of Jupiter with the Odin space telescope. Planetary and Space Science 56, 1573–1584.

Cavalié, T., Biver, N., Hartogh, P., Dobrijevic, M., Billebaud, F., Lellouch, E., Sandqvist, A., Brillet, J., Lecacheux, A., Hjalmarson, Å., Frisk, U., Olberg, M., 2012. Odin space telescope monitoring of water vapor in the stratosphere of jupiter. Planetary and Space Science 61 (1), 3 – 14.
URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032063311001103

Cavalié, T., Feuchtgruber, H., Lellouch, E., de Val-Borro, M., Jarchow, C., Moreno, R., Hartogh, P., Orton, G., Greathouse, T. K., Billebaud, F., Dobrijevic, M., Lara, L. M., González, A., Sagawa, H., May 2013. Spatial distribution of water in the stratosphere of Jupiter from Herschel HIFI and PACS observations. Astron. Astrophys. 553, A21.

Cavalié, T., 2008. Observations millimétriques et submillimétriques des composés oxygénés dans les atmosphères planétaires. préparation aux missions herschel et alma. status : published.

Cess, R., Chen, S., 1975. The influence of ethane and acetylene upon the thermal structure of the jovian atmosphere. Icarus 26 (4), 444 – 450.

Cess, R. D., Caldwell, J., 1979. A saturnian stratospheric seasonal climate model. Icarus 38 (3), 349 – 357.

Chandrasekhar, S., 2013. Radiative transfer. Courier Corporation.

Chen, F., Wu, C., 2004. Temperature-dependent photoabsorption cross sections in the vuv-uv region. i. methane and ethane. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 85 (2), 195 – 209.
URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407303002255

Collet, A., Cox, C., Gérard, J.-C., Dec. 2010. Two-dimensional time-dependent model of the transport of minor species in the Venus night side upper atmosphere. Planet. Space Sci. 58, 1857–1867.

Colwell, J. E., Esposito, L. W., Pettis, D., Sremčević, M., Jerousek, R. G., , Bradley, E. T., 2010. Cassini Orbiter Saturn UVIS Ring Stellar Occultations 1.0. NASA Planetary Data System.

Colwell, J. E., Nicholson, P. D., Tiscareno, M. S., Murray, C. D., French, R. G., Marouf, E. A., 2009. The Structure of Saturn's Rings. p. 83.

Combes, M., Encrenaz, T., Vapillon, L., Zeau, Y., Lesqueren, C., Aug. 1974. Confirmation of the Identification of C2H2 and C2H6 in the Jovian Atmosphere. Astron. Astrophys. 34, 33.

Conrath, B., Hanel, R., Gautier, D., Marten, A., Lindal, G., Dec. 1987. The helium abundance of Uranus from Voyager measurements. J. Geophys. Res. 92, 15003–15010.

Conrath, B. J., Gautier, D., Mar. 2000. Saturn Helium Abundance : A Reanalysis of Voyager Measurements. Icarus 144, 124–134.

Conrath, B. J., Gautier, D., Lindal, G. F., Samuelson, R. E., Shaffer, W. A., Oct. 1991. The helium abundance of Neptune from Voyager measurements. Journal of Geophysical Research 96, 18907.

Conrath, B. J., Gierasch, P. J., Leroy, S. S., 1990. Temperature and circulation in the stratosphere of the outer planets. Icarus 83, 255–281.

de Graauw, T., Feuchtgruber, H., Bezard, B., Drossart, P., Encrenaz, T., Beintema, D. A., Griffin, M., Heras, A., Kessler, M., Leech, K., Lellouch, E., Morris, P., Roelfsema, P. R., Roos-Serote, M., Salama, A., Vandenbussche, B., Valentijn, E. A., Davis, G. R., Naylor, D. A., May 1997. First results of ISO-SWS observations of Saturn : detection of CO_2_, CH_3_C_2_H, C_4_H_2_ and tropospheric H_2_O. Astron. Astrophys. 321, L13–L16.

de Graauw, T., Haser, L. N., Beintema, D. A., Roelfsema, P. R., van Agthoven, H., Barl, L., Bauer, O. H., Bekenkamp, H. E. G., Boonstra, A.-J., Boxhoorn, D. R., Cote, J., de Groene, P., van Dijkhuizen, C., Drapatz, S., Evers, J., Feuchtgruber, H., Frericks, M., Genzel, R., Haerendel, G., Heras, A. M., van der Hucht, K. A., van der Hulst, T., Huygen, R., Jacobs, H., Jakob, G., Kamperman, T., Katterloher, R. O., Kester, D. J. M., Kunze, D., Kussendrager, D., Lahuis, F., Lamers, H. J. G. L. M., Leech, K., van der Lei, S., van der Linden, R., Luinge, W., Lutz, D., Melzner, F., Morris, P. W., van Nguyen, D., Ploeger, G., Price, S., Salama, A., Schaeidt, S. G., Sijm, N., Smoorenburg, C., Spakman, J., Spoon, H., Steinmayer, M., Stoecker, J., Valentijn, E. A., Vandenbussche, B., Visser, H., Waelkens, C., Waters, L. B. F. M., Wensink, J., Wesselius, P. R., Wiezorrek, E., Wieprecht, E., Wijnbergen, J. J., Wildeman, K. J.,

Young, E., Nov. 1996. Observing with the ISO Short-Wavelength Spectrometer. Astron. Astrophys. 315, L49–L54.

Dobrijevic, M., Carrasco, N., Hébrard, E., Pernot, P., Nov. 2008. Epistemic bimodality and kinetic hypersensitivity in photochemical models of Titan's atmosphere. Planet. Space Sci. 56, 1630–1643.

Dobrijevic, M., Cavalié, T., Billebaud, F., Jul. 2011. A methodology to construct a reduced chemical scheme for 2D-3D photochemical models : Application to Saturn. Icarus 214, 275–285.

Dobrijevic, M., Cavalié, T., Hébrard, E., Billebaud, F., Hersant, F., Selsis, F., Oct. 2010. Key reactions in the photochemistry of hydrocarbons in Neptune's stratosphere. Planet. Space Sci. 58, 1555–1566.

Dobrijevic, M., Hébrard, E., Loison, J. C., Hickson, K. M., Jan. 2014. Coupling of oxygen, nitrogen, and hydrocarbon species in the photochemistry of Titan's atmosphere. Icarus 228, 324–346.

Dobrijevic, M., Ollivier, J. L., Billebaud, F., Brillet, J., Parisot, J. P., Jan. 2003. Effect of chemical kinetic uncertainties on photochemical modeling results : Application to Saturn's atmosphere. Astron. Astrophys. 398, 335–344.

Dobrijevic, M., Parisot, J. P., May 1998. Effect of chemical kinetics uncertainties on hydrocarbon production in the stratosphere of Neptune. Planet. Space Sci. 46, 491–505.

Dols, V., Gérard, J. C., Clarke, J. T., Gustin, J., Grodent, D., Sep. 2000. Diagnostics of the Jovian Aurora Deduced from Ultraviolet Spectroscopy : Model and HST/GHRS Observations. Icarus 147, 251–266.

Dowling, T. E., Bradley, M. E., Colón, E., Kramer, J., LeBeau, R. P., Lee, G. C. H., Mattox, T. I., Morales-Juberías, R., Palotai, C. J., Parimi, V. K., Showman, A. P., 2006. The EPIC atmospheric model with an isentropic/terrain-following hybrid vertical coordinate. Icarus 182, 259–273.

Dowling, T. E., Greathouse, T. K., Sussman, M. G., Chanover, N. J., 2010. New Radiative Transfer Capability in the EPIC Atmospheric Model with Application to Saturn and Uranus. In : AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts #42. Vol. 42 of Bulletin of the American Astronomical Society. p. 1021.

Drossart, P., Fouchet, T., Crovisier, J., Lellouch, E., Encrenaz, T., Feuchtgruber, H., Champion, J. P., Mar. 1999. Fluorescence in the 3μm bands of methane on Jupiter and Saturn from ISO/SWS observations. In : Cox, P., Kessler, M. (Eds.), The Universe as Seen by ISO. Vol. 427 of ESA Special Publication. p. 169.

Elsasser, W. M., 1942. Heat transfer by infrared radiation in the atmosphere. No. 6. Wiley Online Library.

Encrenaz, T., de Graauw, T., Schaeidt, S., Lellouch, E., Feuchtgruber, H., Beintema, D. A., Bezard, B., Drossart, P., Griffin, M., Heras, A., Kessler, M., Leech, K., Morris, P., Roelfsema, P. R., Roos-Serote, M., Salama, A., Vandenbussche, B., Valentijn, E. A., Davis, G. R., Naylor, D. A., Nov. 1996. First results of ISO-SWS observations of Jupiter. Astron. Astrophys. 315, L397–L400.

Encrenaz, T., Drossart, P., Feuchtgruber, H., Lellouch, E., Bézard, B., Fouchet, T., Atreya, S. K., Oct. 1999. The atmospheric composition and structure of Jupiter and Saturn from ISO observations : a preliminary review. Planet. Space Sci. 47, 1225–1242.

Esposito, L. W., Barth, C. A., Colwell, J. E., Lawrence, G. M., McClintock, W. E., Stewart, A. I. F., Keller, H. U., Korth, A., Lauche, H., Festou, M. C., Lane, A. L., Hansen, C. J., Maki, J. N., West, R. A., Jahn, H., Reulke, R., Warlich, K., Shemansky, D. E., Yung, Y. L., Dec. 2004. The Cassini Ultraviolet Imaging Spectrograph Investigation. Space Sci. Rev. 115, 299–361.

Festou, M. C., Atreya, S. K., Oct. 1982. Voyager ultraviolet stellar occultation measurements of the composition and thermal profiles of the Saturnian upper atmosphere. Geophys. Res. Lett. 9, 1147–1150.

Festou, M. C., Atreya, S. K., Donahue, T. M., Sandel, B. R., Shemansky, D. E., Broadfoot, A. L., Jul. 1981. Composition and thermal profiles of the Jovian upper atmosphere determined by the Voyager ultraviolet stellar occultation experiment. J. Geophys. Res. 86, 5715–5725.

Flasar, F. M., Achterberg, R. K., Conrath, B. J., Pearl, J. C., Bjoraker, G. L., Jennings, D. E., Romani, P. N., Simon-Miller, A. A., Kunde, V. G., Nixon, C. A., Bézard, B., Orton, G. S., Spilker, L. J., Spencer, J. R., Irwin, P. G. J., Teanby, N. A., Owen, T. C., Brasunas, J., Segura, M. E., Carlson, R. C., Mamoutkine, A., Gierasch, P. J., Schinder, P. J., Showalter, M. R., Ferrari, C., Barucci, A., Courtin, R., Coustenis, A., Fouchet, T., Gautier, D., Lellouch, E., Marten, A., Prangé, R., Strobel, D. F., Calcutt, S. B., Read, P. L., Taylor, F. W., Bowles, N., Samuelson, R. E., Abbas, M. M., Raulin, F., Ade, P., Edgington, S., Pilorz, S., Wallis, B., Wishnow, E. H., 2005. Temperatures, Winds, and Composition in the Saturnian System. Science 307, 1247–1251.

Flasar, F. M., Kunde, V. G., Abbas, M. M., Achterberg, R. K., Ade, P., Barucci, A., Bézard, B., Bjoraker, G. L., Brasunas, J. C., Calcutt, S., Carlson, R., Césarsky, C. J., Conrath, B. J., Coradini, A., Courtin, R., Coustenis, A., Edberg, S., Edgington, S., Ferrari, C., Fouchet, T., Gautier, D., Gierasch, P. J., Grossman, K., Irwin, P., Jennings, D. E., Lellouch, E., Mamoutkine, A. A., Marten, A., Meyer, J. P., Nixon, C. A., Orton, G. S., Owen, T. C., Pearl, J. C., Prangé, R., Raulin, F., Read, P. L., Romani, P. N., Samuelson, R. E., Segura, M. E., Showalter, M. R., Simon-Miller, A. A., Smith, M. D.,

Spencer, J. R., Spilker, L. J., Taylor, F. W., Dec. 2004. Exploring The Saturn System In The Thermal Infrared : The Composite Infrared Spectrometer. Space Sci. Rev. 115, 169–297.

Fletcher, L., Orton, G., Yanamandra-Fisher, P., Fisher, B., Parrish, P., Irwin, P., 2009. Retrievals of atmospheric variables on the gas giants from ground-based mid-infrared imaging. Icarus 200 (1), 154 – 175.

Fletcher, L. N., Achterberg, R. K., Greathouse, T. K., Orton, G. S., Conrath, B. J., Simon-Miller, A. A., Teanby, N., Guerlet, S., Irwin, P. G. J., Flasar, F. M., 2010. Seasonal change on Saturn from Cassini/CIRS observations, 2004-2009. Icarus 208, 337–352.

Fletcher, L. N., Irwin, P. G. J., Sinclair, J. A., Orton, G. S., Giles, R. S., Hurley, J., Gorius, N., Achterberg, R. K., Hesman, B. E., Bjoraker, G. L., Apr. 2015a. Seasonal evolution of Saturn's polar temperatures and composition. Icarus 250, 131–153.

Fletcher, L. N., Irwin, P. G. J., Teanby, N. A., Orton, G. S., Parrish, P. D., Calcutt, S. B., Bowles, N., de Kok, R., Howett, C., Taylor, F. W., May 2007a. The meridional phosphine distribution in Saturn's upper troposphere from Cassini/CIRS observations. Icarus 188, 72–88.

Fletcher, L. N., Irwin, P. G. J., Teanby, N. A., Orton, G. S., Parrish, P. D., de Kok, R., Howett, C., Calcutt, S. B., Bowles, N., Taylor, F. W., 2007b. Characterising Saturn's vertical temperature structure from Cassini/CIRS. Icarus 189, 457–478.

Fletcher, L. N., Moses, J. I., Greathouse, T. K., Guerlet, S., West, R., 2015b. Saturn's seasonally changing stratosphere and troposphere : Thermal structure, composition, and chemistry. In : Baines, K., Flasar, M., Krupp, N., Stallard, T. (Eds.), Saturn in the 21st Century. Cambridge University Press.

Fletcher, L. N., Orton, G. S., Teanby, N. A., Irwin, P. G. J., Bjoraker, G. L., Feb. 2009. Methane and its isotopologues on Saturn from Cassini/CIRS observations. Icarus 199, 351–367.

Fouchet, T., Guerlet, S., Strobel, D. F., Simon-Miller, A. A., Bézard, B., Flasar, F. M., 2008. An equatorial oscillation in Saturn's middle atmosphere. Nature 453, 200–202.

Fouchet, T., Lellouch, E., Bézard, B., Feuchtgruber, H., Drossart, P., Encrenaz, T., Mar. 2000. Jupiter's hydrocarbons observed with ISO-SWS : vertical profiles of C_2H_6 and C_2H_2, detection of CH_3C_2H. Astron. Astrophys. 355, L13–L17.

Fouchet, T., Moses, J. I., Conrath, B. J., 2009. Saturn : Composition and Chemistry. p. 83.

Friedson, A. J., Moses, J. I., 2012. General circulation and transport in Saturn's upper troposphere and stratosphere. Icarus 218, 861–875.

Friedson, A. J., West, R. A., Hronek, A. K., Larsen, N. A., Dalal, N., Mar. 1999. Transport and Mixing in Jupiter's Stratosphere Inferred from Comet S-L9 Dust Migration. Icarus 138, 141–156.

Frommhold, L., 2006. Collision-induced absorption in gases. Vol. 2. Cambridge University Press.

Fuller, E. N., Ensley, K., Giddings, J. C., 1969. Diffusion of halogenated hydrocarbons in helium. the effect of structure on collision cross sections. The Journal of Physical Chemistry 73 (11), 3679–3685.

Fuller, E. N., Schettler, P. D., Giddings, J. C., 1966. New method for prediction of binary gas-phase diffusion coefficients. Industrial and Engineering Chemistry 58 (5), 18–27.

Gautier, D., Owen, T., 1989. The composition of outer planet atmospheres. pp. 487–512.

Gear, C. W., 1971. Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations. Prentice Hall PTR.

Gezari, D. Y., Mumma, M. J., Espenak, F., Deming, D., Bjoraker, G., Woods, L., Folz, W., 1989. New features in Saturn's atmosphere revealed by high-resolution thermal infrared images. Nature 342, 777–780.

Gierasch, P. J., Magalhaes, J. A., Conrath, B. J., Sep. 1986. Zonal mean properties of Jupiter's upper troposphere from Voyager infrared observations. Icarus 67, 456–483.

Gillett, F. C., Low, F. J., Stein, W. A., Aug. 1969. The 2.8-14-MICRON Spectrum of Jupiter. Astrophys. J. 157, 925.

Gillett, F. C., Orton, G. S., Jan. 1975. Center-to-limb observations of Saturn in the thermal infrared. Astrophys. J. Lett. 195, L47–L49.

Gladstone, G. R., Allen, M., Yung, Y. L., Jan. 1996. Hydrocarbon Photochemistry in the Upper Atmosphere of Jupiter. Icarus 119, 1–52.

Gladstone, G. R., Waite, J. H., Grodent, D., Lewis, W. S., Crary, F. J., Elsner, R. F., Weisskopf, M. C., Majeed, T., Jahn, J.-M., Bhardwaj, A., Clarke, J. T., Young, D. T., Dougherty, M. K., Espinosa, S. A., Cravens, T. E., Feb. 2002. A pulsating auroral X-ray hot spot on Jupiter. Nature 415, 1000–1003.

Godunov, S., 1959. A Difference Scheme for Numerical Solution of Discontinuous solution of Hydrodynamic Equations. Math. Sbornik 47, 271–306.

Goody, R., West, R., Chen, L., Crisp, D., Dec. 1989. The correlated-k method for radiation calculations in nonhomogeneous atmospheres. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 42, 539–550.

Greathouse, T. K., Gladstone, G. R., Moses, J. I., Stern, S. A., Retherford, K. D., Vervack, R. J., Slater, D. C., Versteeg, M. H., Davis, M. W., Young, L. A., Steffl, A. J., Throop, H., Parker, J. W., Jul. 2010. New Horizons Alice ultraviolet observations of a stellar occultation by Jupiter's atmosphere. Icarus 208, 293–305.

Greathouse, T. K., Lacy, J. H., Bézard, B., Moses, J. I., Griffith, C. A., Richter, M. J., Sep. 2005. Meridional variations of temperature, C $_2$H $_2$ and C $_2$H $_6$ abundances in Saturn's stratosphere at southern summer solstice. Icarus 177, 18–31.

Greathouse, T. K., Strong, S., Moses, J., Orton, G., Fletcher, L., Dowling, T., 2008. A General Radiative Seasonal Climate Model Applied to Saturn, Uranus, and Neptune. AGU Fall Meeting Abstracts, B6.

Griffith, C. A., Bézard, B., Greathouse, T., Lellouch, E., Lacy, J., Kelly, D., Richter, M. J., Jul. 2004. Meridional transport of HCN from SL9 impacts on Jupiter. Icarus 170, 58–69.

Guerlet, S., Fouchet, T., Bézard, B., Flasar, F. M., Simon-Miller, A. A., 2011. Evolution of the equatorial oscillation in Saturn's stratosphere between 2005 and 2010 from Cassini/CIRS limb data analysis. Geophys. Res. Lett. 38, 9201.

Guerlet, S., Fouchet, T., Bézard, B., Moses, J. I., Fletcher, L. N., Simon-Miller, A. A., Michael Flasar, F., 2010. Meridional distribution of CH_3C_2H and C_4H_2 in Saturn's stratosphere from CIRS/Cassini limb and nadir observations. Icarus 209, 682–695.

Guerlet, S., Fouchet, T., Bézard, B., Simon-Miller, A. A., Michael Flasar, F., 2009. Vertical and meridional distribution of ethane, acetylene and propane in Saturn's stratosphere from CIRS/Cassini limb observations. Icarus 203, 214–232.

Guerlet, S., Spiga, A., Sylvestre, M., Indurain, M., Fouchet, T., Leconte, J., Millour, E., Wordsworth, R., Capderou, M., Bézard, B., Forget, F., Aug. 2014. Global climate modeling of Saturn's atmosphere. Part I : Evaluation of the radiative transfer model. Icarus 238, 110–124.

Guillot, T., 2005. The interiors of giant planets : Models and outstanding questions. arXiv preprint astro-ph/0502068.

Hanel, R., Conrath, B., Flasar, M., Herath, L., Kunde, V., Lowman, P., Maguire, W., Pearl, J., Pirraglia, J., Horn, L., Nov. 1979a. Infrared observations of the Jovian system from Voyager 2. Science 206, 952–956.

Hanel, R., Conrath, B., Flasar, M., Kunde, V., Lowman, P., Maguire, W., Pearl, J., Pirraglia, J., Samuelson, R., Gautier, D., Gierasch, P., Kumar, S., Ponnamperuma, C., Jun. 1979b. Infrared observations of the Jovian system from Voyager 1. Science 204, 972–976.

Hartogh, P., Lellouch, E., Crovisier, J., Banaszkiewicz, M., Bensch, F., Bergin, E. A., Billebaud, F., Biver, N., Blake, G. A., Blecka, M. I., Blommaert, J., Bockelée-Morvan, D., Cavalié, T., Cernicharo, J., Courtin, R., Davis, G., Decin, L., Encrenaz, P., Encrenaz, T., González, A., de Graauw, T., Hutsemékers, D., Jarchow, C., Jehin, E., Kidger, M., Küppers, M., de Lange, A., Lara, L.-M., Lis, D. C., Lorente, R., Manfroid, J., Medvedev, A. S., Moreno, R., Naylor, D. A., Orton, G., Portyankina, G., Rengel, M., Sagawa, H., Sánchez-Portal, M., Schieder, R., Sidher, S., Stam, D., Swinyard, B., Szutowicz, S., Thomas, N., Thornhill, G., Vandenbussche, B., Verdugo, E., Waelkens, C., Walker, H., 2009. Water and related chemistry in the solar system. A guaranteed time key programme for Herschel. Planet. Space Sci. 57, 1596–1606.

Hartogh, P., Lellouch, E., Moreno, R., Bockelée-Morvan, D., Biver, N., Cassidy, T., Rengel, M., Jarchow, C., Cavalié, T., Crovisier, J., Helmich, F. P., Kidger, M., 2011. Direct detection of the Enceladus water torus with Herschel. Astron. Astrophys. 532, L2.

Hébrard, E., Dobrijevic, M., Bénilan, Y., Raulin, F., Jul. 2007. Photochemical kinetics uncertainties in modeling Titan's atmosphere : First consequences. Planet. Space Sci. 55, 1470–1489.

Hébrard, E., Dobrijevic, M., Loison, J. C., Bergeat, A., Hickson, K. M., May 2012. Neutral production of hydrogen isocyanide (HNC) and hydrogen cyanide (HCN) in Titan's upper atmosphere. Astron. Astrophys. 541, A21.

Hébrard, E., Dobrijevic, M., Loison, J. C., Bergeat, A., Hickson, K. M., Caralp, F., Apr. 2013. Photochemistry of C_3H_p hydrocarbons in Titan's stratosphere revisited. Astron. Astrophys. 552, A132.

Hébrard, E., Dobrijevic, M., Pernot, P., Carrasco, N., Bergeat, A., Hickson, K. M., Canosa, A., Le Picard, S. D., Sims, I. R., Sep. 2009. How Measurements of Rate Coefficients at Low Temperature Increase the Predictivity of Photochemical Models of Titan's Atmosphere. Journal of Physical Chemistry A 113, 11227–11237.

Hedman, M. M., Nicholson, P. D., Jul. 2013. Kronoseismology : Using Density Waves in Saturn's C Ring to Probe the Planet's Interior. Astrophys. J. 146, 12.

Henyey, L. G., Greenstein, J. L., Jan. 1941. Diffuse radiation in the Galaxy. Astrophys. J. 93, 70–83.

Hesman, B. E., Jennings, D. E., Sada, P. V., Bjoraker, G. L., Achterberg, R. K., Simon-Miller, A. A., Anderson, C. M., Boyle, R. J., Nixon, C. A., Fletcher, L. N., McCabe, G. H., 2009. Saturn's latitudinal C $_2$H $_2$ and C $_2$H $_6$ abundance profiles from Cassini/CIRS and ground-based observations. Icarus 202, 249–259.

Hindmarsh, A. C., 1983. ODEPACK, A Systematized Collection of ODE Solvers , R. S. Stepleman et al. (eds.), North-Holland, Amsterdam, (vol. 1 of), pp. 55-64. IMACS Transactions on Scientific Computation 1, 55–64.

Hord, C. W., West, R. A., Simmons, K. E., Coffeen, D. L., Sato, M., Lane, A. L., Bergstralh, J. T., Nov. 1979. Photometric observations of Jupiter at 2400 angstroms. Science 206, 956–959.

Hourdin, F., Talagrand, O., Sadourny, R., Courtin, R., Gautier, D., Mckay, C. P., Oct. 1995. Numerical simulation of the general circulation of the atmosphere of Titan. Icarus 117, 358–374.

Howett, C. J. A., Irwin, P. G. J., Teanby, N. A., Simon-Miller, A., Calcutt, S. B., Fletcher, L. N., de Kok, R., 2007. Meridional variations in stratospheric acetylene and ethane in the southern hemisphere of the saturnian atmosphere as determined from Cassini/CIRS measurements. Icarus 190, 556–572.

Hu, R., Seager, S., Bains, W., Dec. 2012. Photochemistry in Terrestrial Exoplanet Atmospheres. I. Photochemistry Model and Benchmark Cases. Astrophys. J. 761, 166.

Hubbard, W. B., Haemmerle, V., Porco, C. C., Rieke, G. H., Rieke, M. J., Jan. 1995. The occultation of SAO 78505 by Jupiter. Icarus 113, 103–109.

Hubbard, W. B., Porco, C. C., Hunten, D. M., Rieke, G. H., Rieke, M. J., McCarthy, D. W., Haemmerle, V., Haller, J., McLeod, B., Lebofsky, L. A., Marcialis, R., Holberg, J. B., Landau, R., Carrasco, L., Elias, J., Buie, M. W., Dunham, E. W., Persson, S. E., Boroson, T., West, S., French, R. G., Harrington, J., Elliot, J. L., Forrest, W. J., Pipher, J. L., Stover, R. J., Brahic, A., Grenier, I., Dec. 1997. Structure of Saturn's Mesosphere from the 28 SGR Occultations. Icarus 130, 404–425.

Hue, V., Cavalié, T., Dobrijevic, M., Hersant, F., Greathouse, T. K., Sep. 2015a. 2D photochemical modeling of Saturn's stratosphere. Part I : Seasonal variation of atmospheric composition without meridional transport. Icarus 257, 163–184.

Hue, V., Greathouse, T. K., Cavalié, T., Dobrijevic, M., Hersant, F., 2015b. 2D photochemical modeling of Saturn's stratosphere. Part II : Feedback between composition and temperature. Icarus.

Hébrard, E., Dobrijevic, M., Bénilan, Y., Raulin, F., 2006. Photochemical kinetics uncertainties in modeling titan's atmosphere : A review. Journal of Photochemistry and Photobiology C : Photochemistry Reviews 7 (4), 211 – 230.
URL `http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S138955670700007X`

Irwin, P., 2006. Giant Planets of Our Solar System : An Introduction. Springer Praxis Books / Astronomy and Planetary Sciences Series. Springer.

Irwin, P., 2009. Giant Planets of Our Solar System : Atmospheres, Composition, and Structure. Springer Science & Business Media.

Isaksen, I. S. A., Midtbo, K. H., Sunde, J., Crutzen, P. J., 1977. A simplified method to include molecular scattering and reflection in calculations of photon fluxes and photodissociation rates. Geophysica Norvegica 31, 11–26.

Jacquinet-Husson, N., Arie, E., Ballard, J., Barbe, A., Bjoraker, G., Bonnet, B., Brown, L. R., Camy-Peyret, C., Champion, J. P., Chedin, A., Chursin, A., Clerbaux, C., Duxbury, G., Flaud, J.-M., Fourrie, N., Fayt, A., Graner, G., Gamache, R., Goldman, A., Golovko, V., Guelachvili, G., Hartmann, J. M., Hilico, J. C., Hillman, J., Lefevre, G., Lellouch, E., Mikhailenko, S. N., Naumenko, O. V., Nemtchinov, V., Newnham, D. A., Nikitin, A., Orphal, J., Perrin, A., Reuter, D. C., Rinsland, C. P., Rosenmann, L., Rothman, L. S., Scott, N. A., Selby, J., Sinitsa, L. N., Sirota, J. M., Smith, A. M., Smith, K. M., Tyuterev, V. G., Tipping, R. H., Urban, S., Varanasi, P., Weber, M., May 1999. The 1997 spectroscopic GEISA databank. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 62, 205–254.

Karkoschka, E., Tomasko, M. G., Jan. 2011. The haze and methane distributions on Neptune from HST-STIS spectroscopy. Icarus 211, 780–797.

Kessler, M. F., Steinz, J. A., Anderegg, M. E., Clavel, J., Drechsel, G., Estaria, P., Faelker, J., Riedinger, J. R., Robson, A., Taylor, B. G., Ximénez de Ferrán, S., Nov. 1996. The Infrared Space Observatory (ISO) mission. Astron. Astrophys. 315, L27–L31.

Kim, S. J., Sim, C. K., Sohn, M. R., Moses, J. I., Jul. 2014. CH_4 mixing ratios at microbar pressure levels of Jupiter as constrained by 3-micron ISO data. Icarus 237, 42–51.

Kim, Y. H., Fox, J. L., Dec. 1994. The chemistry of hydrocarbon ions in the Jovian ionosphere. Icarus 112, 310–325.

Kockarts, G., May 2002. Aeronomy, a 20th Century emergent science : the role of solar Lyman series. Annales Geophysicae 20, 585–598.

Kunde, V. G., Ade, P. A., Barney, R. D., Bergman, D., Bonnal, J.-F., Borelli, R., Boyd, D., Brasunas, J. C., Brown, G., Calcutt, S. B., Carroll, F., Courtin, R., Cretolle, J., Crooke, J. A., Davis, M. A., Edberg, S., Fettig, R., Flasar, M., Glenar, D. A., Graham, S., Hagopian, J. G., Hakun, C. F., Hayes, P. A., Herath, L., Horn, L., Jennings, D. E., Karpati, G., Kellebenz, C., Lakew, B., Lindsay, J., Lohr, J., Lyons, J. J., Martineau, R. J., Martino, A. J., Matsumura, M., McCloskey, J., Melak, T., Michel, G., Morell, A., Mosier, C., Pack, L., Plants, M., Robinson, D., Rodriguez, L., Romani, P., Schaefer, W. J., Schmidt, S., Trujillo, C., Vellacott, T., Wagner, K., Yun, D., Oct. 1996. Cassini infrared Fourier spectroscopic investigation. In : Horn, L. (Ed.), Cassini/Huygens : A Mission to the Saturnian Systems. Vol. 2803 of Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series. pp. 162–177.

Kunde, V. G., Flasar, F. M., Jennings, D. E., Bézard, B., Strobel, D. F., Conrath, B. J., Nixon, C. A., Bjoraker, G. L., Romani, P. N., Achterberg, R. K., Simon-Miller, A. A., Irwin, P., Brasunas, J. C., Pearl, J. C., Smith, M. D., Orton, G. S., Gierasch, P. J.,

Spilker, L. J., Carlson, R. C., Mamoutkine, A. A., Calcutt, S. B., Read, P. L., Taylor, F. W., Fouchet, T., Parrish, P., Barucci, A., Courtin, R., Coustenis, A., Gautier, D., Lellouch, E., Marten, A., Prangé, R., Biraud, Y., Ferrari, C., Owen, T. C., Abbas, M. M., Samuelson, R. E., Raulin, F., Ade, P., Césarsky, C. J., Grossman, K. U., Coradini, A., Sep. 2004. Jupiter's Atmospheric Composition from the Cassini Thermal Infrared Spectroscopy Experiment. Science 305, 1582–1587.

Lacis, A. A., Oinas, V., May 1991. A description of the correlated-k distribution method for modelling nongray gaseous absorption, thermal emission, and multiple scattering in vertically inhomogeneous atmospheres. J. Geophys. Res. 96, 9027–9064.

Le Flochmoen, E., 1997. Etude de la physico-chimie de la haute atmosphère de jupiter. status : published.

Lebonnois, S., Toublanc, D., Hourdin, F., Rannou, P., Aug. 2001. Seasonal Variations of Titan's Atmospheric Composition. Icarus 152, 384–406.

Lefèvre, F., Lebonnois, S., Montmessin, F., Forget, F., Jul. 2004. Three-dimensional modeling of ozone on Mars. Journal of Geophysical Research (Planets) 109, 7004.

Lellouch, E., Bézard, B., Fouchet, T., Feuchtgruber, H., Encrenaz, T., de Graauw, T., May 2001. The deuterium abundance in Jupiter and Saturn from ISO-SWS observations. Astron. Astrophys. 370, 610–622.

Lellouch, E., Bézard, B., Moreno, R., Bockelée-Morvan, D., Colom, P., Crovisier, J., Festou, M., Gautier, D., Marten, A., Paubert, G., Oct. 1997. Carbon monoxide in Jupiter after the impact of comet Shoemaker-Levy 9. Planetary and Space Science 45, 1203–1212.

Lellouch, E., Bézard, B., Moses, J. I., Davis, G. R., Drossart, P., Feuchtgruber, H., Bergin, E. A., Moreno, R., Encrenaz, T., Sep. 2002. The Origin of Water Vapor and Carbon Dioxide in Jupiter's Stratosphere. Icarus 159, 112–131.

Lellouch, E., Bézard, B., Strobel, D., Bjoraker, G., Flasar, F., Romani, P., 2006. On the {HCN} and {CO2} abundance and distribution in jupiter's stratosphere. Icarus 184 (2), 478 – 497.
URL `http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103506001886`

Lellouch, E., Paubert, G., Moreno, R., Festou, M. C., Bézard, B., Bockelée-Morvan, D., Colom, P., Crovisier, J., Encrenaz, T., Gautier, D., Marten, A., Despois, D., Strobel, D. F., Sievers, A., Feb. 1995. Chemical and thermal response of Jupiter's atmosphere following the impact of comet Shoemaker-Levy 9. Nature 373, 592–595.

Leovy, C. B., Friedson, A. J., Orton, G. S., Dec. 1991. The quasiquadrennial oscillation of Jupiter's equatorial stratosphere. Nature 354, 380–382.

Li, L., Conrath, B. J., Gierasch, P. J., Achterberg, R. K., Nixon, C. A., Simon-Miller, A. A., Flasar, F. M., Banfield, D., Baines, K. H., West, R. A., Ingersoll, A. P., Vasavada, A. R., Del Genio, A. D., Porco, C. C., Mamoutkine, A. A., Segura, M. E., Bjoraker, G. L., Orton, G. S., Fletcher, L. N., Irwin, P. G. J., Read, P. L., Nov. 2010. Saturn's emitted power. Journal of Geophysical Research (Planets) 115, 11002.

Liang, M.-C., Shia, R.-L., Lee, A. Y.-T., Allen, M., Friedson, A. J., Yung, Y. L., Dec. 2005. Meridional Transport in the Stratosphere of Jupiter. Astrophys. J. Lett. 635, L177–L180.

Lindal, G. F., Sweetnam, D. N., Eshleman, V. R., Jun. 1985. The atmosphere of Saturn - an analysis of the Voyager radio occultation measurements. Astron. J. 90, 1136–1146.

Lindzen, R. S., 1967. Thermally driven diurnal tide in the atmosphere. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society 93 (395), 18–42.

Lindzen, R. S., 1968. The application of classical atmospheric tidal theory. Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences 303 (1474), 299–316.

Lindzen, R. S., 1981. Turbulence and stress owing to gravity wave and tidal breakdown. Journal of Geophysical Research : Oceans (1978–2012) 86 (C10), 9707–9714.

Lindzen, R. S., Blake, D., 1971. Internal gravity waves in atmospheres with realistic dissipation and temperature part II. Thermal tides excited below the mesopause. Geophysical and Astrophysical Fluid Dynamics 2, 31–61.

Loison, J. C., Hébrard, E., Dobrijevic, M., Hickson, K. M., Caralp, F., Hue, V., Gronoff, G., Venot, O., Bénilan, Y., Feb. 2015. The neutral photochemistry of nitriles, amines and imines in the atmosphere of Titan. Icarus 247, 218–247.

Maguire, W. C., Samuelson, R. E., Hanel, R. A., Kunde, V. G., Jun. 1984. Latitudinal Variation of Acetylene and Ethane in the Jovian Atmosphere from Voyager IRIS Observations. In : Bulletin of the American Astronomical Society. Vol. 16 of Bulletin of the American Astronomical Society. pp. 647–647.

Marten, A., Gautier, D., Griffin, M. J., Matthews, H. E., Naylor, D. A., Davis, G. R., Owen, T., Orton, G., Bockelée-Morvan, D., Colom, P., Crovisier, J., Lellouch, E., de Pater, I., Atreya, S., Strobel, D., Han, B., Sanders, D. B., 1995. The collision of comet Shoemaker-Levy 9 with Jupiter : Detection and evolution of HCN in the stratosphere of the planet. Geophys. Res. Lett. 22, 1589–1592.

Medvedev, A. S., Sethunadh, J., Hartogh, P., Jul. 2013. From cold to warm gas giants : A three-dimensional atmospheric general circulation modeling. Icarus 225, 228–235.

Medvedev, A. S., Sethunadh, J., Hartogh, P., 2014. General circulation of the Jovian stratosphere. In : 40th COSPAR Scientific Assembly. Vol. 40 of COSPAR Meeting. p. 2057.

Moreno, F., Sedano, J., Nov. 1997. Radiative Balance and Dynamics in the Stratosphere of Jupiter : Results from a Latitude-Dependent Aerosol Heating Model. Icarus 130, 36–48.

Moreno, R., Marten, A., Matthews, H. E., Biraud, Y., Aug. 2003. Long-term evolution of CO, CS and HCN in Jupiter after the impacts of comet Shoemaker-Levy 9. Planetary and Space Science 51, 591–611.

Moses, J. I., 1996. Sl9 impact chemistry : Long-term photochemical evolution. The Collision of Comet Shoemaker–Levy 9, 243–268.

Moses, J. I., Bass, S. F., Mar. 2000. The effects of external material on the chemistry and structure of Saturn's ionosphere. J. Geophys. Res. 105, 7013–7052.

Moses, J. I., Bézard, B., Lellouch, E., Gladstone, G. R., Feuchtgruber, H., Allen, M., Feb. 2000a. Photochemistry of Saturn's Atmosphere. I. Hydrocarbon Chemistry and Comparisons with ISO Observations. Icarus 143, 244–298.

Moses, J. I., Fouchet, T., Bézard, B., Gladstone, G. R., Lellouch, E., Feuchtgruber, H., Aug. 2005. Photochemistry and diffusion in Jupiter's stratosphere : Constraints from ISO observations and comparisons with other giant planets. Journal of Geophysical Research (Planets) 110, 8001.

Moses, J. I., Greathouse, T. K., 2005. Latitudinal and seasonal models of stratospheric photochemistry on Saturn : Comparison with infrared data from IRTF/TEXES. Journal of Geophysical Research (Planets) 110, 9007.

Moses, J. I., Lellouch, E., Bézard, B., Gladstone, G. R., Feuchtgruber, H., Allen, M., May 2000b. Photochemistry of Saturn's Atmosphere. II. Effects of an Influx of External Oxygen. Icarus 145, 166–202.

Moses, J. I., Liang, M.-C., Yung, Y. L., Shia, R.-L., 2007. Meridional Distribution of Hydrocarbons on Saturn : Implications for Stratospheric Transport. In : Planetary Atmospheres. pp. 85–86.

Nagy, A. F., Kliore, A. J., Mendillo, M., Miller, S., Moore, L., Moses, J. I., Müller-Wodarg, I., Shemansky, D., 2009. Upper Atmosphere and Ionosphere of Saturn. p. 181.

Nejad, L. A. M., Sep. 2005. A Comparison of Stiff ODE Solvers for Astrochemical Kinetics Problems. Astrophysics and Space Science 299, 1–29.

Niemann, H. B., Atreya, S. K., Carignan, G. R., Donahue, T. M., Haberman, J. A., Harpold, D. N., Hartle, R. E., Hunten, D. M., Kasprzak, W. T., Mahaffy, P. R., Owen, T. C., Way, S. H., Sep. 1998. The composition of the Jovian atmosphere as determined by the Galileo probe mass spectrometer. J. Geophys. Res. 103, 22831–22846.

Nixon, C. A., Achterberg, R. K., Conrath, B. J., Irwin, P. G. J., Teanby, N. A., Fouchet, T., Parrish, P. D., Romani, P. N., Abbas, M., LeClair, A., Strobel, D., Simon-Miller, A. A., Jennings, D. J., Flasar, F. M., Kunde, V. G., May 2007. Meridional variations of C_2H_2 and C_2H_6 in Jupiter's atmosphere from Cassini CIRS infrared spectra. Icarus 188, 47–71.

Nixon, C. A., Achterberg, R. K., Romani, P. N., Allen, M., Zhang, X., Teanby, N. A., Irwin, P. G. J., Flasar, F. M., Nov. 2010. Abundances of Jupiter's trace hydrocarbons from Voyager and Cassini. Planet. Space Sci. 58, 1667–1680.

Noll, K. S., Knacke, R. F., Geballe, T. R., Tokunaga, A. T., Jan. 1988. The origin and vertical distribution of carbon monoxide in Jupiter. Astrophys. J. 324, 1210–1218.

Noll, K. S., McGrath, M. A., Trafton, L. M., Atreya, S. K., Caldwell, J. J., Weaver, H. A., Yelle, R. V., Barnet, C., Edgington, S., Mar. 1995. HST Spectroscopic Observations of Jupiter After the Collision of Comet Shoemaker-Levy 9. Science 267, 1307–1313.

Ockert-Bell, M. E., Burns, J. A., Daubar, I. J., Thomas, P. C., Veverka, J., Belton, M., Klaasen, K. P., 1999. The structure of jupiter's ring system as revealed by the galileo imaging experiment. Icarus 138 (2), 188 – 213.
URL `http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103598960729`

Ollivier, J. L., Billebaud, F., Drossart, P., Dobrijévic, M., Roos-Serote, M., August-Bernex, T., Vauglin, I., 2000a. Seasonal effects in the thermal structure of Saturn's stratosphere from infrared imaging at 10 microns. Astron. Astrophys. 356, 347–356.

Ollivier, J. L., Dobrijévic, M., Parisot, J. P., Jun. 2000b. New photochemical model of Saturn's atmosphere. Planet. Space Sci. 48, 699–716.

Orton, G., A'Hearn, M., Baines, K., Deming, D., Dowling, T., Goguen, J., Griffith, C., Hammel, H., Hoffmann, W., Hunten, D., Jewitt, D., Kostiuk, T., Miller, S., Noll, K., Zahnle, K., Achilleos, N., Dayal, A., Deutsch, L., Espenak, F., Esterle, P., Friedson, J., Fast, K., Harrington, J., Hora, J., Joseph, R., Kelly, D., Knacke, R., Lacy, J., Lisse, C., Rayner, J., Sprague, A., Shure, M., Wells, K., Yanamandra-Fisher, P., Zipoy, D., Bjoraker, G., Buhl, D., Golisch, W., Griep, D., Kaminski, C., Arden, C., Chaikin, A., Goldstein, J., Gilmore, D., Fazio, G., Kanamori, T., Lam, H., Livengood, T., MacLow, M.-M., Marley, M., Momary, T., Robertson, D., Romani, P., Spitale, J., Sykes, M., Tennyson, J., Wellnitz, D., Ying, S. W., Mar. 1995. Collision of Comet Shoemaker-Levy 9 with Jupiter Observed by the NASA Infrared Telescope Facility. Science 267, 1277–1282.

Orton, G. S., Friedson, A. J., Caldwell, J., Hammel, H. B., Baines, K. H., Bergstralh, J. T., Martin, T. Z., Malcom, M. E., West, R. A., Golisch, W. F., Griep, D. M., Kaminski, C. D., Tokunaga, A. T., Baron, R., Shure, M., Apr. 1991. Thermal maps of Jupiter - Spatial organization and time dependence of stratospheric temperatures, 1980 to 1990. Science 252, 537–542.

Orton, G. S., Friedson, A. J., Yanamandra-Fisher, P. A., Caldwell, J., Hammel, H. B., Baines, K. H., Bergstralh, J. T., Martin, T. Z., West, R. A., Veeder, Jr., G. J., Lynch, D. K., Russell, R., Malcom, M. E., Golisch, W. F., Griep, D. M., Kaminski, C. D., Tokunaga, A. T., Herbst, T., Shure, M., Jul. 1994. Spatial Organization and Time Dependence of Jupiter's Tropospheric Temperatures, 1980-1993. Science 265, 625–631.

Orton, G. S., Yanamandra-Fisher, P. A., Fisher, B. M., Friedson, A. J., Parrish, P. D., Nelson, J. F., Bauermeister, A. S., Fletcher, L., Gezari, D. Y., Varosi, F., Tokunaga, A. T., Caldwell, J., Baines, K. H., Hora, J. L., Ressler, M. E., Fujiyoshi, T., Fuse, T., Hagopian, H., Martin, T. Z., Bergstralh, J. T., Howett, C., Hoffmann, W. F., Deutsch, L. K., van Cleve, J. E., Noe, E., Adams, J. D., Kassis, M., Tollestrup, E., 2008. Semi-annual oscillations in Saturn's low-latitude stratospheric temperatures. Nature 453, 196–199.

Pallier, L., Prangé, R., 2001. More about the structure of the high latitude jovian aurorae. Planetary and Space Science 49 (10–11), 1159 – 1173, magnetosphere of the Outer Planets Part {II}.
URL `http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S003206330100023X`

Perry, J. J., Kim, Y. H., Fox, J. L., Porter, H. S., Jul. 1999. Chemistry of the Jovian auroral ionosphere. J. Geophys. Res. 104, 16541–16566.

Rayleigh, L., 1918. Xlii. on the scattering of light by a cloud of similar small particles of any shape and oriented at random. Philosophical Magazine Series 6 35 (209), 373–381.

Reid, R., Prausnitz, J., Poling, B., 1988. The Properties Of Gases and Liquids. McGraw-Hill International Editions.

Ridgway, S. T., Jan. 1974. Jupiter : Identification of ethane and acetylene. Astrophys. J. Lett. 187, L41–L43.

Rieke, G. H., Sep. 1975. The thermal radiation of Saturn and its rings. Icarus 26, 37–44.

Romani, P. N., Atreya, S. K., Jun. 1988. Methane photochemistry and methane production on Neptune. Icarus 74, 424–445.

Rood, R. B., 1987. Numerical advection algorithms and their role in atmospheric transport and chemistry models. Reviews of geophysics 25 (1), 71–100.

Rothman, L., Jacquemart, D., Barbe, A., Benner, D. C., Birk, M., Brown, L., Carleer, M., Jr., C. C., Chance, K., Coudert, L., Dana, V., Devi, V., Flaud, J.-M., Gamache, R., Goldman, A., Hartmann, J.-M., Jucks, K., Maki, A., Mandin, J.-Y., Massie, S., Orphal, J., Perrin, A., Rinsland, C., Smith, M., Tennyson, J., Tolchenov, R., Toth, R., Auwera, J. V., Varanasi, P., Wagner, G., 2005. The {HITRAN} 2004 molecular spectroscopic database. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 96 (2), 139 – 204.
URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407305001081

Sada, P. V., Bjoraker, G. L., Jennings, D. E., McCabe, G. H., Romani, P. N., Dec. 1998. Observations of CH $_4$, C $_2$H $_6$, and C $_2$H $_2$in the Stratosphere of Jupiter. Icarus 136, 192–201.

Schoeberl, M. R., Hartmann, D. L., 1991. The dynamics of the stratospheric polar vortex and its relation to springtime ozone depletions. Science 251 (4989), 46–52.

Seiff, A., Kirk, D. B., Knight, T. C. D., Young, R. E., Mihalov, J. D., Young, L. A., Milos, F. S., Schubert, G., Blanchard, R. C., Atkinson, D., Sep. 1998. Thermal structure of Jupiter's atmosphere near the edge of a 5-μm hot spot in the north equatorial belt. J. Geophys. Res. 103, 22857–22890.

Shemansky, D., Liu, X., 2012. Saturn upper atmospheric structure from cassini euv and fuv occultations. Canadian Journal of Physics 90 (8), 817–831.

Shepherd, T. G., 2007. Transport in the middle atmosphere. Journal of the Meteorological Society of Japan. Ser. II 85B, 165–191.

Showman, A. P., Cho, J. Y.-K., Menou, K., Dec. 2010. Atmospheric Circulation of Exoplanets. pp. 471–516.

Simon-Miller, A. A., Conrath, B. J., Gierasch, P. J., Orton, G. S., Achterberg, R. K., Flasar, F. M., Fisher, B. M., 2006. Jupiter's atmospheric temperatures : From voyager {IRIS} to cassini {CIRS}. Icarus 180 (1), 98 – 112.
URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103505002733

Sinclair, J. A., Irwin, P. G. J., Fletcher, L. N., Greathouse, T., Guerlet, S., Hurley, J., Merlet, C., May 2014. From Voyager-IRIS to Cassini-CIRS : Interannual variability in Saturn's stratosphere ? Icarus 233, 281–292.

Sinclair, J. A., Irwin, P. G. J., Fletcher, L. N., Moses, J. I., Greathouse, T. K., Friedson, A. J., Hesman, B., Hurley, J., Merlet, C., 2013. Seasonal variations of temperature, acetylene and ethane in Saturn's atmosphere from 2005 to 2010, as observed by Cassini-CIRS. Icarus 225, 257–271.

Smith, B. A., Soderblom, L. A., Johnson, T. V., Ingersoll, A. P., Collins, S. A., Shoemaker, E. M., Hunt, G. E., Masursky, H., Carr, M. H., Davies, M. E., Cook, A. F., Boyce,

J. M., Owen, T., Danielson, G. E., Sagan, C., Beebe, R. F., Veverka, J., McCauley, J. F., Strom, R. G., Morrison, D., Briggs, G. A., Suomi, V. E., Jun. 1979. The Jupiter system through the eyes of Voyager 1. Science 204, 951–957.

Smith, G. R., Shemansky, D. E., Holberg, J. B., Broadfoot, A. L., Sandel, B. R., McConnell, J. C., Nov. 1983. Saturn's upper atmosphere from the Voyager 2 EUV solar and stellar occultations. J. Geophys. Res. 88, 8667–8678.

Spiga, A., Guerlet, S., Indurain, M., Millour, E., Sylvestre, M., Thierry, F., Meurdesoif, Y., Thomas, D., Nov. 2014. An exploration of Saturn's stratospheric dynamics through Global Climate Modeling. In : AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts. Vol. 46 of AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts. p. 508.09.

Sromovsky, L. A., Jan. 2005. Accurate and approximate calculations of Raman scattering in the atmosphere of Neptune. Icarus 173, 254–283.

Sromovsky, L. A., Karkoschka, E., Fry, P. M., Hammel, H. B., de Pater, I., Rages, K., Aug. 2014. Methane depletion in both polar regions of Uranus inferred from HST/STIS and Keck/NIRC2 observations. Icarus 238, 137–155.

Stewart, R. W., Thompson, A. M., 1996. Kinetic data imprecisions in photochemical rate calculations : Means, medians, and temperature dependence. Journal of Geophysical Research : Atmospheres (1984–2012) 101 (D15), 20953–20964.

Stolarski, R., Butler, D., Rundel, R., 1978. Uncertainty propagation in a stratospheric model 2. monte carlo analysis of imprecisions due to reaction rates. Journal of Geophysical Research : Oceans 83 (C6), 3074–3078.

Strobel, D. F., Sep. 1969. The Photochemistry of Methane in the Jovian Atmosphere. Journal of Atmospheric Sciences 26, 906–911.

Strobel, D. F., Apr. 1973. The Photochemistry of Hydrocarbons in the Jovian Atmosphere. Journal of Atmospheric Sciences 30, 489–498.

Sylvestre, M., Guerlet, S., Fouchet, T., Spiga, A., Flasar, F. M., Hesman, B., Bjoraker, G. L., Sep. 2015. Seasonal changes in Saturn's stratosphere inferred from Cassini/CIRS limb observations. Icarus 258, 224–238.

Thompson, A. M., Stewart, R. W., 1991. Effect of chemical kinetics uncertainties on calculated constituents in a tropospheric photochemical model. Journal of Geophysical Research : Atmospheres (1984–2012) 96 (D7), 13089–13108.

Throop, H., Porco, C., West, R., Burns, J., Showalter, M., Nicholson, P., 2004. The jovian rings : new results derived from cassini, galileo, voyager, and earth-based observations. Icarus 172 (1), 59 – 77, special Issue : Cassini-Huygens at Jupiter.
URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103504000247

Thuillier, G., Floyd, L., Woods, T. N., Cebula, R., Hilsenrath, E., Hersé, M., Labs, D., Jan. 2004. Solar irradiance reference spectra for two solar active levels. Advances in Space Research 34, 256–261.

Tobiska, W. K., Woods, T., Eparvier, F., Viereck, R., Floyd, L., Bouwer, D., Rottman, G., White, O. R., Sep. 2000. The SOLAR2000 empirical solar irradiance model and forecast tool. Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics 62, 1233–1250.

Tokunaga, A. T., Caldwell, J., Gillett, F. C., Nolt, I. G., 1978. Spatially resolved infrared observations of Saturn. II - The temperature enhancement at the South Pole of Saturn. Icarus 36, 216–222.

Trafton, L., Lester, D. F., Thompson, K. L., Aug. 1989. Unidentified emission lines in Jupiter's northern and southern 2 micron aurorae. Astrophys. J. Lett. 343, L73–L76.

Tyler, G. L., Eshleman, V. R., Anderson, J. D., Levy, G. S., Lindal, G. F., Wood, G. E., Croft, T. A., Jan. 1982. Radio science with Voyager 2 at Saturn - Atmosphere and ionosphere and the masses of Mimas, Tethys, and Iapetus. Science 215, 553–558.

Van Leer, B., 1977. Towards the ultimate conservative difference scheme. iv. a new approach to numerical convection. Journal of computational physics 23 (3), 276–299.

Van Leer, B., 1979. Towards the ultimate conservative difference scheme. v. a second-order sequel to godunov's method. Journal of computational Physics 32 (1), 101–136.

Vander Auwera, J., Moazzen-Ahmadi, N., Flaud, J.-M., Jun. 2007. Toward an Accurate Database for the 12 μm Region of the Ethane Spectrum. Astrophys. J. 662, 750–757.

Venot, O., Hébrard, E., Agúndez, M., Decin, L., Bounaceur, R., May 2015. New chemical scheme for studying carbon-rich exoplanet atmospheres. Astron. Astrophys. 577, A33.

Venot, O., Hébrard, E., Agúndez, M., Dobrijevic, M., Selsis, F., Hersant, F., Iro, N., Bounaceur, R., Oct. 2012. A chemical model for the atmosphere of hot Jupiters. Astron. Astrophys. 546, A43.

Vervack, Jr., R. J., Sandel, B. R., Gladstone, G. R., McConnell, J. C., Parkinson, C. D., Mar. 1995. Jupiter's He 584 Å Dayglow : New Results. Icarus 114, 163–173.

von Zahn, U., Hunten, D. M., Lehmacher, G., Sep. 1998. Helium in Jupiter's atmosphere : Results from the Galileo probe helium interferometer experiment. J. Geophys. Res. 103, 22815–22830.

Vuitton, V., Yelle, R. V., Lavvas, P., Klippenstein, S. J., Jan. 2012. Rapid Association Reactions at Low Pressure : Impact on the Formation of Hydrocarbons on Titan. Astrophys. J. 744, 11.

Waite, J. H., Cravens, T. E., Kozyra, J., Nagy, A. F., Atreya, S. K., Chen, R. H., Aug. 1983. Electron precipitation and related aeronomy of the Jovian thermosphere and ionosphere. J. Geophys. Res. 88, 6143–6163.

Wakelam, V., Herbst, E., Loison, J.-C., Smith, I. W. M., Chandrasekaran, V., Pavone, B., Adams, N. G., Bacchus-Montabonel, M.-C., Bergeat, A., Béroff, K., Bierbaum, V. M., Chabot, M., Dalgarno, A., van Dishoeck, E. F., Faure, A., Geppert, W. D., Gerlich, D., Galli, D., Hébrard, E., Hersant, F., Hickson, K. M., Honvault, P., Klippenstein, S. J., Le Picard, S., Nyman, G., Pernot, P., Schlemmer, S., Selsis, F., Sims, I. R., Talbi, D., Tennyson, J., Troe, J., Wester, R., Wiesenfeld, L., Mar. 2012. A KInetic Database for Astrochemistry (KIDA). Astrophys. J. Suppl. 199, 21.

Waterson, N., Deconinck, H., 1995. A unified approach to the design and application of bounded higher-order convection schemes. Numerical methods in laminar and turbulent flow. 9, 203–214.

Waterson, N., Deconinck, H., 2007. Design principles for bounded higher-order convection schemes–a unified approach. Journal of Computational Physics 224 (1), 182–207.

West, R. A., Friedson, A. J., Appleby, J. F., 1992. Jovian large-scale stratospheric circulation. Icarus 100, 245–259.

Wong, A.-S., Lee, A. Y. T., Yung, Y. L., Ajello, J. M., May 2000. Jupiter : Aerosol Chemistry in the Polar Atmosphere. Astrophys. J. Lett. 534, L215–L217.

Wong, A.-S., Yung, Y. L., Friedson, A. J., Apr. 2003. Benzene and Haze Formation in the Polar Atmosphere of Jupiter. Geophys. Res. Lett. 30, 1447.

Yelle, R. V., Griffith, C. A., Young, L. A., 2001. Structure of the Jovian Stratosphere at the Galileo Probe Entry Site. Icarus 152, 331–346.

Yelle, R. V., Miller, S., 2004. Jupiter's thermosphere and ionosphere. pp. 185–218.

Young, R. E., Smith, M. A., Sobeck, C. K., May 1996. Galileo Probe : In situ Observations of Jupiter's Atmosphere. Science 272, 837–838.

Yung, Y., DeMore, W., 1999. Photochemistry of Planetary Atmospheres. Oxford University Press.
URL `http://books.google.fr/books?id=n2LBngEACAAJ`

Zhang, X., Shia, R.-L., Yung, Y. L., 2013. Jovian Stratosphere as a Chemical Transport System : Benchmark Analytical Solutions. Astrophys. J. 767, 172.