



HAL
open science

Représentation des processus sous-mailles dans les modèles simplifiés de climat : maximisation de la production d'entropie et modélisation stochastique

Vincent Labarre

► To cite this version:

Vincent Labarre. Représentation des processus sous-mailles dans les modèles simplifiés de climat : maximisation de la production d'entropie et modélisation stochastique. Climatologie. Université Paris-Saclay, 2020. Français. NNT : 2020UPASJ001 . tel-03252542

HAL Id: tel-03252542

<https://theses.hal.science/tel-03252542>

Submitted on 7 Jun 2021

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.

Représentation des processus
sous-maillages dans les modèles simplifiés
de climat : maximisation de la
production d'entropie et modélisation
stochastique

Thèse de doctorat de l'université Paris-Saclay

École doctorale n° 129 : sciences de l'environnement
d'Ile-de-France (SEIF)

Spécialité de doctorat: océan, atmosphère, climat et
observations spatiales

Unités de recherche:
Université Paris-Saclay, CNRS, CEA, UVSQ, LSCE, 91191, Gif-sur-Yvette,
France

Référent: Université de Versailles -Saint-Quentin-en-Yvelines

**Thèse présentée et soutenue à Gif-sur-Yvette, le 08/10/2020
par**

Vincent LABARRE

Composition du jury:

Philippe Bousquet Professeur, LSCE Université Paris-Saclay	Président du jury
Michel Crucifix Directeur de recherche FNRS, SST Université Catholique de Louvain	Rapporteur
Christophe Goupil Professeur, LIED Université Paris-Diderot	Rapporteur
Corentin Herbert Chargé de recherche CNRS, Laboratoire de physique École Normale Supérieure de Lyon	Examineur
Cécile Monthus Directrice de recherche CNRS, IPHT Université Paris- Saclay	Examinatrice
Didier Paillard Directeur de Recherche CEA, LSCE CEA	Directeur
Bérengère Dubrulle Directrice de recherche CNRS, SPEC CEA	Codirectrice
Jean-Louis Dufresne Directeur de recherche CNRS, LMD Sorbonne Université	Invité

Titre: Représentation des processus sous-maillages dans les modèles simplifiés de climat : maximisation de la production d'entropie et modélisation stochastique

Mots clés: Modélisation, Climat, Physique Statistique, Entropie

Résumé: Comme tout modèle numérique, les modèles usuellement utilisés pour simuler le système climatique ont une résolution finie, liée à la taille des mailles de la grille sur laquelle on intègre les équations du modèle. Pour une grande partie des problèmes soulevés en climatologie, la taille des mailles reste, et restera sûrement, bien supérieure à la plus petite échelle nécessaire pour l'intégration des équations. Ce problème apparaît en particulier dans la représentation des plus petits tourbillons des écoulements atmosphériques et océaniques. Pour corriger les effets indésirables liés au manque de résolution, il faut introduire un modèle qui représente les phénomènes sous-maillages. Les approches usuelles introduisent généralement des paramètres qui sont difficiles à calibrer dans le contexte de l'étude du climat, et ne parviennent pas toujours à être en accord avec les observations. Une des questions centrales de la simulation numérique du système climatique est donc de trouver la(es) bonne(s) méthode(s) de modélisation sous-maille. On envisage ici deux approches pour tenter de résoudre ce problème.

La première est la construction de modèles simplifiés de climat basés sur le bilan d'énergie et la Maximisation de Production d'Entropie (MEP) en hypothèse de fermeture.

Cette approche présente la particularité de ne pas introduire de paramètres supplémentaires pour les processus représentés par MEP. On montre qu'une description minimale de la dynamique dans un modèle radiatif-convectif utilisant l'hypothèse MEP permet de représenter les aspects les plus importants de la convection atmosphérique. Le formalisme de MEP est étendu pour représenter des problèmes dépendant du temps en appliquant cette hypothèse uniquement aux composantes rapides du système. Ce résultat ouvre la perspective d'utilisation de MEP dans des modèles simplifiés du cycle saisonnier.

La seconde approche consiste à mettre en oeuvre une méthode d'analyse et de modélisation sous-maille dans un système simple : un gaz sur réseaux diffusif. La variation temporelle du flux de particules à gros-grain à différentes échelles est analysée avant d'être représentée par des méthodes de physique statistique. Le modèle sous-maille, construit sans ajout de paramètre supplémentaire, est basé sur une équation de relaxation stochastique locale du courant de particule. La méthode d'analyse est ensuite employée pour étudier la dynamique de la vorticit  dans l'écoulement de Von-Karman.

Title: On the representation of sub-grid processes in simplified climate models: the Maximum Entropy Production hypothesis and stochastic modeling

Keywords: Modeling, Climate, Statistical Physics, Entropy

Abstract: Like any numerical model, the models usually used to simulate the climate system have a finite resolution, linked to the size of the grid cells on which the model equations are integrated. For a large part of the problems raised in climatology, the mesh size remains, and will surely remain, much larger than the smallest scale necessary for the integration of the equations. This problem appears in particular in the representation of the smallest vortices of atmospheric and oceanic flows. To correct the undesirable effects linked to the lack of resolution, it is necessary to introduce a model for the sub-grid phenomena. The usual approaches generally introduce parameters which are difficult to calibrate in the context of the study of the climate and do not always manage to agree with the observations. One of the central questions of the numerical simulation of the climate system is therefore to find the right sub-grid modeling method(s). Two approaches are investigated to resolve this problem.

The first is the construction of simplified climate models based on the energy balance and the Maximization of Entropy Production

(MEP) as the closure hypothesis. This approach has the particularity to not introduce additional parameters to represent the processes modeled with MEP. We show that a minimal description of the dynamics in a radiative-convective model using the MEP hypothesis allows us to represent the most important aspects of atmospheric convection. The MEP hypothesis is extended to represent time-dependent problems by applying this hypothesis only to the fast components of a system. This result opens the possibility of using this type of model to represent the seasonal cycle.

The second approach consists in implementing a sub-grid analysis and modeling method in a simple system: a diffusive lattice-gas. The temporal variation of the coarse-grained flow of particles at different scales is analyzed before being modeled by statistical physics methods. The sub-grid model, constructed without adding any additional parameters, is based on a local stochastic relaxation equation of the particle current. The analysis method is then used to study the dynamics of vorticity in the Von-Karman flow.

Remerciements

Mes directeurs de thèse m'ont apporté un soutien sans faille au travers de leurs réponses à mes nombreuses interrogations, leurs relectures attentives, la préparation des conférences, et leurs encouragements. D'un point de vue scientifique et humain, je me sais très chanceux d'avoir été leur doctorant. Je remercie donc Bérengère et Didier pour leur supervision bienveillante. Ils m'ont toujours guidé dans l'avancée de cette thèse tout en m'amenant progressivement à être autonome. Je me réjouis d'avoir bénéficié de leurs connaissances en Physique, modélisation du Climat, et Science en général.

Je remercie Michel Crucifix et Christophe Goupil qui ont accepté d'examiner et de corriger ce manuscrit, Cécile Monthus et Philippe Bousquet qui ont accepté d'être examinateurs, Corentin Herbert et Jean-Louis Dufresne qui m'ont également aidé durant les comités de thèse. Je les remercie vivement pour le travail bénévole qu'ils ont accompli afin d'améliorer et/ou d'examiner mon travail. Leurs remarques ont contribué à améliorer significativement le contenu de ce manuscrit.

Je remercie Hélène Brogniez, Isabelle Pison et Emmanuel Marcq pour leur aide lors de l'encadrement des TP de Modélisation du climat à l'UVSQ, ainsi que Marie-Alix Duval, Véronica Beswick, et Rosa Ramirez pour m'avoir donné l'opportunité d'encadrer des TP et TD dans leurs cours de Physique à l'UEVE. Je remercie également Isabelle Genau pour son travail d'organisation des journées sur le climat et de la fête de la science.

J'ai bénéficié d'excellentes conditions de travail aux seins du LSCE et du SPEC. Je remercie donc tous les agents administratifs, d'entretien, et de sécurité qui nous permettent de travailler dans des locaux propres et sûrs. Je remercie en particulier Florence Gerry, Catherine Hugen et Nathalie Royer pour leur gentillesse.

Je remercie les membres de l'école doctorale, en particulier Matthieu Roy-Barman, pour le suivi de ma thèse, ainsi que les encadrants des formations doctorales auxquelles j'ai pu participer.

Je remercie l'ensemble des membres des laboratoires qui m'ont très bien accueilli. En particulier : Jean-Yves Peterschmitt pour sa bonne humeur, ses blagues, ses conseils informatiques, et surtout pour m'avoir fourni en sucre ; Lise Missiaen et Anta Klaris Sarr pour leur aide à l'EGU ; Didier Roche pour sa précieuse aide et ses leçons sur iLOVECLIM ; Davide Faranda pour son investissement dans l'organisation des réunions Climat-Méca-Stat ou l'école d'hiver aux Houches ; Pierre Sepulchre pour ses idées de lecture ; Nathaëlle Bouttes pour son aide sur l'utilisation de Basemap ; Masa Kageyama pour son aide dans l'encadrement des TPs de modélisation du climat ; Sébastien Fromang pour ses éclaircissements sur la simulation de la dynamique atmosphérique ; Julien Bruna et Gaele Tristant pour les réparations des conséquences de mes méthodes brutales sous Linux ; Sergio Chibbaro avec qui j'ai été ravi de partager mon bureau. Florentin Breton et Cyril Caram pour m'avoir aidé à décompresser à de nombreuses reprises autour d'un café ou d'une pizza ; Vincent Padilla pour sa fourniture quotidienne en caféine ; Daniel Bonamy pour son approvisionnement hebdomadaire en chouquettes ; Hugues Fallier pour avoir étendu ma culture générale à des domaines allant de la simulation numérique directe de l'écoulement de Von Karman à la présence de kangourous sauvages en forêt de Rambouillet ; Adam Cheminet pour ses conseils et ses éclaircissements sur la TPIV ; Damien Geneste pour avoir récupéré des données essentielles pendant le confinement ; Michel Beaughon pour ses conseils cinématographiques et ses cookies ; Hayoung Bong, Thomas Extier, Marie Sicard, Julia Bres, Fanny Lhardy,

Jean-Claude Dutay, Cristophe Dumas, Aurélien Quiquet, Alexandre Baron, Sébastien Leclech, Sylvie Charbit, Nada Caud, Gilles Ramstein, Camille Contoux, Aglaé Jezequel, Virginie Sellier, Jérôme Servonnat, Tristan Vadsaria, Audrey Brouillet, Elias Drach, Gaelle Leloup, Sophie Morellon, Thomas Le Corre, Stella Bourdin, Bastien François, Miriam D'Errico, Soulivanh Thao, Mathieu Vrac, Sandy Bsabes, Valentina Valori, Cécile Wiertel-Gasquet, Florian Nguyen, Paul Debue, Basile Gallet, Benjamin Miquel, Vincent Bouillaut, Seshasayanan Kannabiran, Sébastien Aumaitre, Kakoli Bhattacharya, Paul Datin, Blanca Torres-Bautista, Michel Mama Toulou, Hervé Bercegol, Vadim Nikolayev, François Ladieu, Sawako Nakamae, Tourbot Roland, Bastien Garitaine, Nenecheva Denitsa.

Je remercie Gatien Verley, Hadrien Vroylandt et Cesare Nardini pour leurs conseils sur des aspects plus théoriques de cette thèse.

Je remercie mes anciens professeurs et tuteurs de stages qui m'ont transmis l'envie de faire des sciences et qui m'ont beaucoup aidé, en particulier Jérôme Mathé, Nathalie Basdevant, Laurent Hilico, Jérôme Leygnier, Frédéric Moisy, Pierre-Philippe Cortet, Denis Bartolo, Freddy Bouchet et Alain Pumir.

D'un point de vue plus personnel, je remercie ma famille, mes amis, et Elisabeth pour m'avoir encouragé et supporté au quotidien.

Table des matières

1	Introduction : la modélisation du climat	1
1.1	Les modèles	1
1.2	Le système climatique	2
1.3	Les questions posées et l'échelle d'observation : différence entre la météorologie et le climat	4
1.4	Des moyens limités : les méthodes d'observation et la puissance de résolution numérique	4
1.5	Les approches usuelles	5
1.6	Objectifs de la thèse	7
I	Construction de modèles de climat basés sur la maximisation de la production d'entropie	9
2	L'hypothèse de maximisation de production d'entropie	11
2.1	Les équations de la dynamique atmosphérique et océanique	11
2.2	Le système climatique comme un système thermodynamique	12
2.3	Maximisation de la production d'entropie	13
2.4	... en modélisation du climat	16
2.5	L'hypothèse de maximisation de production d'entropie du point de vue de la physique statistique	18
3	Représentation simplifiée de la dynamique dans un modèle MEP : cas de la convection atmosphérique	21
3.1	Le problème	21
3.2	Le modèle	22
3.3	Article	27
3.4	Résultats	42
3.5	Conclusions et perspectives	44
4	Formulation de l'hypothèse de maximisation de production d'entropie pour les problèmes dépendant du temps : le cas du cycle saisonnier	45
4.1	Le problème	45
4.2	Le modèle conceptuel	49
4.3	Résultats	51
4.4	Article	54
4.5	Conclusions et perspectives	73

II	Analyse et modélisation stochastique des processus sous-maille	75
5	Le problème de la modélisation sous-maille	77
5.1	La simulation numérique : pourquoi et comment?	77
5.2	Simulation numérique directe vs modélisation sous-maille	83
5.3	Les modélisations sous-maille usuelles	85
5.4	Discussion	87
6	Cas d'un gaz sur réseau diffusif	89
6.1	Le système	89
6.2	Analyse numérique	93
6.3	Modélisation sous-maille	95
6.4	Manuscrit accepté pour publication	102
6.5	Conclusions et perspectives	126
7	Vers une extension aux écoulements turbulents	129
7.1	L'écoulement de Von-Karman	129
7.2	Équation de la vorticité	133
7.3	Analyse	135
7.4	Modélisation sous-maille	138
7.5	Conclusions et perspectives	142
8	Conclusion	143
A	Thermodynamique	159
A.1	Thermodynamique d'équilibre	159
A.2	Thermodynamique hors équilibre	161
B	Optimisation sous contrainte	165
B.1	Introduction	165
B.2	Optimisation différentiable convexe sans contrainte	166
B.3	Optimisation différentiable sous contrainte : méthode de dualité Lagrangienne et conditions KKT	167
B.4	Contraintes d'inégalités : méthodes de points intérieurs	169
B.5	Application aux problèmes MEP	171
C	Gas sur réseaux	173
C.1	Introduction	173
C.2	La dynamique microscopique	177
C.3	Etat d'équilibre macroscopique	180
C.4	La dynamique macroscopique	184

Chapitre 1

Introduction : la modélisation du climat

1.1 Les modèles

Depuis les débuts de la science, les chercheurs de toutes disciplines (mathématiques, physique, chimie, biologie, ingénierie, ...) ont voulu comprendre le monde qui nous entoure. Cette motivation pousse à la construction de modèles, qui sont des visions conceptuelles (et donc simplifiées) de la réalité. Les modèles ont deux objectifs. Le premier est de fournir un cadre à la compréhension d'un phénomène (toutes les théories scientifiques ont été construites dans ce but). Le second est d'obtenir la capacité à faire des prédictions sur l'évolution future du phénomène afin d'avoir un contrôle sur celui-ci (anticiper la propagation d'une maladie pour la limiter, tester la résistance aux vents d'un bâtiment à partir d'un modèle numérique, prévoir les changements climatiques à venir pour s'y adapter, ...).

La modélisation (i.e. la construction d'un modèle) se fait généralement en 4 étapes :

1. L'observation de l'objet d'étude.
2. La conceptualisation de l'objet par l'introduction des notions qui paraissent pertinentes à sa représentation, et leur hiérarchisation. Cette étape n'est pas indépendante du point de vue de l'observateur (notamment des échelles d'espace et de temps d'intérêt). On distingue le système de son environnement. On définit les variables (observables qui caractérisent le système ou son environnement que l'on veut déterminer) et les paramètres (observables qui caractérisent le système ou son environnement que l'on ne cherche pas à déterminer). Il est également nécessaire de décrire les interactions entre les différentes variables et paramètres du modèle, y compris l'effet de l'environnement sur l'objet. C'est un premier effort de modélisation.

À la fin de cette étape, on doit obtenir un système d'équations clos décrivant l'évolution des variables. Plus formellement, on a un système dynamique

$$\frac{dX}{dt} = \mathcal{E}(X, p, \eta, t) \quad (1.1)$$

où X représente l'ensemble des variables, p sont les paramètres, η un processus stochastique représentant les incertitudes et/ou les phénomènes aléatoires, t est le temps, et \mathcal{E} est la loi d'évolution. Dans le cas des modèles continus, les dérivées spatiales interviennent

aussi et on a des équations aux dérivées partielles. Si les variables dépendent du temps, on doit préciser les conditions initiales et si elles dépendent de la position, on doit préciser les conditions aux limites. Un modèle sans processus stochastique est dit déterministe, sinon on parle de modèle stochastique.

3. L'équation (1.1) est résolue analytiquement si c'est possible. Dans le cas contraire, on tente d'approcher la solution par une méthode de résolution numérique, qui fait partie intégrante du modèle. On doit alors faire un second effort de modélisation (choix du maillage, résolution, implémentation, ...). Deux issues sont alors possibles :
 - On a la puissance de calcul et la capacité de stockage nécessaire pour résoudre l'équation d'évolution à une précision suffisante pour approcher la solution réelle. On parle alors de Simulation Numérique Directe.
 - La puissance de calcul et/ou la capacité de stockage ne sont pas suffisantes et il faut avoir une représentation des processus "sous mailles" (i.e. qui interviennent sur des échelles plus petites que la résolution du modèle numérique) : c'est-à-dire construire un nouveau modèle dans le modèle. Cela représente un troisième effort de modélisation.
4. On compare la solution du modèle aux données expérimentales, et on calibre les paramètres selon des critères statistiques (méthode des moindres carrés par exemple).
5. Si le modèle n'atteint pas les objectifs fixés, on lui apporte des modifications jusqu'à ce qu'il y parvienne.

La modélisation est donc un processus dépendant, évidemment, de l'objet d'étude, mais aussi de l'objectif, de l'échelle d'observation, des moyens humains et matériels (nombre et compétences des chercheurs impliqués, mesures expérimentales dont on dispose pour calibrer les paramètres, capacités de calcul et de stockage, ...). On commence généralement avec un modèle simple, puis on le complexifie si nécessaire. Il est commun de faire preuve de parcimonie : pour un même résultat, le modèle le plus simple (notamment celui avec le moins de paramètres) est préférable, car il demandera un moindre effort pour sa construction et son utilisation.

Concrètement, le modélisateur est confronté aux questions suivantes :

- Quelles sont les variables/paramètres pertinents pour décrire le système d'intérêt, à l'échelle d'observation considérée ?
- Quelles sont les interactions mises en jeu, et la loi d'évolution correspondante ?
- Comment résoudre mathématiquement (analytiquement ou numériquement) l'équation d'évolution ?
- Comment calibrer les paramètres du modèle expérimentalement ?

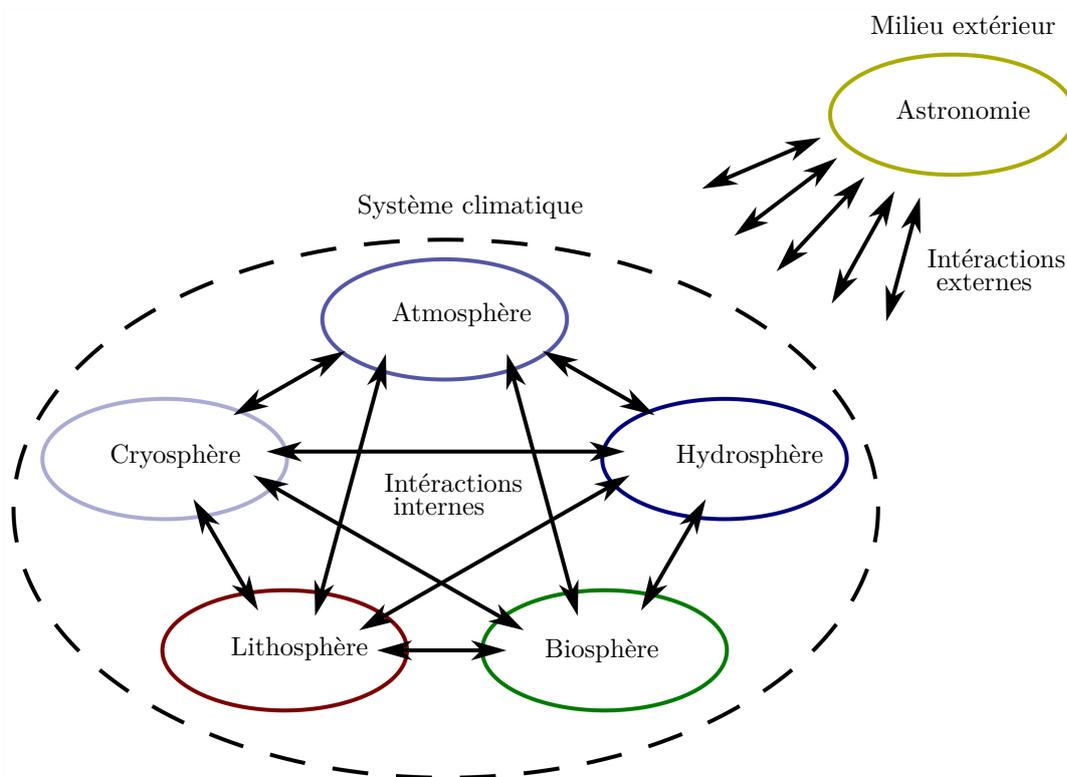
Pour les modèles de climat usuels, au moins les trois derniers points posent problème.

1.2 Le système climatique

Généralement, le système climatique est décomposé de la façon suivante [Peixoto and Oort, 1992] :

- L'atmosphère est la couche gazeuse entourant la Terre ;
- L'hydrosphère représente l'eau sous forme liquide (océans, mers, rivières et lacs, eau de pluie) ;
- La cryosphère représente l'eau solide (glaciers, icebergs, neige) ;
- La biosphère désigne l'ensemble des êtres vivants, animaux et végétaux, terrestres et marins ;
- La lithosphère représente le sol principalement composé de roches ;

FIGURE 1.1 – Vue d’ensemble du système climatique.



- On introduit parfois la notion d’anthrosphère pour désigner l’espèce humaine et son activité.

Chacune de ces composantes peut être vue comme un sous-système ayant des variables, paramètres et interactions internes propres. Mais ces composantes ont également des interactions entre elles. Ainsi, l’évolution du système climatique dépend de nombreux processus physiques, chimiques et biologiques intervenant sur de multiples échelles d’espace et de temps [Huybers and Curry, 2006]. L’ensemble du système climatique est forcé par le milieu extérieur qui est composé des objets spatiaux. Les modèles se limitent à la description des variables/paramètres astronomiques de la Terre les plus pertinents pour déterminer l’insolation : la vitesse de rotation, l’obliquité, mais aussi l’excentricité et la précession. Ces paramètres sont estimés sur des périodes de temps de plusieurs millions d’années [Laskar, J. et al., 2004].

Le système climatique peut donc être représenté de façon schématique comme sur la figure 1.1. Cette représentation est pragmatique : elle permet une meilleure répartition du travail de modélisation entre les différents spécialistes du climat, qui se regroupent en équipes autour des différentes composantes. Chaque équipe développe généralement un sous-modèle pour une composante du système climatique en tenant compte de l’influence des autres composantes comme des forçages externes. Vient ensuite la question du raccordement entre les différents sous-modèles (ici appelées interactions internes) : c’est le rôle de modèles qui sont appelés coupleurs. Tous les

modèles de climat ne représentent pas les composantes et leurs interactions de la même façon.

1.3 Les questions posées et l'échelle d'observation : différence entre la météorologie et le climat

Le climat est communément défini comme l'ensemble des phénomènes météorologiques qui caractérisent l'état moyen (et éventuellement les fluctuations) de l'atmosphère en un lieu donné. Cette définition pose problème pour deux raisons. Premièrement, elle est focalisée sur la composante atmosphérique. La seconde est que la façon de faire les statistiques sur les variables atmosphériques n'y est pas précisée (Doit-on utiliser une moyenne glissante ou un coarse-graining ? Sur quelles échelles spatio-temporelles ?). Le Climat n'a donc pas une définition mathématique rigoureuse et unique, ce qui peut poser problème.

Dans cette thèse, nous considérerons le climat comme les statistiques de l'ensemble des variables du système climatique (la température de l'atmosphère, l'humidité, la vitesse des vents, la salinité de l'océan, le recouvrement neigeux des massifs, ...) coarse-grainées sur des échelles d'espace et de temps fixées (du *km* à l'échelle globale et du jour à plusieurs milliers d'années). On distingue le climat de la météorologie, qui s'attache à prédire l'évolution déterministe du système, sur toutes les échelles de temps [Herbert, 2014]. La météorologie est une vision "microscopique" (avec la meilleure résolution possible) et déterministe tandis que le climat est une vision "macroscopique" (seulement à une échelle d'intérêt/d'observation) et statistique.

Les questions posées sont de deux types :

1. Quel est l'effet d'un forçage sur une variable d'intérêt, connaissant les mécanismes ? (i.e. trouver les conséquences en connaissant les causes).
2. Quels sont les mécanismes qui sont responsables des changements d'une variable d'intérêt ? (i.e. remonter aux causes en observant les conséquences).

Le premier type de questions est au coeur des préoccupations des climatologues cherchant à déterminer l'évolution du système climatique sous l'effet de l'activité humaine ou d'une variation naturelle [Hansen et al., 1997, Randall et al., 2007] : Quelle est la sensibilité du système climatique (différence de température de surface due à un doublement de concentration en CO_2 atmosphérique) ? Quelle sera le changement de fréquence des vagues de chaleur si on augmente nos émissions de gaz à effet de serre ? Le second type de questions intéresse notamment la communauté des paléo-climatologues qui cherchent à comprendre l'évolution du climat passé sur des périodes de plusieurs milliers d'années [Crucifix et al., 2002]. Ils s'attachent à comprendre les mécanismes responsables des cycles glaciaires-interglaciaires [Paillard, 2015], l'effet des réactions chimiques [Isaksen et al., 2009], ... Évidemment, ces questions sont liées et les climatologues vérifient s'ils sont capables de comprendre l'évolution des climats passés [Kageyama et al., 2013] pour améliorer leurs prédictions du climat futur, et pour calibrer les modèles [Schmidt et al., 2014].

1.4 Des moyens limités : les méthodes d'observation et la puissance de résolution numérique

Les données expérimentales sur le climat sont principalement obtenues par les analyses satellites, les campagnes de mesures atmosphériques/océaniques en avions/bateaux, l'analyse des carottes de glaces et des sédiments. Ces données sont parcellaires et ne permettent donc pas d'avoir une

compréhension fine de tous les aspects du système climatique.

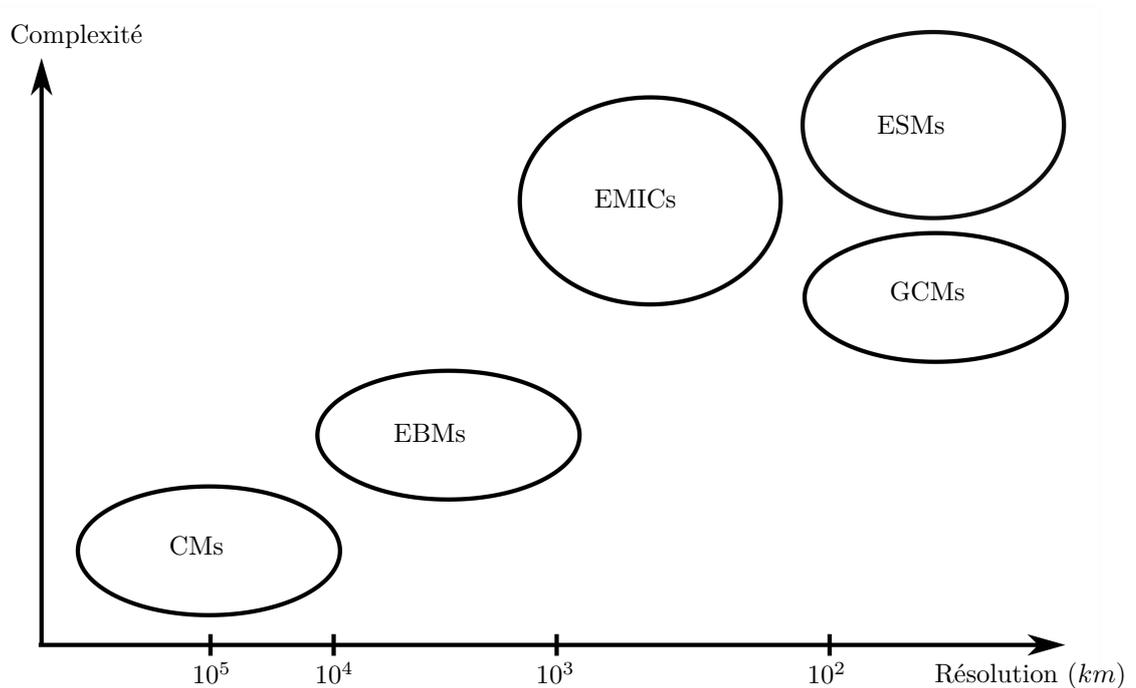
Les équations d'évolutions obtenues pour la plupart des modèles sont trop complexes pour être résolues analytiquement. On opte alors pour une résolution numérique. C'est le cas notamment pour les équations utilisées pour représenter les mouvements atmosphériques et océaniques (voir par exemple [Heikes and Randall, 1995a, Heikes and Randall, 1995b]). La simulation numérique est donc très utilisée en météorologie [Lynch and Richardson, 2006] et en modélisation du climat. La résolution du maillage est limitée par la capacité de stockage et de calcul : de l'ordre de $1km$ pour les modèles météorologiques et de $100km$ pour les modèles de climat. Hors des phénomènes importants ont lieu à des échelles plus petites comme les mouvements turbulents (i.e. la convection à petite échelle) et la formation de nuages. Ainsi, en météorologie et en climatologie, les modélisateurs sont contraints de représenter les processus sous-mailles (et ils le seront certainement toujours au vu de la gamme d'échelles concernée). Ces processus sous-maille sont représentés de façon assez similaire dans les deux communautés, si bien que les méthodes numériques et les équations utilisées en météorologie et en climat sont très similaires.

1.5 Les approches usuelles

Compte tenu du grand nombre de variables et de paramètres mis en jeu, de la variété des échelles spatio-temporelles d'intérêt (du cycle diurne aux cycles glaciaires-intéglaciaires), et des limitations des moyens d'observations et de simulation, il n'y pas de modèle de climat "général", répondant à toutes les questions. Les climatologues construisent donc des modèles prenant en compte les processus les plus importants (et qu'ils sont capables de représenter) au vu des questions posées. Cela mène à la construction de nombreux modèles qui se distinguent, entre autres, par leurs complexités (le nombre de processus représentés), leurs résolutions spatio-temporelles, et le temps et la zone simulée (qui est souvent décroissante avec la résolution) (cf figure 1.2). On peut lister différents types de modèles :

- Les modèles conceptuels CM (pour Conceptual Models en anglais) servent généralement à illustrer l'importance de certains processus [Budyko, 1969, Chýlek and Coakley, 1975, Paillard, 1998].
- Les modèles à bilan d'énergie EBM (pour Energy Balance Models en anglais) sont basés sur l'équation de bilan d'énergie, avec une représentation simplifiée des flux d'énergie. Les modèles radiatifs-convectifs [Manabe and Strickler, 1964] et les modèles méridionaux [Sellers, 1969, Faegre, 1972, Oerlemans and Van Den Dool, 1978, North et al., 1981, Thompson and Schneider, 1979] font partie de ce type de modèles.
- Les modèles de circulation générale GCM (pour Global Circulation Model en anglais) représentent explicitement la circulation atmosphérique et/ou océanique en se basant sur des approximations des équations de bilan de la mécanique des fluides [Smagorinsky, 1963, Adcroft et al., 2004].
- Les modèles de complexité intermédiaires EMIC (pour Earth Model of Intermediate Complexity en anglais) sont des modèles globaux ayant une assez faible résolution spatio-temporelle et faisant de nombreuses approximations sur les dynamiques atmosphériques et océaniques pour trois raisons. La première est de pouvoir faire des simulations sur des durées plus longues (notamment pour étudier les paléoclimats). La seconde est de d'utiliser la puissance de calcul pour représenter des processus qui ne sont pas représentés dans les GCM (végétation, biogéochimie, dynamique des calottes de glace). La troisième est la volonté de construire des modèles ne demandant pas un trop gros effort de calcul. [Goosse et al., 2010].

FIGURE 1.2 – Une classification (parmi d'autres) des modèles de climat.



- Les modèles "globaux" ESM (pour Earth System Models) tentent de tenir compte du maximum de processus (végétation, biogéochimie, dynamique des calottes de glace, ...) tout en gardant une résolution élevée [Dufresne et al., 2013].
- Les modèles régionaux sont des modèles de type GCM/ESM qui simulent une zone géographique précise.
- Les IAM (pour Integrated Assessment Models) essaient de tenir compte de l'activité humaine (notamment l'activité économique) pour tenter de donner des informations aux décideurs politiques.

Pour les modèles qui représentent la circulation atmosphérique et/ou la circulation océanique, on distingue souvent le "cœur dynamique" des "paramétrisations physiques". Le cœur dynamique représente des principes connus, fiables, résolus avec des méthodes numériques robustes. Les approximations utilisées (hydrostatique, couche mince, ...) se justifient à partir de l'analyse des ordres de grandeurs. Par opposition, les paramétrisations physiques regroupent toutes les méthodes de représentation des processus sous-maillages, souvent mal connus. Elles reposent sur une description plus ou moins précise des processus (convection, formation de nuage, hydrologie, dynamique des écosystèmes, ...), et font souvent intervenir de nombreux paramètres dont certains sont mal contraints¹. Cette partie demande un gros effort de modélisation, puis de calibration, appelé "tuning" [Hourdin et al., 2017]. Bien que le tuning permette souvent de réduire efficacement l'écart entre le modèle et les observations, il peut aussi masquer les problèmes fondamentaux et le besoin d'amélioration du modèle. Par ailleurs, la paramétrisation n'améliore pas nécessairement

1. Il arrive même que des fonctions à seuil soient introduites empiriquement. C'est le cas pour les flux d'énergie verticaux [Louis, 1979]

la prédictibilité des modèles [Stevens and Bony, 2013]. Les modélisateurs choisissent entre tenter d’augmenter le pouvoir de prédiction du modèle (quitte à paramétrer d’avantage), soit essayer de limiter le recours aux paramétrisations. On distingue donc trois axes de développement des modèles :

1. Complexifier (sur la base de principes physiques connus et/ou d’empirisme) pour essayer de mieux prédire.
2. Essayer de simplifier le modèle pour une capacité de prédiction similaire en ne gardant que les processus les plus importants.
3. Les améliorations techniques liées à la résolution numérique (changement du type de maillage, augmentation de la puissance de calcul et de la capacité de stockage, parallélisation, ...). Cet axe de développement repose sur les progrès en informatique et en mathématiques appliquées.

1.6 Objectifs de la thèse

Il est important de bien représenter les processus sous-mailles pour répondre à certaines questions. Par exemple, la bonne représentation des flux d’énergies atmosphérique passe par une bonne représentation de la turbulence. Malgré les problèmes soulevés par les paramétrisations, elles paraissent difficilement contournables dans l’étude du système climatique dans sa généralité. Toutefois, certains phénomènes ne nécessitent pas d’être représentés par des modèles faisant intervenir de nombreux paramètres. Il y a de nombreux exemples où le nombre de variables du problème a pu être réduite par l’utilisation de séparations d’échelles (de temps et/ou d’espace) entre la vision microscopique et la vision macroscopique du même système et/ou l’utilisation d’hypothèses statistiques. La Thermodynamique, puis la Physique Statistique, ont par exemple permis de décrire un gaz de N particules avec $N \gg 1$ [Kremer, 2010], les fluides parfaits 2D [Bouchet and Venaille, 2012] ou plus généralement les systèmes ayant des interactions à longues portées [Campa et al., 2014]. Ces outils peuvent donc être d’une grande utilité pour la modélisation du climat.

Le premier objectif de cette thèse est de développer des modèles de climat à bilan d’énergie basés sur l’hypothèse de maximisation de production d’entropie afin d’essayer de s’affranchir des paramétrisations usuellement utilisées pour représenter la turbulence atmosphérique. Nous détaillons plus précisément cette approche au chapitre 2.

Le deuxième objectif de cette thèse est d’utiliser les outils d’analyse numérique et de la physique statistique hors équilibre pour tenter de résoudre le problème de modélisation sous-maille sur un système simple : un gaz sur réseaux diffusif. On essaye ensuite d’étendre les méthodes développées sur le gaz sur réseau pour étudier un écoulement turbulent. Nous détaillons plus en détail cette approche au chapitre 5.

Première partie

Construction de modèles de climat basés sur la maximisation de la production d'entropie

Chapitre 2

L'hypothèse de maximisation de production d'entropie

2.1 Les équations de la dynamique atmosphérique et océanique

Les équations utilisées pour représenter les mouvements atmosphériques et océaniques sont basées sur des approximations des équations de bilan de masse, d'impulsion, et d'énergie des fluides géophysiques. On les écrit (voir par exemple [Vallis, 2017]) :

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (2.1)$$

$$\frac{Dn_i}{Dt} = -\nabla \cdot (\kappa_i \nabla n_i) + Q_i \quad (2.2)$$

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} + 2\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g} \quad (2.3)$$

$$\frac{De}{Dt} = -\nabla \cdot (\kappa_e \nabla e) + Q_e \quad (2.4)$$

$$p = p(\rho, T, n_i) \quad (2.5)$$

$$e = e(\rho, T, n_i) \quad (2.6)$$

où ρ est la masse volumique du fluide, \mathbf{v} est sa vitesse, n_i est la concentration du scalaire i (vapeur d'eau, gaz à effet de serre, ...), κ_i est la diffusivité du scalaire i , Q_i est la source du scalaire i , $\boldsymbol{\Omega}$ le taux de rotation de la Terre, p est la pression, ν est la viscosité cinématique du fluide, \mathbf{g} est l'accélération de pesanteur (et celle de la force centrifuge), T est la température, e est l'énergie interne, κ_e est la diffusivité de l'énergie interne et Q_e est la source d'énergie interne. Les deux dernières lignes sont les équations d'état : on prend généralement la loi des gaz parfaits pour l'atmosphère et des relations empiriques pour l'océan.

Ces équations peuvent être simplifiées, notamment grâce à l'approximation de couche mince. L'équilibre hydrostatique (équilibre entre le gradient de pression vertical et la gravité) sur la verticale est alors bien vérifié. Les vents horizontaux sont décrits en première approximation par l'équilibre géostrophique (équilibre entre le gradient de pression horizontal et la force de Coriolis).

Ces deux grands équilibres permettent d’avoir une vision qualitative de la circulation générale (i.e. à grande échelle) atmosphérique [Perlwitz et al., 2017]. La circulation générale océanique est principalement forcée par les gradients de température et de salinité entre l’équateur et les pôles, et les vents de surfaces [Rahmstorf, 2006].

Les équations (2.1-2.6) posent deux problèmes. Premièrement, d’un point de vue théorique, on ne sait pas résoudre ces équations, et aucune simplification connue (comme le modèle quasi-géostrophique) permet de décrire tous les traits des circulations générales. Deuxièmement, la circulation générale moyenne ne représente pas le seul moyen de transport de matière, d’impulsion et d’énergie. Il faut aussi prendre en compte la convection à petite échelle (i.e. la turbulence). On peut par exemple regarder l’évolution des variables atmosphériques et océaniques qui varient beaucoup aux échelles de temps météorologiques (<https://earth.nullschool.net/>) et qui peut être assez éloignée du schéma simplifié des circulations générales. On remarque aussi que même si l’hypothèse hydrostatique est bien vérifiée, cela n’empêche pas des mouvements convectifs brefs et intenses de transporter de l’énergie sensible et latente au sommet de l’atmosphère. Comme énoncé à la section précédente, les équations ne peuvent être intégrées numériquement ce qui mène au problème de représentation des processus sous-maille. Or, dans certains cas, on s’intéresse avant tout au bilan d’énergie, et on voudrait s’affranchir du calcul explicite de la dynamique à petite échelle.

2.2 Le système climatique comme un système thermodynamique

Le système climatique est forcé par les phénomènes astronomiques. Dans la plupart des cas, on s’intéresse surtout au chauffage radiatif lié au rayonnement solaire et aux réémissions infrarouges vers l’espace. Ce chauffage est inhomogène sur l’horizontale [Trenberth and Caron, 2001], sur la verticale [Trenberth et al., 2009], et dans le temps [Betts and Ball, 1995]. Sur l’horizontale, plus d’énergie solaire est absorbée aux basses latitudes pour des raisons géométriques tandis que les hautes latitudes ont un bilan radiatif net négatif. Sur la verticale, plus d’énergie solaire est absorbée au niveau du sol tandis que bilan d’énergie absorbée par le sommet de l’atmosphère est négatif. Le chauffage dépend également du temps. Par exemple, l’énergie solaire est absorbée uniquement le jour tandis que le flux infrarouge est émis le jour et la nuit. On observe donc un bilan radiatif net positif le jour et négatif la nuit. Ces inhomogénéités spatiales et temporelles entraînent l’apparition des flux d’énergies horizontaux et verticaux, ainsi que le stockage et la réémission d’énergie par inertie thermique qui réduisent les inhomogénéités. Le chauffage/refroidissement entraîne également des changements de phase de l’eau, et influence les cinétiques chimiques, la végétation, ... La dynamique du climat est donc marquée par des échanges de masse et d’énergie sous toutes ses formes (masse, sensible, latente, chimique, potentielle ou cinétique). Il est alors tentant d’aborder une vision purement énergétique, c’est ce qui est fait dans les EBM. On utilise alors les équations de bilan de masse et d’énergie interne

$$\partial_t n_i + \nabla \cdot \mathbf{J}_i = Q_i, \quad (2.7)$$

$$\partial_t e + \nabla \cdot \mathbf{J}_e = Q_e, \quad (2.8)$$

$$e = e(\rho, T, n_i), \quad (2.9)$$

où \mathbf{J}_i la somme des flux convectif et diffusif du scalaire i et \mathbf{J}_e est la somme des flux convectif et diffusif d’énergie interne. Ces flux sont inconnus, car on ne résout pas l’équation de bilan

d'impulsion qui permet de calculer la vitesse \mathbf{v} . Il faut donc spécifier l'expression des flux non résolus explicitement : c'est ce que l'on appelle une hypothèse de fermeture. L'hypothèse de fermeture la plus simple est de représenter les flux par une diffusion effective, linéaire ou non, qui peut dépendre éventuellement de la latitude et des paramètres du problème [Sellers, 1969, Faegre, 1972, North et al., 1981]. Dans le cas le plus simple, on utilise

$$\mathbf{J}_e = \kappa_{eff} \nabla e \quad (2.10)$$

où κ_{eff} est la diffusivité effective. Souvent, on introduit des paramètres supplémentaires pour séparer le transport d'énergie latent du transport d'énergie sensible. Le premier problème posé par cette hypothèse est que l'on remplace un flux convectif par un flux diffusif. Le second problème est qu'il faut calibrer la diffusivité effective sur des observations.

2.3 Maximisation de la production d'entropie ...

La Maximisation de la Production d'Entropie (MEP) est une hypothèse de fermeture alternative [Ziman, 1956, Ziegler and Wehrli, 1987, Ozawa et al., 2003, Martyushev and Seleznev, 2006, Reis, 2014, Martyushev and Seleznev, 2014]. On donne ici un énoncé correspondant à l'utilisation de l'hypothèse MEP dans les modèles de climat semblables à ceux qui nous intéressent ici.

Hypothèse MEP : À l'état stationnaire, les flux d'énergie internes \mathbf{J} maximisent la production d'entropie interne globale

$$\sigma = \int_V \mathbf{J} \cdot \nabla \left(\frac{1}{T} \right) \mathrm{d}\mathbf{r} \quad (2.11)$$

$$= \int_V \frac{-\nabla \cdot \mathbf{J}}{T} \mathrm{d}\mathbf{r}, \quad (2.12)$$

$$= \int_V \frac{-Q[T]}{T} \mathrm{d}\mathbf{r}, \quad (2.13)$$

sous contrainte de conservation de l'énergie

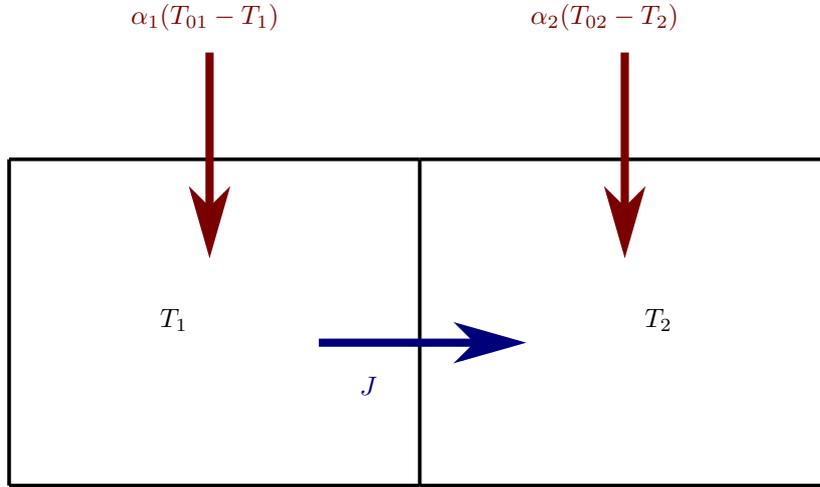
$$\nabla \cdot \mathbf{J} = Q[T], \quad (2.14)$$

avec la source d'énergie $Q[T]$ qui est supposée être une fonctionnelle du champ de température, donnée par le bilan radiatif. On résout le problème en cherchant l'optimum en température directement. On impose alors la contrainte de conservation globale de l'énergie, ou de façon équivalente, la contrainte que les flux \mathbf{J} sont par définition interne au système :

$$\mathcal{C} \equiv \int_V \nabla \cdot \mathbf{J} \mathrm{d}\mathbf{r} = \int_V Q[T] \mathrm{d}\mathbf{r} = 0. \quad (2.15)$$

Afin d'illustrer la façon dont l'hypothèse MEP est employée, on considère le modèle à deux boîtes suivant, inspiré par [Lorenz, 2010]. Une boîte de température T_1 est chauffée par le milieu extérieur par un flux $\alpha_1(T_{01} - T_1)$ et l'autre boîte de température T_2 est chauffée par un flux

FIGURE 2.1 – Le modèle à 2 boîtes. Les flux en rouge représentent le forçage représenté explicitement tandis que le flux interne J est inconnu et optimisé par MEP.



$\alpha_2(T_{02} - T_2)$. Ces flux constituent un forçage prescrit¹. Les deux boîtes peuvent également échanger de l'énergie par un courant interne J , que l'on suppose inconnu² (figure 2.1). Les équations de bilan d'énergie à l'état stationnaire pour les deux boîtes s'écrivent

$$\underbrace{\alpha_1(T_{01} - T_1)}_{\equiv Q_1} - J = 0, \quad (2.16)$$

$$\underbrace{\alpha_2(T_{02} - T_2)}_{\equiv Q_2} + J = 0, \quad (2.17)$$

et la production d'entropie interne est

$$\sigma = J \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right). \quad (2.18)$$

On a 3 inconnues (T_1, T_2 et J) pour seulement 2 équations de bilan. L'hypothèse MEP consiste à choisir la valeur de J qui maximise σ .

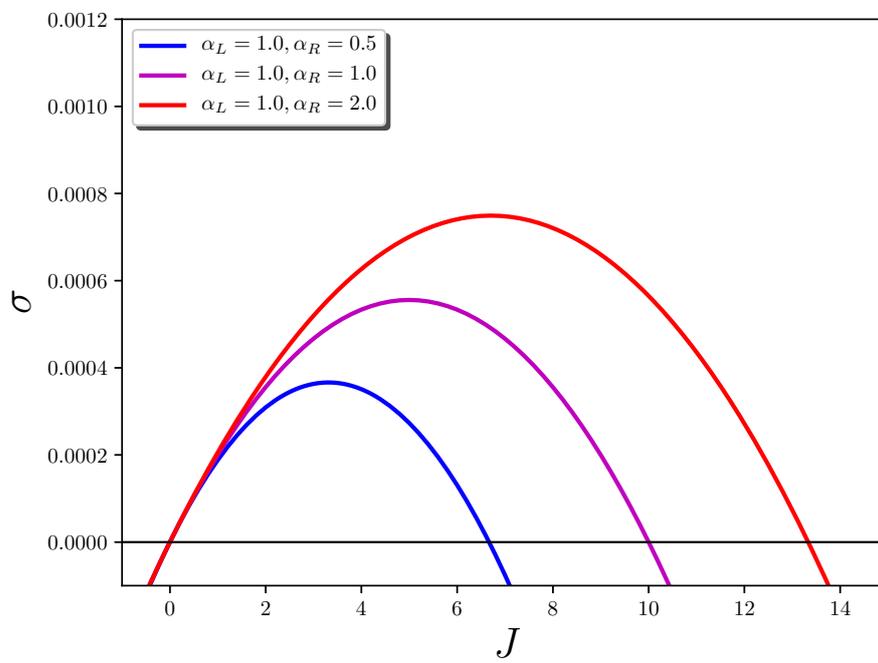
Pour ce modèle simple, on peut facilement exprimer σ en fonction de J et des paramètres du problème $\alpha_1, \alpha_2, T_{01}$ et T_{02} . La production d'entropie interne est représentée sur la figure 2.2 pour $T_{01} = 310K$ et $T_{02} = 290K$. On observe que σ_I atteint un maximum positif entre deux cas limites pour lesquelles $\sigma_I = 0$: $J = 0$ et $T_1 = T_2 = T = (\alpha_1 T_{01} + \alpha_2 T_{02}) / (\alpha_1 + \alpha_2)$ (pour $J = \alpha_1 \alpha_2 (T_{01} - T_{02}) / (\alpha_1 + \alpha_2)$).

L'hypothèse MEP présente au moins deux différences notables avec le formalisme usuel de la Thermodynamique hors équilibre (annexe A), utilisé par exemple pour étudier l'efficacité des

1. Dans la suite, ces flux seront donnés par le bilan radiatif, explicitement représenté dans le modèle.

2. Dans la suite, ce flux représentera les flux d'énergies assurés par les écoulements atmosphériques.

FIGURE 2.2 – Production d'entropie interne σ du modèle à deux boîtes en fonction du flux interne J pour différentes valeurs des paramètres.



systèmes [Goupil and Herbert, 2020]. La première est que la production d'entropie est associée aux flux d'énergie convectifs et diffusifs, alors que dans le formalisme usuel, seul les flux diffusifs produisent de l'entropie. La seconde est que l'on s'intéresse à la production d'entropie de façon globale, et non à la production d'entropie locale comme dans le formalisme usuel.

2.4 ... en modélisation du climat

Les modèles utilisés en climat sont évidemment plus élaborés que le modèle à 2 boîtes. Cependant, le principe reste le même. L'hypothèse MEP remplace les hypothèses de fermeture classiques (en diffusion) utilisées dans les EBMs. Q représente alors le forçage radiatif et \mathbf{J} est le flux d'énergie interne. Les premiers modèles de ce type étaient des modèles méridionaux qui calculaient le champ de température et la couverture nuageuse [Paltridge, 1975, Paltridge, 1978, Paltridge, 1981]. L'hypothèse MEP a été reprise par la suite [O'Brien and Stephens, 1995, Pujol and Llebot, 2000b, Pujol and Llebot, 2000a]. Elle a été utilisée pour représenter le mélange d'énergie turbulent pour la convection [Ozawa and Ohmura, 1997, Pascale et al., 2012, Herbert et al., 2013], pour étudier les climats passés [Herbert et al., 2011b] et les phénomènes de rétroactions [Gerard et al., 1990, Herbert et al., 2011a]. Bien qu'une grande partie des modèles portent sur l'océan et l'atmosphère, il y a aussi des modèles qui utilisent l'hypothèse MEP pour représenter les flux d'évapotranspiration [Wang et al., 2007, Wang and Bras, 2011, Alves et al., 2019] ou d'autres composantes du système climatique [Kleidon, 2009]. Quelques remarques/critiques peuvent être faites sur ces modèles :

1. En tant qu'EBM, ils ne tiennent pas compte de phénomènes dynamiques importants. En particulier, on ne considère pas la rotation de la Terre, la compressibilité ou la viscosité. Plus précisément, seul le forçage est vraiment modélisé. En fait, on oublie la nature de l'énergie interne et des flux associés. On ne sépare pas la contribution des différents termes d'énergie (sensible, latent, potentiel). Pourtant, cette description est présente dans les EBMs classiques. Seule la convergence des flux est optimisée et on perd la direction et la localité des flux d'énergie interne.
2. Maximiser la production d'entropie d'un système hors équilibre pourrait sembler être une extension naturelle de la maximisation de l'entropie utilisée pour trouver l'état d'un système à équilibre. Cependant, il n'existe pas de justification bien admise pour maximiser la production d'entropie. S'il s'agit d'une approximation, son domaine de validité reste flou, bien que des conditions pour son application soient évoquées [Ozawa et al., 2003]. On note que le mélange turbulent, représenté par l'hypothèse MEP, a une dynamique rapide par rapport aux échelles de temps d'intérêt pour le climat. Cette hypothèse a été comparée à d'autres hypothèses d'optimalité comme l'hypothèse de flux maximum [Malkus and Chandrasekhar, 1954] ou celle de dissipation maximale d'énergie potentielle disponible [Lorenz, 1960]. L'absence de justification de l'hypothèse MEP a été l'objet de critiques [Rodgers, 1976, Caldeira, 2007].
3. On oublie des termes de production d'entropie, comme l'entropie de mélange ou la dissipation visqueuse, car ils sont négligeables en général. On pourrait se demander pourquoi maximiser la production d'entropie interne (2.11) et pas l'entropie d'échange, en particulier la production d'entropie radiative. De la même façon que l'expression de l'énergie est supposée connue en thermodynamique d'équilibre, le forçage extérieur (i.e. l'expression de Q) est toujours supposé connu en thermodynamique hors équilibre. Tout comme le second principe ne permet pas de déterminer l'état d'équilibre sans le premier principe (l'expression de l'énergie conservée), l'hypothèse MEP n'a aucune valeur sans la description du forçage. C'est pour cette raison que l'entropie d'échange avec le milieu extérieur n'a pas,

selon nous, de raison d'être prise en compte dans la maximisation. Ce point a été le sujet de critiques : [Essex, 1984] a par exemple fait remarquer que la production d'entropie majoritaire est celle d'origine radiative (voir aussi [Ozawa et al., 2003]). On optimise donc seulement l'entropie interne (liée à la turbulence) en fonction des flux internes obéissant à des lois inconnues, ou trop complexes pour permettre une prédiction. Le forçage extérieur (i.e. les conditions aux limites) doit être représenté de façon "classique".

4. Pourquoi maximiser l'entropie globale et non pas l'entropie locale ? Premièrement, beaucoup de lois physiques sous leurs formes locales peuvent être dérivées en cherchant des optimums de fonctionnelles (i.e. des fonctions intégrées en temps et en espace) : c'est ce que l'on appelle un principe variationnel [Basdevant, 2010]. Deuxièmement, on a une séparation d'échelle entre les temps de propagation de la lumière et de mélange turbulent d'une part, et le temps de variation du forçage radiatif d'autre part. Cela implique que, aux échelles de temps climatiques, le forçage radiatif et la convection (et donc la production d'entropie associée) sont non-locaux. Maximiser la production d'entropie de façon globale n'aide pas à donner un sens clair à l'hypothèse MEP. On a plus souvent l'habitude des hypothèses physiques sous forme locales, or dans les modèles de climat basés sur l'hypothèse MEP, on ne donne pas de telle relation.
5. En prenant la forme d'un problème d'optimisation global, l'hypothèse MEP est une relation de fermeture non-locale et sans paramètre ajustable. Du point de vue pratique cela présente des avantages et des inconvénients. Par exemple, un principe variationnel ne permet pas un découpage naturel des composantes du système climatique, et donc une répartition du travail au sein des modélisateurs.

L'utilisation de l'hypothèse MEP est souvent motivée par la volonté de réduire la calibration de paramètres. Sa formulation, et le fait que l'hypothèse ne fasse pas intervenir de paramètre peut porter à confusion en laissant croire qu'elle est utilisée comme un principe physique (au même titre que la conservation de l'énergie par exemple). Cette confusion pousse à la critique, dont les deux exemples intéressants suivants :

"However, every adjustable parameter in every model I have ever created was adjustable only because of my ignorance of the real world and not because of any fundamental adjustability in the world. I believe the partitioning of the world into constraint and adjustable parameter to be a product of our minds and not a property of the world itself. "Adjustable parameter" is a way of saying that we are uncertain what value to apply to that parameter. Were we given as complete a description of the universe as possible, I think we would find the parameter to be highly constrained. If all is constraint and nothing is adjustable parameter, then the universe trivially maximizes and minimizes everything simultaneously "to the extent possible." Indeed, I suspect the universe is all constraint and no adjustable parameter, in which case the maximum entropy principle may be true, but trivially so." [Caldeira, 2007].

"If MEP is a correct thermodynamic principle the crux of a useful application is to identify and incorporate in a calculation the constraints appropriate to the problem. The more constraints that are applied, the smaller becomes the parameter space containing the solution and, for practical purposes, the solution may be achieved without invoking MEP at all. The choice of which, and how many, constraints to apply is a subtle one. I conclude that there is little evidence in support of unconstrained MEP for calculating climate states of Earth and the other planets. MEP may be helpful as a replacement for scaling arguments in order-of-magnitude planetary discussions. It may be useful for treating individual climate processes, such as small-scale turbulence, but experience with laboratory flows suggests that this may be very difficult. It is possible that

MEP could be used in a diagnostic mode, for example, to choose between alternate, independent climate projections." [Goody, 2007].

En fait, les modèles MEP introduisent des contraintes sur la dynamique (forme du forçage, nature des flux d'énergie, ...) en parallèle de l'hypothèse MEP pour obtenir des solutions plus réalistes. Les cas les plus extrêmes étant les modèles qui ont la même structure que les modèles classiques et qui fixent certains paramètres avec l'hypothèse MEP [Jupp and Cox, 2010, Wyant et al., 1988, Pujol and Fort, 2002, Pujol, 2003, Kleidon et al., 2003, Kleidon et al., 2006]. Cette hypothèse peut donc être vue comme un moyen de fixer les degrés de liberté (souvent liés à la turbulence) sans introduire de paramètre. Cela suppose que ces degrés de liberté sont de moindre importance dans l'étude du problème. Les modèles basés sur l'hypothèse MEP peuvent potentiellement être utilisés dans des cas où la calibration de certains paramètres est impossible³ [Gerard et al., 1990, Lorenz et al., 2001, Herbert et al., 2011b].

Un modèle MEP est séparé en trois composantes : la physique (la conservation de l'énergie), les paramétrisations classiques pour les paramètres que l'on sait ajuster (typiquement le forçage radiatif, l'accélération de pesanteur, la capacité calorifique d'un gaz, ...), et la composante optimisée par MEP qui sert à représenter les processus pour lesquels les paramétrisations usuelles posent encore problème (en particulier la turbulence).

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés à deux améliorations des modèles MEP :

1. Avoir une description plus précise du mélange d'énergie. D'un point de vue thermodynamique, il faut tenir compte des différentes formes d'énergie à considérer (énergie sensible, énergie latente, énergie potentielle) et décrire les flux d'énergie. En l'occurrence, la majorité des flux d'énergie atmosphérique est assurée par la convection. Ce point est l'objet du chapitre 3.
2. L'hypothèse MEP est jusqu'ici employée pour des problèmes stationnaires. Cependant, il serait intéressant d'essayer d'étendre la formulation de l'hypothèse aux problèmes dépendants du temps. C'est l'objet du chapitre 4.

2.5 L'hypothèse de maximisation de production d'entropie du point de vue de la physique statistique

Une question importante est celle de l'interprétation de l'hypothèse MEP du point de vue de la Physique Statistique. Elle n'est pas traitée dans de cette thèse, mais peut faire l'objet de recherches ultérieures. D'une façon très large, la Physique Statistique représente l'utilisation des probabilités pour modéliser des systèmes physiques. Elle permet de donner une définition claire à l'entropie, et de ses dérivées (température, pression, potentiel chimique). Comme tout modèle probabiliste, les interprétations dépendent du point de vue que l'on adopte sur les probabilités : le point de vue objectif (ou fréquentiste) ou le point de vue subjectif (ou Bayésien). Dans les deux cas, une probabilité est introduite à cause de notre incapacité à prédire l'évolution d'un système de façon déterministe.

Le point de vue objectif consiste à voir une probabilité comme une fréquence $p(x)$, mesurée quand

3. Par exemple, il n'est pas impossible que les valeurs des paramètres de type viscosité turbulente soient différentes pour le climat actuel et pour les climats passés.

on répète la même expérience :

$$p(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_x}{N}, \quad (2.19)$$

où N_x est le nombre d'occurrence de l'événement x au cours des N expériences réalisées. C'est une "vraie" probabilité dans le sens où elle doit représenter la limite exacte (si elle existe) du rapport entre N_x et N , qui est mesurable par l'expérience. Dans cette interprétation, la probabilité est un paramètre fixé, ou une variable qui évolue au cours du temps. Prenons comme exemple le marcheur aléatoire 1D qui a une probabilité p_+ d'avancer d'un pas, p_- de reculer et $p_0 = 1 - p_+ - p_-$ de rester sur place à chaque pas de temps. On peut calculer la probabilité $p(x_*, t_*)$ d'observer le marcheur en $x_* \in \mathbb{N}$ après $t_* \in \mathbb{N}$ pas, sachant qu'il est parti en $x_* = 0$ à $t_* = 0$. Les probabilités p_- , p_+ et p_0 sont des paramètres que l'on pourrait mesurer directement, et on en déduit par dénombrement la probabilité $p(x_*, t_*)$ qui est une variable. L'entropie est une fonctionnelle de la distribution de probabilité. Elle s'écrit

$$S[p] = -k \int_{x \in \mathcal{X}} p(x) \ln p(x) dx, \quad (2.20)$$

où k est une constante sans importance ici⁴ et \mathcal{X} est l'univers (i.e. l'ensemble des issues possibles de l'expérience aléatoire). Il s'agit d'une mesure de l'incertitude sur l'état du système. Sans rentrer dans les détails, il suffit de constater que si l'on connaît exactement l'issue de l'expérience aléatoire $p(x) = \delta(x - x_0)$, l'entropie est nulle tandis que l'incertitude complète $p(x) = 1/|\mathcal{X}|$ correspond à l'entropie maximale. Dans ce contexte, la production d'entropie est une mesure de l'irréversibilité (i.e. elle quantifie le rapport entre la probabilité d'une trajectoire et la probabilité de la trajectoire opposée) qui intervient à travers les relations et théorèmes de fluctuation-dissipation (voir par exemple [Crooks, 1999, Evans and Searles, 2002] pour une discussion sur le sujet, [Ciliberto et al., 2004, Shang et al., 2005, Ciliberto et al., 2011] pour des exemples expérimentaux et [Zonta and Chibbaro, 2016] pour un exemple de simulation numérique). Le point important ici est que l'entropie et sa production sont complètement déterminées. On pourrait par exemple calculer l'entropie et la production d'entropie du marcheur aléatoire. Du point de vue objectif, la maximisation de l'entropie ou de sa production, est donc un non-sens.

Le point de vue subjectif consiste à interpréter une probabilité $p(x)$ comme un niveau de "croyance rationnelle" sur la réalisation de l'événement x , sans pouvoir l'observer directement. Dans cette interprétation, la probabilité est une grandeur indéterminée, dont l'évolution n'est pas modélisée explicitement. Reprenons l'exemple du marcheur aléatoire. Si la seule information dont on dispose est le fait que le marcheur fait un pas en avant ou un pas en arrière, ou qu'il reste sur place à chaque pas de temps, p_+ , p_- et p_0 ne sont pas des paramètres que l'on peut calibrer. Dans ce cas, comment essayer de prédire $p(x_*, t_*)$ sur la base des informations que l'on a ? Ici, le choix le plus naturel correspond au principe d'équiprobabilité (ou d'indécision) : toutes les possibilités sont équiprobables ce qui mène à $p_+ = p_- = p_0 = 1/3$. Mais comment généraliser ce principe d'indécision à des cas plus complexes ? C'est justement ce que permet de faire la maximisation de l'entropie.

L'entropie a été redécouverte en théorie de l'information [Shannon, 1948]. Elle a la même expression que dans point de vue objectif des probabilités :

$$S[p] = -k \int_{x \in \mathcal{X}} p(x) \ln p(x) dx, \quad (2.21)$$

4. En théorie cinétique des gaz, il s'agit de la constante de Boltzmann

Dans ce contexte, elle représente le manque d'information moyen (i.e. l'incertitude), associé à une distribution de probabilité. Un moyen de représenter le principe d'indécision est alors de maximiser l'entropie en imposant des contraintes, qui représentent l'information que l'on a sur le système. Ce raisonnement correspond à l'hypothèse d'équiprobabilité des micro-états (hypothèse fondamentale de la physique statistique). Le lien entre le point de vue subjectif des probabilités, la théorie de l'information et la physique statistique d'équilibre a été faite ultérieurement par [Jaynes, 1957]. Bien que plus formelle, la maximisation de l'entropie est empirique, comme la maximisation de l'entropie thermodynamique : aucun principe physique ne permet de justifier l'hypothèse d'équiprobabilité des micro-états de façon générale.

Le principe de maximisation d'entropie peut être assez naturellement étendue à la Physique Statistique hors équilibre. Étant donné que la description de la dynamique est nécessaire à l'étude d'un système hors équilibre, on considère une distribution de probabilité sur l'ensemble des trajectoires possibles du système (et non uniquement l'ensemble des états). On note $p(\gamma)$ la probabilité (subjective) de la trajectoire γ . L'entropie associée à cette distribution est

$$S[p](t) = \int_{\gamma \in \Gamma_{[0:t]}} p(\gamma) \ln p(\gamma) \mathcal{D}\gamma \quad (2.22)$$

où $\Gamma_{[0:t]}$ est l'ensemble des trajectoires possibles dans l'intervalle de temps $[0, t]$. La variable d'intégration est la trajectoire γ : l'entropie est donc une intégrale de chemin. On peut donc théoriquement utiliser la maximisation de l'entropie en tenant compte de contraintes comme en physique statistique d'équilibre. Cette approche a d'abord été développée pour des chaînes de Markov discrètes [Filyukov and Karpov, 1967], puis suggérer de façon plus générale par [Jaynes, 1985]. Par la suite, des liens ont été établis entre cette entropie et l'entropie de Kolmogorov-Sinai [Gaspard, 2004]. Ces idées ont été reprises par exemple dans [Burda et al., 2009, Monthus, 2011, Pressé et al., 2013, Mihelich et al., 2015, Mihelich et al., 2017, Dixit et al., 2018]. Les tentatives de justification de l'hypothèse de maximisation de production d'entropie utilisée dans les modèles de climat reposent sur cette approche (voir [Dewar, 2003, Dewar, 2005, Dewar, 2009] et les objections de [Grinstein and Linsker, 2007, Bruers, 2007]).

Chapitre 3

Représentation simplifiée de la dynamique dans un modèle MEP : cas de la convection atmosphérique

3.1 Le problème

Comme expliqué au chapitre précédent, les modèles se basant sur l'hypothèse MEP optimisent la production d'entropie par rapport au champ de température :

$$\max_T \left\{ \sigma = - \int_V \frac{Q[T]}{T} \, d\mathbf{r} \quad \left| \quad \mathcal{C} = \int_V Q[T] \, d\mathbf{r} = 0 \right. \right\} \quad (3.1)$$

Dans cette formulation, il n'y a pas de distinction entre les différentes formes d'énergie. Classiquement, le second postulat prend une forme locale (i.e. la production d'entropie locale est positive) pour représenter le fait que certains processus, comme les flux diffusifs, sont irréversibles [Kondepudi and Prigogine, 1998]. Ici, rien interdit de calculer une production d'entropie localement négative (comme un flux du froid vers le chaud). Calculer une production d'entropie locale négative avec l'hypothèse MEP peut donc sembler être en contradiction avec la thermodynamique hors-équilibre usuelle. Cependant, il est important de noter que l'hypothèse MEP est utilisée pour représenter la somme des flux convectifs et diffusifs, dont une partie peut-être réversible : la production d'entropie n'a pas la même expression que dans la théorie usuelle. Il n'y a donc pas nécessairement de contradiction à calculer une production d'entropie locale négative avec l'hypothèse MEP, et cette contrainte n'a pas de raison d'être prise en compte. Néanmoins, il paraît important de représenter plus précisément les processus mécaniques à l'origine des flux d'énergie. Il est possible que la solution représente des flux d'énergie non-locaux (i.e. directement d'une région vers une autre région éloignée). Cette non-localité peut être un moyen de représenter la convection rapide de masse d'air avant leur mélange dans une zone éloignée (par exemple pour représenter la convection profonde), mais c'est ici représenté de façon non contrôlée.

Malgré ces problèmes, les modèles basés sur l'hypothèse MEP donnent des résultats corrects pour le calcul du flux d'énergie horizontal [Pujol and Llebot, 2000b, Herbert et al., 2011b]. En

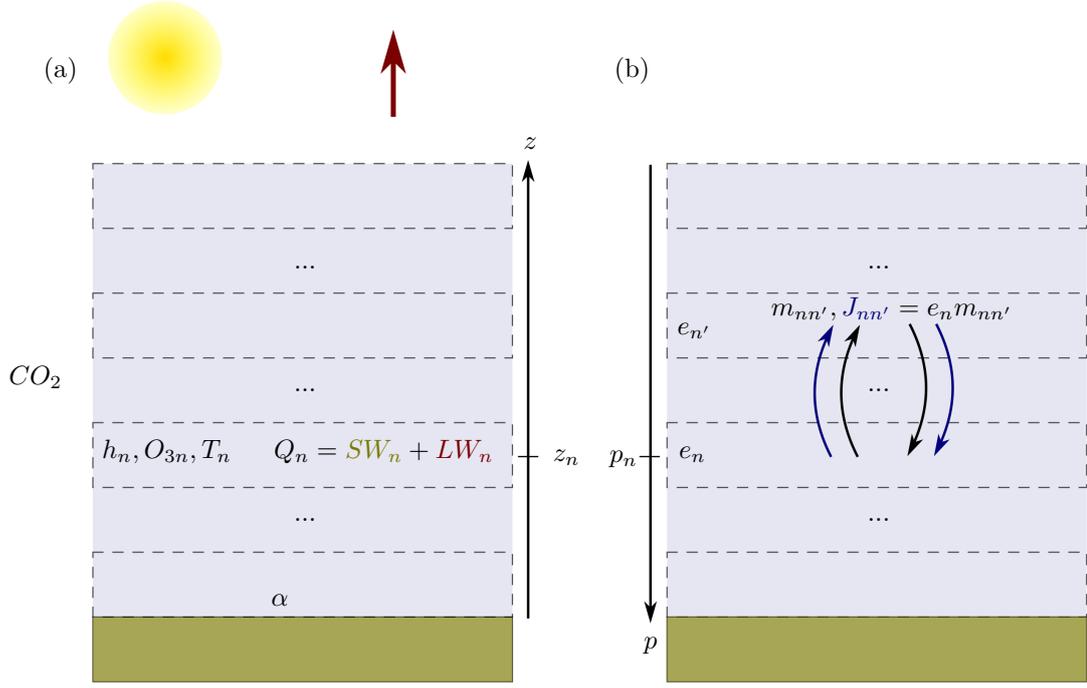


FIGURE 3.1 – Illustration de notre modèle. (a) Description du modèle radiatif : la couche n est à la température T_n , à l’altitude moyenne z_n (pression p_n) et à l’humidité h_n . Q_n est le bilan radiatif net dans la couche n . Il correspond à la somme du bilan radiatif net dans le visible SW et du bilan radiatif net dans l’infrarouge LW . Le sol est représenté par la couche $n = 0$ avec un albédo de surface α . (b) Description du modèle convectif : la couche n a une énergie spécifique $e_n = C_p T_n + gz_n + Lh_n$. $m_{nn'}$ est le flux de masse qui va de la couche n vers la couche n' . Le flux convectif d’énergie associé est $J_{nn'} = e_n m_{nn'}$.

revanche, ces modèles ne parviennent pas à prédire des profils de température et de flux d’énergie réalistes sur la verticale [Ozawa and Ohmura, 1997, Herbert et al., 2013]. Le flux d’énergie (du sol vers le haut de l’atmosphère) est surestimé, le gradient de température est par conséquent sous-estimé, et on ne parvient pas à retrouver la structure classique de l’atmosphère : surface, couche mélangée, et stratosphère¹. Il paraît donc important de construire un modèle qui représente plus explicitement le transport d’énergie.

3.2 Le modèle

La structure verticale de l’atmosphère

L’atmosphère, supposée être un gaz parfait à l’équilibre hydrostatique, est divisée en N couches. La surface est représentée par la couche inférieure. On utilise les coordonnées pressions, de sorte que l’altitude z dépend du profil de température.

1. Les seules exceptions sont les modèles qui utilisent un ajustement convectif vers le gradient adiabatique sec [Pujol and Fort, 2002], ou en utilisant fixant la viscosité turbulente avec MEP [Pujol, 2003].

Le bilan radiatif : On note Q_n le bilan d'énergie radiatif net pour la couche n qui prend en compte la transmission, la réflexion et l'absorption des rayons lumineux par les gaz à effets de serre pris en compte dans le modèle. On décompose :

$$Q_n = SW_n + LW_n$$

où SW_n est le bilan d'énergie radiative dans le visible et LW_n est le bilan d'énergie radiative dans l'infrarouge. On utilise le modèle développé par [Herbert et al., 2013] pour calculer le bilan radiatif. Il présente l'avantage de bien représenter les propriétés d'absorption des principaux gaz à effet de serre, en restant une fonction dérivable du profil de température (ce qui est important pour la résolution d'un problème d'optimisation). Le modèle est basé sur le Net Exchange Formalism [Dufresne et al., 2005], où les variables de base sont les taux d'échanges nets entre chaque paire de couches. Dans l'infrarouge, le modèle décompose le spectre en 22 bandes. Dans chacune de ces bandes, il prend en compte l'absorption par la vapeur d'eau et le CO_2 . Le coefficient d'absorption est calculé à partir du modèle statistique de [Goody, 1952] avec les données extraites de [Rodgers and Walshaw, 1966]. Pour l'intégration spatiale, il utilise l'approximation diffusivité avec la valeur standard du facteur de diffusion $\mu = 1/1.66$. Hormis les données relatives aux propriétés d'absorption, les entrées de la partie infrarouge du modèle sont les profils d'humidité et de température, ainsi que la concentration en CO_2 . On peut fixer l'humidité absolue, ou l'humidité relative. Dans le visible, le modèle tient compte de l'absorption de la vapeur d'eau et de l'ozone en adaptant la paramétrisation de [Lacis and Hansen, 1974]. Les entrées de la partie visible du modèle sont les profils d'humidité et d'ozone, ainsi que l'albédo de surface et la constante solaire. Les nuages ne sont pas représentés. Le bilan radiatif net pour la couche atmosphérique n est obtenue en sommant tous les termes qui font intervenir cette couche. On a donc

$$Q_n(T, h, O_3, CO_2, \alpha) = SW_n(h, O_3, \alpha) + LW_n(T, h, CO_2). \quad (3.2)$$

Dans cette équation et dans la suite T , h et O_3 font référence aux profils de température, d'humidité et d'ozone (i.e $T = \{T_n, n = 0, \dots, N\}$ etc). Les profils de vapeur d'eau et d'ozone sont fixés par les observations de [A. McClatchey et al., 1972]. La concentration en CO_2 et l'albédo de surface α sont des constantes fixées. Ainsi, la seule variable restante dans le bilan radiatif est le profil de température (figure 3.1 (a)).

Le bilan convectif : L'énergie spécifique (i.e. par unité de masse) dans la couche n , d'altitude moyenne z_n , de température T_n et d'humidité h_n (ratio entre la masse de vapeur d'eau et la masse totale d'air pour un volume fixe) est l'énergie statique humide

$$e_n = C_p T_n + g z_n + L h_n, \quad (3.3)$$

où $C_p = 1005 \text{ J.kg}^{-1}.K^{-1}$ est la capacité calorifique de l'air, $g = 9.81 \text{ m.s}^{-2}$ est l'accélération de pesanteur terrestre et $L = 2,5.10^6 \text{ J.kg}^{-1}$ est l'énergie latente de vaporisation de l'eau. Les flux d'énergie sont assurés par la convection (turbulente), la diffusion joue un rôle négligeable. En prenant les valeurs typiques de température $T \simeq 300 \text{ K}$, de variation d'altitude $\Delta z \simeq 1 \text{ km}$, d'humidité $h \simeq 0.02$ et de vitesse verticale "turbulente" $|\mathbf{u}'| \simeq 10 \text{ m.s}^{-1}$, on constate que l'énergie cinétique est négligeable par rapport aux autres formes d'énergie (moins de 0.1% de l'énergie totale) et on ne la considérera pas dans le transport d'énergie. On considère une atmosphère saturée en eau pour laquelle l'humidité est une fonction de la température et de la pression $h = h_s(p, T)$ [Bolton, 1980]. Sous l'hypothèse d'équilibre hydrostatique et de gaz parfait, on peut calculer le géopotential $g z_n$ en fonction du profil de température. L'énergie spécifique de la

couche n est alors une fonction du profil de température $e_n[T]$. On représente les flux d'énergie avec un schéma en flux de masse. Ce type de schéma est couramment utilisé pour représenter la convection verticale (voir par exemple [Suarez et al., 1983]). On note $m_{nn'} \geq 0$ le flux de masse qui va de la couche n vers la couche n' (en $kg.s^{-1}$) et $J_{nn'} = e_n m_{nn'}$ le flux convectif d'énergie associé (en $J.s^{-1}$) (figure 3.1 (b)). Un schéma de convection est caractérisé par l'ensemble des échanges d'énergie que l'on autorise. On peut le représenter par un graphe où chaque sommet correspond à une couche du modèle et chaque lien correspond à un flux $m_{nn'}$ autorisé. On peut par exemple considérer des schémas qui vérifient un bilan détaillé en masse (i.e. $m_{nn'} = m_{n'n}$). On parle alors de schéma sans advection, car il n'y a pas de flux de masse net entre les couches. Par exemple, le schéma linéaire consiste à autoriser les flux qu'entre des couches adjacentes (i.e. $m_{nn'} = 0$ si $n' \neq n \pm 1$). Ce schéma est représenté sur la figure 3.2 (a). Dans le schéma en étoile, la couche de sol ne peut échanger qu'avec la première couche atmosphérique et tous les échanges entre les couches atmosphériques sont autorisés. Ce schéma est représenté sur la figure 3.2 (b). Un schéma en étoile peut être vu comme un moyen de représenter la convection profonde, où des masses d'air ascendantes et descendantes (aussi appelée "plumes") peuvent être transportées adiabatiquement sur plusieurs couches avant d'être mélangées.

D'une façon générale, on suppose que le mélange d'énergie se fait en deux étapes : un déplacement adiabatique des parcelles d'air par convection entre les différentes couches (sans création d'entropie), puis un mélange d'énergie entre parcelles d'air par diffusion dans les couches (avec création d'entropie).

Les équations de bilan : On note M_n la masse et E_n l'énergie de la couche n . En l'absence de source de masse, les bilans de masse et d'énergie à l'état stationnaire s'écrivent :

$$\frac{dM_n}{dt} = \sum_{n'=0}^N (m_{n'n} - m_{nn'}) = 0, \quad (3.4)$$

$$\frac{dE_n}{dt} = \sum_{n'=0}^N (J_{n'n} - J_{nn'}) + Q_n[T] = 0, \quad (3.5)$$

$$J_{nn'} = m_{nn'} e_n \quad (3.6)$$

Si l'on tient compte de l'humidité (i.e. du terme Lh_s dans l'expression de l'énergie spécifique), il faut également introduire une équation de bilan d'eau. Ce n'est pas fait dans notre modèle. De plus, le bilan radiatif est calculé avec le profil d'humidité observé (et non pour une atmosphère saturée). Nous en discuterons dans les conclusions de ce chapitre.

Dans le cas d'un schéma linéaire, le bilan de masse donne simplement $m_{n(n+1)} = m_{(n+1)n} \equiv m_{n+1}$. Le flux d'énergie convectif net (orienté vers le haut) entre les couches n et $n+1$ est alors $J_{n(n+1)} - J_{(n+1)n} = m_{n+1}(e_n - e_{n+1})$. Dans ce cas, m_{n+1} apparaît comme un coefficient de mélange de masse entre couches. C'est exactement le type de paramètre introduit dans les modèles de fermeture turbulente [Mellor and Yamada, 1982]. Par exemple, pour les flux de surface, une représentation usuelle de ces flux repose sur des relations semi-empiriques appelées "aerodynamic bulk formula". Elles reposent sur une analyse dimensionnelle de la couche limite atmosphérique [Monin and Obukhov, 1954]. Ces relations relient les flux d'énergie sensible et d'énergie latente entre le sol et l'atmosphère en faisant intervenir la vitesse de vent au sol, les différences de température et d'humidité et des paramètres appelés coefficients de transferts. Plus précisément, les flux d'énergie sensible et d'énergie latente s'écrivent respectivement [Friehe and Schmitt, 1976] :

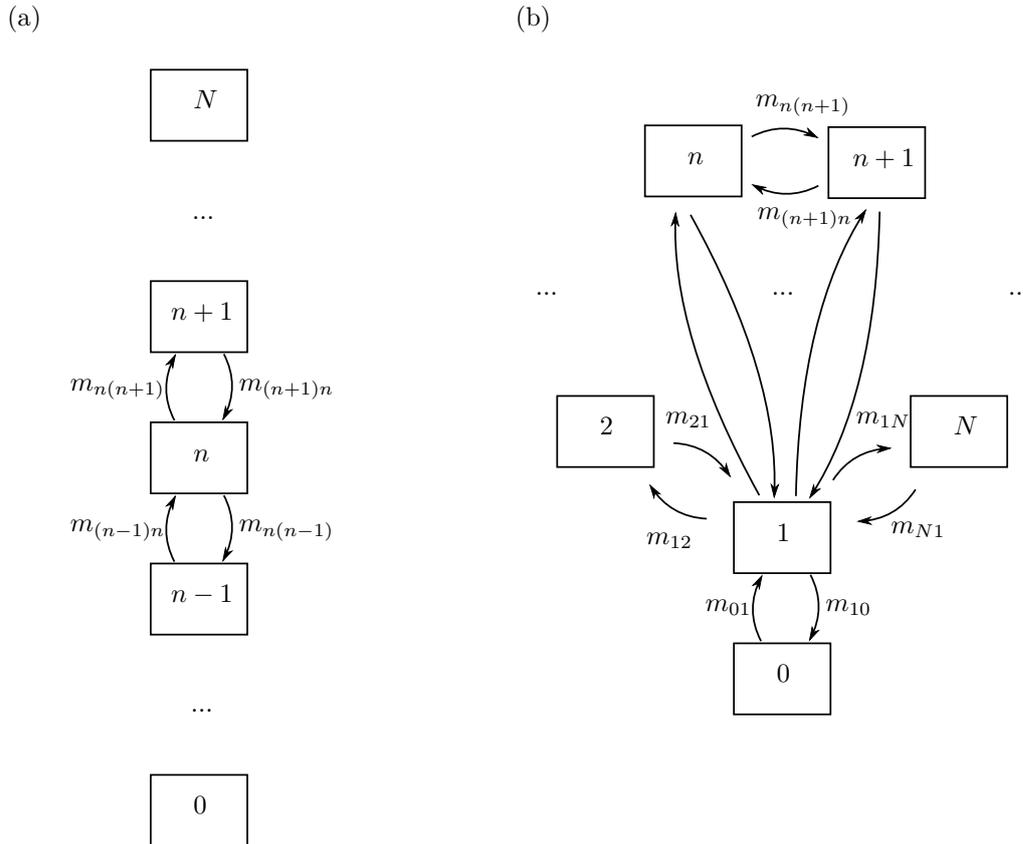


FIGURE 3.2 – Illustrations de deux schémas de convection possibles. (a) Schéma linéaire. (b) Schéma en étoile. Dans l'illustration du schéma en étoile, les positions des sommets ne correspondent pas aux positions des couches associées et tous les liens ne sont pas représentés pour ne pas alourdir la figure.

$$J_T = \rho C_p C_T \bar{U} (\bar{T}_s - \bar{T}_a), \quad (3.7)$$

$$J_L = \rho L C_L \bar{U} (\bar{h}_s - \bar{h}_a) \quad (3.8)$$

où ρ est la masse volumique de l'air, \bar{U} est la vitesse moyenne à une altitude de référence z_{ref} , \bar{T}_s est la température de surface moyenne, \bar{T}_a est la température à l'altitude de référence, \bar{h}_s est l'humidité de surface, \bar{h}_a est l'humidité à l'altitude de référence et C_T, C_L sont les coefficients de transferts. Le domaine d'application ainsi que l'estimation des coefficients de transferts à partir des mesures a été le sujet de nombreuses études [Large and Pond, 1981, Large and Pond, 1982, DeCosmo et al., 1996, Fairall et al., 1996]. Les avantages et les problèmes soulevés par les "aerodynamic formulas" sont les mêmes que pour les fermetures turbulentes. On complexifie parfois ces formules en représentant la variation des coefficients de transferts avec la stabilité de l'atmosphère en utilisant des formules conditionnelles [Louis, 1979] ou en allant au-delà de la régression linéaire pour approximer les données expérimentales sur une gamme plus large de conditions [Kara et al., 2000]. Ici, les coefficients de transferts et la diffusivité turbulente sont des variables indéterminées du modèle et sont optimisés par MEP. Plus précisément, dans le cas du schéma linéaire, le rapprochement entre notre modèle et les équations (3.7) donne $m_1 = \rho C_T \bar{U} S = \rho C_h \bar{U} S$ où S est la surface de la section horizontale des couches.

Le problème MEP

Le problème d'optimisation MEP s'écrit :

$$\max_{\{T, e, m, J\}} \left\{ \sigma_I = \sum_{n=1}^N \frac{\sum_{n'=1}^N (J_{n'n} - J_{nn'})}{T_n} \left| \begin{array}{l} \sum_{n'=1}^N (m_{n'n} - m_{nn'}) = 0 \quad \text{avec} \quad m_{nn'} \geq 0, \\ \sum_{n'=1}^N (J_{n'n} - J_{nn'}) + Q_n[T] = 0, \\ e_n = e_n[T] \quad \text{et} \quad J_{nn'} = m_{nn'} e_n. \end{array} \right. \right\} \quad (3.9)$$

La description du mélange d'énergie introduit des contraintes d'égalité supplémentaires : le bilan de masse, l'expression de l'énergie spécifique, et l'expression du flux d'énergie, et des contraintes d'inégalités : la positivité des flux de masse. Le problème est composé de

- $2(N+1) + 2(N+1)^2$ variables d'optimisation (T, e, m , et J) si l'on considère un schéma de convection complètement connecté (i.e. toutes les couches peuvent échanger entre elles) ;
- $3(N+1) + (N+1)^2$ contraintes d'égalités (bilan de masse, bilan d'énergie, expression de l'énergie spécifique et expression des flux d'énergie) ;
- $(N+1)^2$ contraintes d'inégalités (positivité des flux de masse).

Du point de vue mathématique, ce problème est un problème d'optimisation différentielle². Il n'existe pas, à notre connaissance, de méthode de résolution générale pour ce type de problème et on utilise la méthode de résolution numérique décrite en annexe B. Nous nous sommes focalisé sur la résolution et l'analyse du schéma de convection linéaire. Cette étude a fait l'objet d'un article publié dans le journal Earth System Dynamics.

². On suppose que le bilan radiatif et l'énergie spécifique sont des fonctions différentiables des variables d'optimisation.

3.3 Article



A radiative-convective model based on constrained maximum entropy production

Vincent Labarre^{1,2}, Didier Paillard¹, and Bérengère Dubrulle²

¹Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement, UMR 8212 CEA-CNRS-UVSQ, IPSL and Université Paris-Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

²SPEC, CEA, CNRS, Université Paris-Saclay, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

Correspondence: Vincent Labarre (vincent.labarre@lsce.ipsl.fr) and Didier Paillard (didier.paillard@lsce.ipsl.fr)

Received: 14 September 2018 – Discussion started: 27 September 2018

Revised: 6 June 2019 – Accepted: 17 June 2019 – Published: 9 July 2019

Abstract. The representation of atmospheric convection induced by radiative forcing is a long-standing question mainly because turbulence plays a key role in the transport of energy as sensible heat, geopotential, and latent heat. Recent works have tried using the maximum entropy production (MEP) conjecture as a closure hypothesis in 1-D simple climate models to compute implicitly temperatures and the vertical energy flux. However, these models fail to reproduce realistic profiles. To solve the problem, we describe the energy fluxes as a product of a positive mass mixing coefficient with the corresponding energy gradient. This appears as a constraint which imposes the direction and/or limits the amplitude of the energy fluxes. It leads to a different MEP steady state which naturally depends on the considered energy terms in the model. Accounting for this additional constraint improves the results. Temperature and energy flux are closer to observations, and we reproduce stratification when we consider the geopotential. Variations in the atmospheric composition, such as a doubling of the carbon dioxide concentration, are also investigated.

1 Introduction

The climate system is complex and usually divided into different components: atmosphere, ocean, cryosphere, lithosphere, and biosphere (Peixoto and Oort, 1992). There are different approaches to climate modelling (Randall et al., 2007). We can classify them in three main classes. Global climate models (GCMs) are the more sophisticated ones (see Dufresne et al., 2013, for an example). They explicitly represent the circulation of the atmosphere and ocean. Earth models of intermediate complexity (EMICs) simulate the Earth system with more simplifications than GCMs (see Goosse et al., 2010, for an example). These simplifications allow simulations over larger time periods, which is useful to study past climates. Simple climate models (SCMs) use only a few key processes to answer specific questions (see Paillard, 1998, for an example).

Both the complex and simple models have different strengths and weaknesses and are used for different applica-

tions. For example, GCMs are largely used to make climate projections for the next century. Since the numerical resolution of dynamical equations from the micro-scale (of the order $\simeq 10^{-3}$ m for viscous dissipation) to the scale of interest ($\simeq 10^7$ m for the typical size of the Earth) is still impossible, GCMs need to represent sub-grid processes such as small eddies, convection, or cloud formation. To do it, models usually express the intensity of fluxes due to unresolved phenomena as a function of the resolved variables. This approach is called a “turbulent closure” and usually requires the introduction of empirical parameters such as turbulent master length scale, turbulent velocity diffusion terms (Mellor and Yamada, 1982), or the use of different quantities like convective available potential energy (CAPE) or convective inhibition (CIN) to fix the convective intensity (Yano et al., 2013). These parameterizations change from one model to another, resulting in different predictions (Stevens and Bony, 2013). They also require adjusting the numerous free parameters (“tuning”) in

order to track observations (Hourdin et al., 2017). SCMs appear as an interesting alternative when considering past or future climate over a larger period like glacial–interglacial cycles. Indeed, an SCM is a set of a reasonable number of equations and physical quantities, providing an easier assessment of the impact of the parameters of the models (such as the concentration of greenhouse gases for atmospheric models). Many SCMs are based on the idea that the computation of all the microscopic details may be unnecessary if we are interested in quantities at larger spatio-temporal scales.

Consequently, a lot of SCMs describe the Earth simply with energetic considerations (North et al., 1981). Those models are called energy balance models (EBMs). The atmosphere is mainly driven by radiative forcing: solar radiation imparts energy to the Earth, which emits infra-red radiation to space. This heating is not homogeneous around the globe for different reasons such as geometry or variations in albedo with the nature of the ground. The insolation is more important for the tropics than the poles and leads to latitudinal heat transport. For the vertical axis, the amount of radiative energy absorbed by the Earth naturally depends on the atmospheric components. The ground usually receives more solar radiation because of the relative transparency of the atmosphere. As a result, the atmosphere is heated from below, which may lead to unstable situations where the temperature gradient exceeds the adiabatic gradient. Then, this causes atmospheric motion and vertical heat transport named convection. Since EBMs are usually based only on the energy budget, it is necessary to specify a relation between the energy fluxes and the temperature gradient, called a closure hypothesis. So EBMs mainly differ by the representation of the fluxes between the fluid layers of the Earth (atmosphere and ocean). For example, horizontal fluxes are sometimes represented by purely diffusion terms (North et al., 1981). On the other hand, vertical energy transport has been modelled using different approaches such as the convective adjustment. The latter consists of computing the temperature profile at radiative equilibrium for stable regions and adjusting it where the critical gradient is exceeded (Manabe and Strickler, 1964). Representing both the horizontal and the vertical energy fluxes is an important issue for EBMs. This concerns the subject of the present paper.

Since the 70s (Paltridge, 1975), maximum entropy production (MEP; Martyushev and Seleznev, 2006) is also used as a closure hypothesis in EBMs. This conjecture stipulates that the climatic system (or one of its component) optimizes its entropy production due to internal heat transfers. It allows for computing implicitly (i.e. without the computation of the dynamics) horizontal fluxes (O'Brien and Stephens, 1995; Lorenz et al., 2001) and vertical fluxes (Ozawa and Ohmura, 1997; Pujol and Fort, 2002) without the parameterizations required in more conventional models. Former MEP-based models (MEPMs) have been criticized for three main reasons. One is the absence of dynamics and the validity of MEP (Rodgers, 1976). The second criticism deals

with the extra parameterizations or the assumptions used in MEPMs. Indeed, one may ask oneself if the successes of the models are really due to the MEP hypothesis or to tuning or other ingredients (Goody, 2007). The final criticism concerns the usually simplified description of the radiative forcing in these models. Recently, a MEPM overcoming the last two criticisms has been built in Herbert (2012). It includes a refined description of the radiative budget in the net exchange formalism, without extra assumptions. The only adjustable quantities concern the radiative budget, such as the albedo, and not the atmospheric or oceanic energy transport. The model provides a relatively good approximation for the temperature and horizontal heat fluxes (Herbert et al., 2011b).

However, the vertical energy fluxes are still overestimated in such models when compared to observations or conventional radiative-convective models (RCMs) like Manabe and Strickler (1964). Furthermore, the energy fluxes are not always oriented against the energy gradient and it does not predict stratification in the upper atmosphere. This is not surprising because geopotential was not taken into account. Yet, we know from fluid mechanics that gravity plays a major role in natural convection (Rieutord, 2015). Gravity is also obviously responsible for stratification in the upper atmosphere. In this paper, we develop a MEPM that describes more properly the atmospheric convection. In the same spirit as the previous SCMs, we do not attempt to resolve the dynamical equations, but we add only some key features. Two ingredients are introduced to represent vertical heat fluxes more correctly. The first one is to describe energy transport as the product of a non-homogeneous mixing mass coefficient and the specific energy gradient. This brings a new constraint into a MEPM. The second one is to consider different energy terms: sensible heat, geopotential, and latent heat. We show that this simplified description of the energy transport, combined with the MEP closure hypothesis, can lead to relatively realistic results.

The outline of this paper is as follows. In the first part we describe our model, presenting the transport of heat by mixing. The formulation of the constrained MEP optimization problem is given (Sect. 2). Then, we compute the temperature, the specific energy, and the energy flux profiles. We give a physical interpretation of the effect of the constraint emerging from the positivity of the mass mixing coefficient. The impact of different expressions for energy is discussed (Sect. 3). A sensitivity test for the concentrations of O₃ and CO₂ is also performed. Finally, we discuss further works and objectives (Sect. 4). The computation of the geopotential is given in Appendix A and the resolution of the optimization problem is described in Appendix B.

2 Model

2.1 Vertical structure of the atmosphere

The atmosphere is divided into a column of N vertical layers. We work with prescribed pressure levels, so the elevation z depends on the temperature profile (see Appendix A). The CO_2 , O_3 , and water vapour profiles are fixed according to observations by McClatchey et al. (1972) and the ground is represented by a layer with a fixed surface albedo α . The atmosphere is supposed to be in hydrostatic equilibrium and is considered an ideal gas. The specific energy (energy per unit mass) in layer i – of mean elevation z_i , temperature T_i , and mixing ratio q_i (ratio between the mass of water vapour and total mass of the air for a given volume) – is the so-called moist static energy,

$$e_i = C_p T_i + g z_i + L q_i, \quad (1)$$

where $C_p = 1005 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ is the heat capacity of the air, $g = 9.81 \text{ m s}^{-2}$ is the terrestrial acceleration due to gravity, and $L = 2.5 \times 10^6 \text{ J kg}^{-1}$ is the latent heat of vaporization.

We note \mathcal{R}_i , the net radiative energy input in layer i , by taking into account several effects: shortwave radiation, longwave radiation, reflection, and reabsorption. More explicitly,

$$\mathcal{R}_i = \text{SW}_i + \text{LW}_i = \text{SW}_{i\downarrow} - \text{SW}_{i\uparrow} + \text{LW}_{i\downarrow} - \text{LW}_{i\uparrow},$$

where $\text{SW}_{i\downarrow}$ is the downward radiative energy flux for short waves, $\text{SW}_{i\uparrow}$ is the upward radiative energy flux for short waves, $\text{LW}_{i\downarrow}$ is the downward radiative energy flux for long waves, and $\text{LW}_{i\uparrow}$ is the upward radiative energy flux for long waves.

We use the code developed in Herbert et al. (2013) to compute the radiative budget. This model was developed to give a realistic description of the absorption properties of the more radiatively active constituents of the atmosphere while keeping a smooth dependence of the radiative flux with respect to the temperature profile. As suggested by the authors, this last requirement is important in the framework of a variational problem. The model is based on net exchange formalism (Dufresne et al., 2005), where the basic variables are the net exchange rates between each pair of layers instead of radiative fluxes.

In the longwave domain, the code decomposes the spectrum into 22 narrow bands and, in each band, it accounts for absorption by water vapour and carbon dioxide only. The absorption coefficient is computed using the statistical model of Goody (1952) with the data from Rodgers and Walshaw (1966). For the spatial integration, the diffusive approximation is performed with the standard diffusion factor $\mu = 1/1.66$. Apart from the absorption data, given once and for all, the inputs of the model are the water vapour density, temperature profile, and carbon dioxide concentration. One may fix either absolute or relative humidity. In the shortwave

domain, absorption by water vapour and ozone is accounted for by adapting the parameterization from Lacis and Hansen (1974). The input parameters for the model are the water vapour density and ozone density profiles, as well as surface albedo and solar constant. Clouds are not considered in the model. More details can be found in Herbert et al. (2013) and its supplementary material. The net radiative budget for the atmospheric layer i , \mathcal{R}_i , is given by summing over all terms involving the layer in question. In particular, \mathcal{R}_i is a function of all temperatures $\{T_j\}_{j=0,\dots,N}$ in the profile. Then,

$$\mathcal{R}_i(T, q, \text{O}_3, \text{CO}_2, \alpha) = \text{SW}_i(q, \text{O}_3, \alpha) + \text{LW}_i(T, q, \text{CO}_2). \quad (2)$$

In the previous equation, and in the following, T , q , O_3 , and CO_2 will refer to complete profiles (i.e. $T = \{T_i\}_{i=0,\dots,N}$). Given that q (or $h = q/q_s(T)$ fixed relative humidity), O_3 , CO_2 , and α are fixed in our model, we will only indicate the T dependence.

The vertical energy flux is represented by mixing between adjacent layers. Then, the net upward energy flux between layers i and $i - 1$ writes as

$$F_i = m_i (e_{i-1} - e_i), \quad (3)$$

where m_i is a mixing coefficient that represents a mass per unit time and per unit surface. It is not (necessarily) homogeneous in all the column. We notice that m_i is typically the kind of coefficient that requires, at some point, a parameterization in usual climate models. Here m is obtained from the MEP procedure.

Taking into account the net radiative energy budget \mathcal{R}_i , the energy balance at the stationary state for the layer i reads as

$$F_i - F_{i+1} + \mathcal{R}_i = 0. \quad (4)$$

2.2 Maximum entropy production with constraint

The principle of our model is to determine the fluxes F and temperatures T with the maximization of the entropy production. In the thermodynamics of diffusive processes, the entropy production is expressed as the sum of products of the fluxes with their associated thermodynamic forces. But we aim here at representing convection, not diffusion. We need to represent how the air parcels are mixed but only after (turbulent) convective motions. We can usefully separate this process into two steps. First, we assume a pseudo-adiabatic motion of an air parcel from one layer to another due to convection. This step is purely mechanical, without entropy production since we neglect viscous dissipation. The energy of the air parcel is conserved but its temperature and composition may change during the motion. If the air parcel was initially in layer i and goes to the layer $i + 1$, the temperature

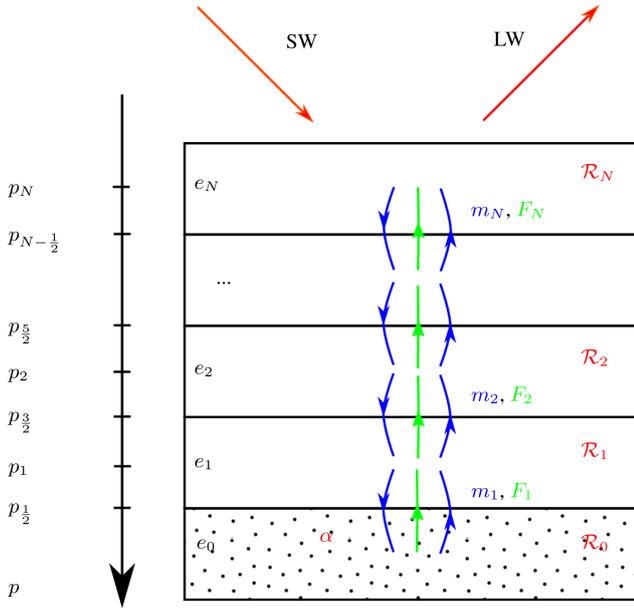


Figure 1. Discretization of an atmospheric column into N layers. The layer i – at temperature T_i , fixed pressure P_i , elevation z_i (which depends on the temperature profile), and mixing ratio q_i – has a specific energy $e_i = C_p T_i + g z_i + L q_i$; m_i is the mass mixing coefficient between layers $i - 1$ and i which leads to the net energy flux $F_i = m_i(e_{i-1} - e_i)$; \mathcal{R}_i is the net radiative energy budget in the layer i . The ground is represented by layer 0 with fixed surface albedo α .

of the air parcel becomes, by conservation of energy,

$$T'_i = T_i + \frac{1}{C_p} [g(z_i - z_{i+1}) + L(q_i - q_{i+1})]. \quad (5)$$

Here, we have assumed that the water vapour concentration changes pseudo-adiabatically during the convection and not due to the mixing. This is not fully consistent since we do not impose water conservation. Secondly, the air parcel is mixed by diffusion with the ambient air in layer $i + 1$ and transfers an amount of sensible heat per unit mass $C_p T'_i$. At the same time, air parcels leave the layer $i + 1$ for the layer i with a sensible heat per unit mass $C_p T_{i+1}$. So the net flux of sensible heat due to this process is

$$m_{i+1} C_p (T'_i - T_{i+1}) = m_{i+1} (e_i - e_{i+1}) = F_{i+1}, \quad (6)$$

where m_{i+1} is the mass mixing coefficient between layers i and $i + 1$. So the entropy production that results due to the sensible heat exchange between layers i and $i + 1$ is the product of the flux F_{i+1} with the thermodynamic force associated with the sensible heat only (i.e. the gradient of inverse temperature)

$$\sigma_{i+1} = F_{i+1} \left(\frac{1}{T_{i+1}} - \frac{1}{T_i} \right). \quad (7)$$

By summing over all layers, and using the fact that $F_{N+1} = 0$, we show that the total entropy production can be written

as

$$\sigma = \sum_{i=0}^N \frac{(F_i - F_{i+1})}{T_i}. \quad (8)$$

In thermodynamics, more terms may contribute to entropy production such as pressure-volume work, or mixing. As for other MEPMs (Kleidon, 2010), we only retain the sensible heat exchange term. The geopotential and latent heat terms appear in the entropy production only as a result of our representation of convective transport, which is supposed to occur as a mechanically induced mass transport without entropy production. We can easily express the entropy production with temperatures $\sigma(T)$ by using the energy balance in stationary state, $F_i - F_{i+1} + \mathcal{R}_i(T) = 0$. Then the problem is usually solved in terms of temperature with a global constraint of energy conservation:

$$\left\{ \max_{T_0, \dots, T_N} \left(- \sum_{i=0}^N \frac{\mathcal{R}_i(T)}{T_i} \right) \middle| \sum_{i=0}^N \mathcal{R}_i(T) = 0 \right\}. \quad (9)$$

Given the form of the energy transport (Eq. 3), we here need to have additional constraints. Namely, the mass mixing coefficients m_i must be positive. It is then natural to solve the problem of flux by expressing the entropy production $\sigma(F)$ and inequality constraints $m_i \geq 0$ with energy fluxes. Assuming that the relation $\mathcal{R}(T)$ is invertible (Appendix B), we can formally write

$$F_{i+1} - F_i = \mathcal{R}_i(T) \Leftrightarrow T_i = \mathcal{R}_i^{-1}(F). \quad (10)$$

This results in the following optimization problem with inequality constraints:

$$\left\{ \max_{F_1, \dots, F_N} \left(\sum_{i=0}^N \frac{F_i - F_{i+1}}{\mathcal{R}_i^{-1}(F)} \right) \middle| \exists m_i \geq 0 \right. \\ \left. \text{with } F_i = -m_i (e_i - e_{i-1}) \right\}. \quad (11)$$

The constraint $F_i = -m_i (e_i - e_{i-1})$ with $m_i \geq 0$ naturally depends on the specific energy e used in the model. The latter simply imposes the energy fluxes to be opposed to the energy gradient. We point out that the energy conservation is implicit in the flux formulation of the variational problem and does not need to be imposed as a constraint here.

3 Results

We have computed temperature, specific energy (energy per unit mass), and energy flux profiles for different prescribed atmospheric compositions from McClatchey et al. (1972) corresponding to the tropical, mid-latitude summer, mid-latitude winter, sub-arctic summer, and sub-arctic winter conditions. We work with a fixed relative humidity profile

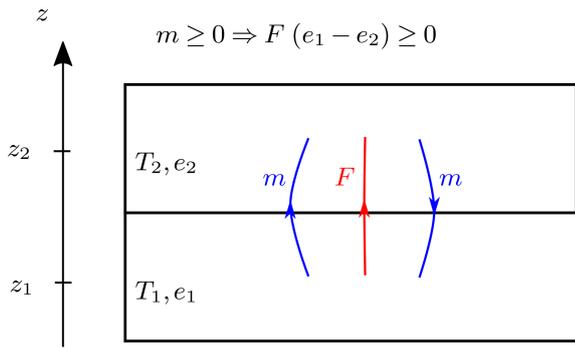


Figure 2. Energy exchanges between two layers of elevation z_1 and z_2 ($z_2 \geq z_1$), temperatures T_1 and T_2 , and specific energy e_1 and e_2 . We note $F = m (e_1 - e_2)$, the energy flux from layer 1 to layer 2, where m is the mass mixing coefficient between the two layers.

(ratio of the partial pressure of water vapour to the equilibrium vapour pressure of water at a given temperature). Typical values of surface albedo are used: $\alpha = 0.1$ for the tropical and mid-latitude conditions and $\alpha = 0.6$ for sub-arctic ones. The atmosphere is discretized in $N = 20$ vertical levels.

3.1 The effect of the constraint

We investigate the effect of the following energy terms on the constraint:

- sensible heat $C_p T$;
- geopotential gz ;
- latent heat for a water-vapour-saturated air $Lq_s(T)$, where q_s is the mixing ratio at the saturation point. Since we work in pressure coordinates, it depends only on local temperature. This is a first attempt to take into account the effect of humidity without an explicit derivation of the humidity profile and water cycle. However, the radiative budget is still computed using a fixed standard relative humidity profile.

For illustration purposes, we can consider the case with only two layers. We note $F = m (e_1 - e_2)$ the net energy flux from layer 1 to layer 2, where m is the mass mixing coefficient between layers (cf. Fig. 2). In this simple case, the entropy production is written as $\sigma = F (1/T_2 - 1/T_1)$ and is limited by the constraint $m \geq 0 \iff F (e_1 - e_2) \geq 0$. We interpret the different energy terms on this constraint as follow.

- $e = C_p T$: $F \geq 0$ if $T_1 \geq T_2$. The constraint simply imposes the energy transport from hot to cold regions.
- $e = C_p T + gz$: $F \geq 0$ if $T_1 \geq T_2 + g (z_2 - z_1)/C_p$. The geopotential gz limits the upward energy flux. We predict a warmer air at the bottom and a colder air at the top compared to the model with only sensible heat. Mechanically, we can see this as the expression of the fact

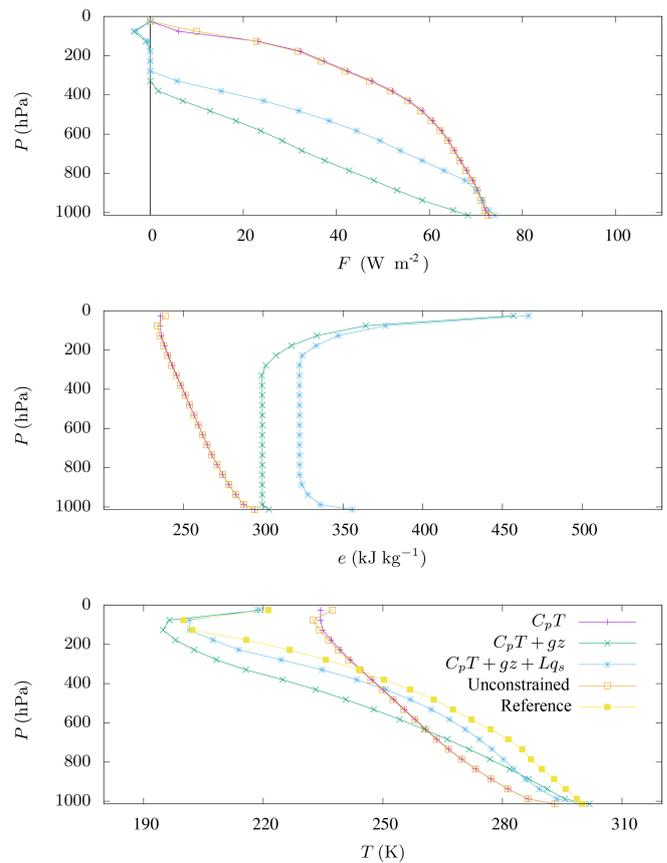


Figure 3. Energy flux F , specific energy e , and temperature T for tropical atmospheric composition measured by McClatchey et al. (1972) and different expressions for energy on the constraint ($e = C_p T$, $e = C_p T + gz$, and $e = C_p T + gz + Lq_s$). The elevation is given in pressure level P . Results for the unconstrained model of Herbert et al. (2013) are represented. We also give the temperature profile corresponding to the measurements of McClatchey et al. (1972), labelled as “reference” for qualitative comparison.

that an air parcel from layer 1 may not have enough energy to move adiabatically to layer 2.

- $e = C_p T + gz + Lq_s$: $F \geq 0$ if $T_1 \geq T_2 + [g (z_2 - z_1) + L (q_s(T_2) - q_s(T_1))]/C_p$. Since $q_s(T)$ is an increasing function, $q_s(T_2) - q_s(T_1)$ has the same sign as $T_2 - T_1$. The temperature gradient is usually negative (i.e. $T_2 \leq T_1$). Adding the latent heat at saturation makes the upward transport of energy less constrained. Consequently, the atmospheric temperature gradient weakens. Mechanically, we can see this as the fact that moist convection is easier than dry convection because of the transport of latent energy from the bottom to the top of the atmosphere.

3.2 General remarks

Various profiles are shown for tropical (Fig. 3) and sub-arctic winter (Fig. 4) conditions. The outputs of our constrained model are labelled by the energy terms taken into account in the constraint ($e = C_p T$, $e = C_p T + gz$, or $e = C_p T + gz + Lq_s$). The represented energy profiles are the energy corresponding to the constraint. For $C_p T$, we represent the profile $e = C_p T$, for $C_p T + gz$ we represent $e = C_p T + gz$, and for $C_p T + gz + Lq_s$ we represent $e = C_p T + gz + Lq_s$. For $e = C_p T$, the specific energy is trivially more important for hot regions. For $e = C_p T + gz$, the geopotential adds energy to upper layers. For $e = C_p T + gz + Lq_s$, the latent heat term adds energy to more humid layers. The results of the “unconstrained” model of Herbert et al. (2013) are represented with the associated thermal energy $e = C_p T$ (rigorously speaking, the model is constrained by the global conservation of energy, but we will refer to it as unconstrained since no constraint is imposed on fluxes). Temperature profiles measured by McClatchey et al. (1972) are also represented for qualitative comparison and labelled as “reference”.

For the unconstrained model, the energy flux is positive (i.e. upward) for the tropical (Fig. 3) and sub-arctic winter (Fig. 4) atmospheric compositions in all the column, despite the energy gradient inversion in the upper layers of the atmosphere. Therefore, the flux is in the same direction as the energy gradient in this region. This also corresponds to local negative entropy production and is not physically relevant. Consequently, the upward flux is overestimated, and the temperature gradient is weak. As discussed above (Sect. 2.1), the addition of the constraint $m_i \geq 0$ imposes the energy flux to be opposed to the specific energy gradient everywhere. As a consequence, the local entropy production is also constrained to be positive as in Ozawa and Ohmura (1997). But with an explicit account for the mass transport as explained above, we can account not only for sensible heat but more generally for moist static energy transfers in a convective column. If an energy flux in this direction is not favourable in matters of entropy production, it vanishes and we have stratification. When the geopotential term is considered (i.e. $e = C_p T + gz$ or $e = C_p T + gz + Lq_s$), we observe the following.

- An energy profile divided into three regions:
 1. An unstable surface layer with a decreasing energy profile;
 2. A neutral (slightly stable) mixed layer in the middle atmosphere with a vanishing energy gradient;
 3. An inversion layer at the top of the atmosphere where the energy is increasing with elevation.
- A vanishing energy flux (stratification) in the upper part of the atmosphere (around $P \simeq 300$ hPa for the tropics, Fig. 3, and $P \simeq 700$ hPa for sub-arctic winter, Fig. 4).

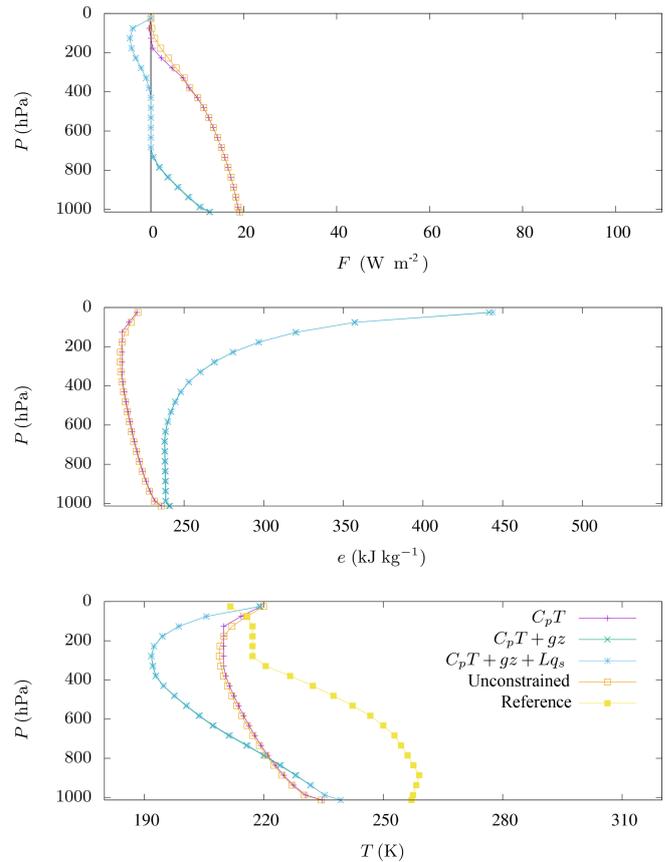


Figure 4. Energy flux F , specific energy e , and temperature T for sub-arctic winter atmospheric composition measured by McClatchey et al. (1972) and different expressions for energy on the constraint ($e = C_p T$, $e = C_p T + gz$, and $e = C_p T + gz + Lq_s$). The elevation is given in pressure level P . Results for the unconstrained model of Herbert et al. (2013) are represented. We also give the temperature profile corresponding to the measurements of McClatchey et al. (1972), labelled as “reference” for qualitative comparison.

We note that the thermal gradient is divided roughly by a factor of 2 when geopotential is considered, which gives a more realistic temperature profile.

3.3 Comparison between profiles

3.3.1 Model outputs for different climatic conditions

The constrained model is obviously sensitive to the water content. Considering $e = C_p T + gz$ or $e = C_p T + gz + Lq_s$ in the constraint gives approximately the same results for sub-arctic winter conditions (Fig. 4) (since $q_s(T)$ is weak for low temperatures) while predictions differ for tropical conditions (Fig. 3) (where T and then $q_s(T)$ are more important). We have verified that the influence of the surface albedo explains a large part of the temperature modification when we compare different climatic conditions.

3.3.2 Model output vs. reference profile

Before discussing the differences between the outputs and observations, we point out that this conceptual model does not take into account some important physical processes:

- Insolation is assumed to be constant, fixed at $1368/4 \text{ W m}^{-2}$ for all conditions. But in reality, it varies with respect to seasons, diurnal cycle, and latitude due to the Earth's geometry and obliquity. So, the model does not take into account the variation in the radiative budget because of these geometrical factors;
- Horizontal energy fluxes are not considered in this 1-D description;
- The effect of clouds, which plays an important role in the absorption and emission of radiation (Dufresne and Bony, 2008), is not implemented in the radiative code.

Therefore, the aim of this study is not to give realistic values of temperature profiles nor vertical energy fluxes but to give a qualitative evaluation of the model. However, we can make some remarks on the comparison of our results to the reference temperature profiles. We observe that our model with $e = C_p T + gz + Lq_s$ provides better results for tropical conditions (Fig. 3), whereas the computed profiles are not so good for sub-arctic winter conditions (Fig. 4). Considering the previous remarks, one can explain the gap between our model and observations as follows. Constant insolation at the seasonal timescale is valid for the tropics, but it varies strongly for high latitudes. So our model is not adapted to represent a specific season at a high latitude like sub-arctic winter conditions.

Tropical regions are subject to strong vertical motion due to radiative heating. So horizontal energy fluxes are less important and the 1-D vertical description may be more adapted to this case. In contrast, radiative heating is less important for the Arctic (especially in winter), so convection is weaker. Then, the representation of horizontal energy fluxes is essential at high latitudes since they play a major role in heat transport from hot equatorial regions to cold poles. This probably explains why we underestimate temperature for high latitudes (Fig. 4).

3.4 Sensitivity to atmospheric composition

3.4.1 Ozone

When the influence of O_3 is not considered in the radiative budget, we observe small changes for specific energy and large changes for temperature in the stratosphere (cf. Fig. 5). Indeed, O_3 absorbs solar radiation at the top of the atmosphere, which induces heating of this region. It follows that the temperature in the high atmosphere is more important with ozone, and we even observe an inversion of the temperature gradient. It follows that less solar radiation heats

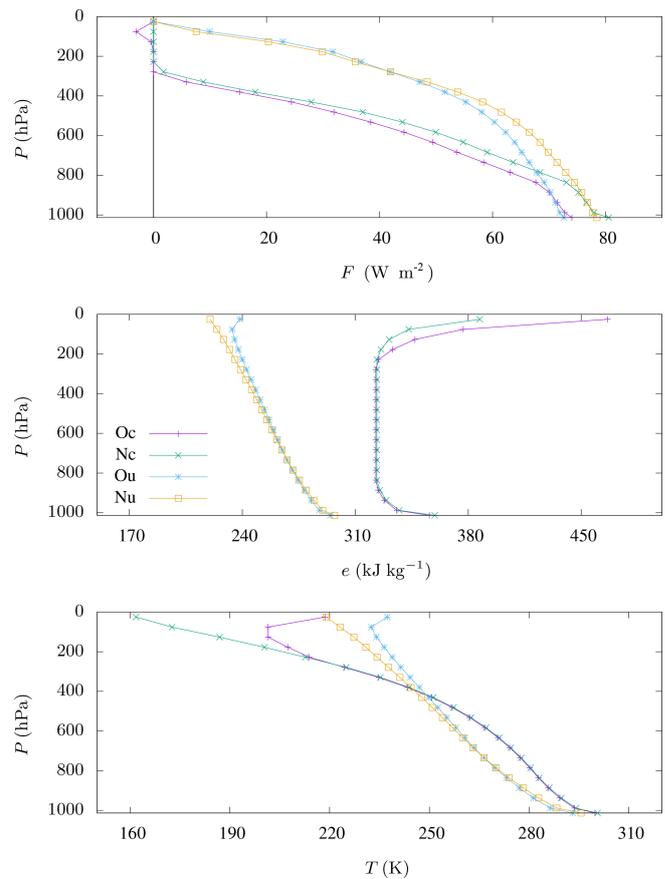


Figure 5. Energy flux F , specific energy e , and temperature T , with and without ozone, for the constrained model with $e = C_p T + gz + Lq_s$ and for the unconstrained model and for tropical atmospheric composition by McClatchey et al. (1972). Oc: with O_3 , constrained. Nc: without O_3 , constrained. Ou: with O_3 , unconstrained. Nu: without O_3 , unconstrained.

the ground, resulting in smaller surface temperature. For our constrained model with $e = C_p T + gz + Lq_s$ including ozone, we observe a downward convective energy flux at the top of the atmosphere (Fig. 5). Ozone is therefore associated with heating from the top with an inversion of the temperature gradient and downward energy fluxes in the high atmosphere. This last effect only appears when both geopotential energy and O_3 are taken into account. When geopotential is not considered, the upward energy flux is so overestimated that the effect is undetectable (Figs. 3 and 4).

3.4.2 Carbon dioxide

We also have performed the classic experiment of doubling CO_2 concentration (Randall et al., 2007). The climate sensitivity, defined as the surface temperature differences between computations with $[\text{CO}_2] = 560 \text{ ppm}$ and $[\text{CO}_2] = 280 \text{ ppm}$, is reported for the different atmospheric compositions in Table 1. Conventional models usually represent various pro-

cesses like water vapour, ice-albedo, lapse rate, and cloud feedbacks. They play an important role in amplifying the climate sensitivity (Forster and Gregory, 2006). When comparing our values with the literature, we must keep in mind that our model does not represent all those feedbacks. The lapse rate feedback is taken into account. Water vapour feedback is partially represented in a crude way by fixing relative humidity (changes in temperature have an impact on water content and change the radiative budget) but there is no explicit representation of the hydrological cycle. It is technically possible to include the ice-albedo feedback in a MEPM (Herbert et al., 2011a), but this is not the case here. Clouds are not represented in the model so we will focus on the comparison between the constrained and unconstrained models using the same radiative scheme. Nevertheless, typical values of climate sensitivity for multi-model averages with only relevant feedbacks are given (Dufresne and Bony, 2008) for qualitative comparison. For fixed absolute water profile, our values are compared to Dufresne and Bony (2008) accounting only for the lapse rate feedback; for the fixed relative humidity, we compare them to Dufresne and Bony (2008) accounting for both lapse rate and water vapour feedbacks.

The sensitivity values computed here for the unconstrained model differ from Herbert et al. (2013). We have checked that it is only due to the fact that we use $N = 20$ atmospheric layers here instead of $N = 9$ in Herbert et al. (2013) (see Appendix B for the convergence of the algorithm with N). The climate sensitivity is higher for the constrained model than the unconstrained one (despite one exception with fixed absolute moisture for mid-latitude winter). This result may be interpreted as follow. If we start with a radiative forcing induced by a CO_2 doubling, it is the same for the two models since we fix identical atmospheric compositions and surface albedos. However, upward energy fluxes are limited for the constrained case which induces more important warming of the lower part of the atmosphere. The induced ground temperature increase is, therefore, more important for the constrained model. This effect is observable when we look at the perturbation of energy flux, specific energy, and temperature (Fig. 6). The constrained model provides more realistic values of sensitivity for fixed relative humidity, particularly for the tropics. Indeed, the sensitivity of 1.60 K computed in this case is closer to the literature value of $2.1 \pm 0.2 \text{ K}$ (Dufresne and Bony, 2008) compared to the unconstrained model.

4 Discussion

MEPMs are different from the usual GCMs or EMICs. Generally, atmospheric models are based on the following.

1. Kinematics: equations describing how the fluid moves.
2. Dynamics: equations describing why the fluid moves. They are based on Navier–Stokes equations linking the fluid acceleration to the forces.

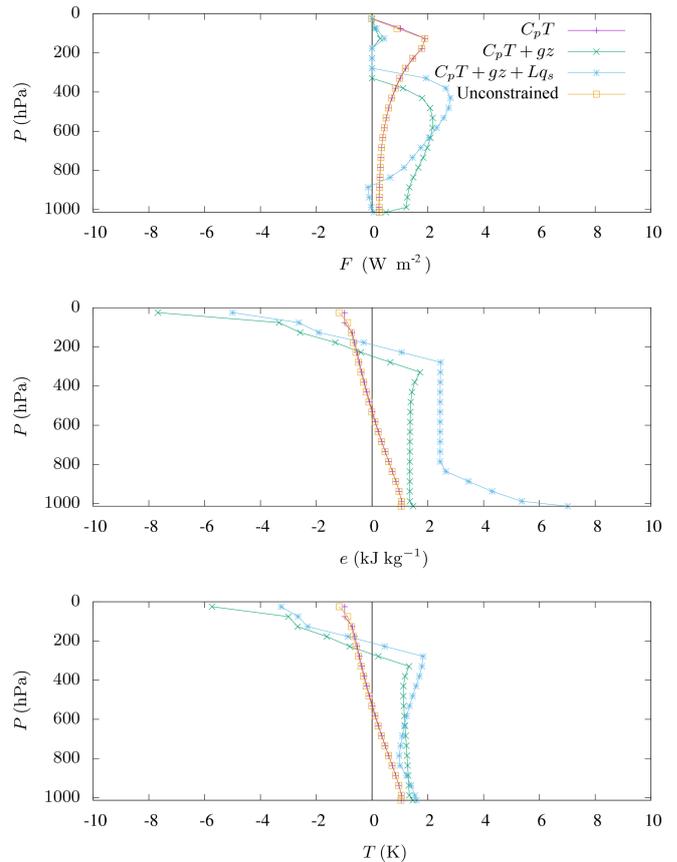


Figure 6. Differences in convective energy flux F , specific energy e , and temperature T between $[\text{CO}_2] = 560 \text{ ppm}$ and $[\text{CO}_2] = 280 \text{ ppm}$ for tropical atmospheric composition by McClatchey et al. (1972) represented for constrained model with $e = C_p T$, $e = C_p T + gz$, and $e = C_p T + gz + Lq_s$, and for the unconstrained model by Herbert et al. (2013).

3. Thermodynamics: energy budget equation involving dissipation, radiation, phases changes, etc.
4. An equation of state such as the ideal gas relation and approximations such as hydrostatic equilibrium to simplify the problem.
5. Closure hypothesis and/or parameterizations to represent sub-grid processes.

In usual climate models, energy transport is obtained after the computation of the velocity and other fields, whereas in MEPMs energy fluxes are computed implicitly without consideration of the dynamics. According to Dewar (2003) and Dewar (2009), MEP might be viewed as a statistical inference (such as the information theory interpretation of statistical physics by Jaynes, 1957) rather than a physical law. From this point of view, MEP allows drawing predictions (heat fluxes, specific energy, and temperature profiles) from the partial knowledge of the radiative budget

Table 1. Climate sensitivity (warming, in K, of the surface due to a doubling of CO₂ concentration) of the constrained model with $e = C_p T + gz + Lq_s$, unconstrained model of Herbert et al. (2013), and literature (Dufresne and Bony, 2008). We give the values for different atmospheric compositions and for fixed absolute or relative water vapour profiles.

	Conditions		Climate sensitivity		
	Atmospheric composition (McClatchey et al., 1972)	Surface albedo	Unconstrained model (K)	Constrained model (K)	Literature (K) (Dufresne and Bony, 2008)
Moisture	Tropical	0.1	0.90	1.06	
	Mid-latitude summer	0.1	0.79	0.93	
	Mid-latitude winter	0.1	0.46	0.24	0.4 ± 0.3
	Sub-arctic summer	0.6	0.53	1.43	(lapse rate only)
	Sub-arctic winter	0.6	0.20	0.31	
Absolute	Tropical	0.1	1.04	1.60	
	Mid-latitude summer	0.1	0.97	1.30	
	Mid-latitude winter	0.1	0.82	1.19	2.1 ± 0.2
	Sub-arctic summer	0.6	0.15	0.39	(lapse rate + water vapour)
	Sub-arctic winter	0.6	0.09	0.19	

and the energy content, while the effect of the sub-grid-scale processes is unknown. There are recent attempts to link MEP to other variational principles for dynamical systems or non-equilibrium statistical physics like the maximum of Kolmogorov–Sinaï entropy (Mihelich, 2015). Similar methods like the maximization of dynamical entropy or “Maximum Caliber” (Monthus, 2011; Dixit et al., 2018) may also be relevant to understand where MEP arises from a more formal point of view.

The gap between the model and observations is easily understood and explains why our 1-D description with constant insolation is more adapted for the tropics than arctic conditions. Further improvements are needed to solve these problems. Firstly, a more general 2- or 3-dimensional mass scheme transport is required. Secondly, it is formally possible to compute winds (Karkar and Paillard, 2015), moisture profiles, and humidity fluxes using MEP. Finally, we need to include a time dependence in our model for seasonal or diurnal cycles. A long-term objective might be to construct an SCM, with a limited number of adjustable parameters.

5 Conclusions

We have investigated the possibility of computing the vertical energy fluxes and temperature in the atmosphere using the MEP closure hypothesis into a simple climate model. The fluxes are then computed in an implicit way, which avoids tuning parameters. Contrary to some authors (Ozawa and Ohmura, 1997; Pujol and Fort, 2002; Herbert et al., 2013; Pascale et al., 2012), we have given a description of how the energy is transported. This paper provides the first attempt, to the best of the authors’ knowledge, to introduce such a representation in a MEPM. Different energy terms can be considered: sensible heat, geopotential, and latent heat for

a saturated profile. We have shown that this better energetic description of convection allows for obtaining more physically relevant temperature, specific energy, and energy flux profiles, still without any adjustable parameter for the dynamics. In particular, considering geopotential leads to stratification in the upper atmosphere and allows us to reproduce a temperature gradient closer to the observed one. We have investigated the sensitivity of the model when the atmospheric composition is modified. The results were compared to previous MEPMs and the literature. Our model is more sensitive to CO₂ than in Herbert et al. (2013) because the geopotential limits upward energy fluxes.

We hope that the present model may be helpful to construct SCMs with a reduced number of adjustable parameters.

Code availability. A Python code, based on the module `scipy.optimize`, that reproduce the results presented in this paper can be found at <https://doi.org/10.5281/zenodo.2597543> (Labarre et al., 2019).

Appendix A: Computing geopotential

We show here how to compute the geopotential and the dry static energy $e_i^d = C_p T_i + g z_i$ as a function of temperature. One first writes

$$z_i = z_i - z_{i-\frac{1}{2}} + \sum_{j=1}^{i-1} \Delta z_j, \quad (\text{A1})$$

where $\Delta z_j = z_{j+\frac{1}{2}} - z_{j-\frac{1}{2}}$ is the height of the layer j . So if ρ is the density of the air, R is the specific air constant and we assume the atmosphere is an ideal gas at hydrostatic equilibrium

$$g \Delta z_j = \int_{z_{j-\frac{1}{2}}}^{z_{j+\frac{1}{2}}} g \, dz = - \int_{p_{j-\frac{1}{2}}}^{p_{j+\frac{1}{2}}} \frac{dp}{\rho} = - \int_{p_{j-\frac{1}{2}}}^{p_{j+\frac{1}{2}}} RT \frac{dp}{p}. \quad (\text{A2})$$

Then, we can compute the mean elevation of a layer with two possible prescriptions:

- Isothermal layers ($T = T_j$ in the integrand).

$$g \Delta z_j = RT_j \ln \left(\frac{p_{j-\frac{1}{2}}}{p_{j+\frac{1}{2}}} \right). \quad (\text{A3})$$

So the geopotential reads

$$g z_i = R \left[T_i \ln \left(\frac{p_{i-\frac{1}{2}}}{p_i} \right) + \sum_{j=1}^{i-1} T_j \ln \left(\frac{p_{j-\frac{1}{2}}}{p_{j+\frac{1}{2}}} \right) \right]. \quad (\text{A4})$$

- Dry isentropic layers ($T = T_j \left(\frac{p}{p_j} \right)^{\frac{R}{c_p}}$ in the integrand):

$$g \Delta z_j = C_p T_j \left[\left(\frac{p_{j-\frac{1}{2}}}{p_j} \right)^{\frac{R}{c_p}} - \left(\frac{p_{j+\frac{1}{2}}}{p_j} \right)^{\frac{R}{c_p}} \right]. \quad (\text{A5})$$

So the geopotential reads

$$g z_i = C_p \left[T_i \left(\left(\frac{p_{i-\frac{1}{2}}}{p_i} \right)^{\frac{R}{c_p}} - 1 \right) + \sum_{j=1}^{i-1} T_j \left[\left(\frac{p_{j-\frac{1}{2}}}{p_j} \right)^{\frac{R}{c_p}} - \left(\frac{p_{j+\frac{1}{2}}}{p_j} \right)^{\frac{R}{c_p}} \right] \right]. \quad (\text{A6})$$

In both cases, for imposed pressure levels, we obtain the following expression of the specific energy,

$$e_i^d \equiv \sum_{j=0}^N (C_p \delta_{ij} + G_{ij}) T_j \equiv \sum_{j=0}^N E_{ij}^d T_j, \quad (\text{A7})$$

where δ_{ij} is the Kronecker symbol and G_{ij} and E_{ij}^d are the coefficients of constant matrices \mathbf{G} and \mathbf{E}^d .

Appendix B: Resolution

In order to solve the optimization problem (Eq. 11), we express it in Lagrangian formalism, assuming strong duality holds (Boyd and Vandenberghe, 2004). We therefore search the critical points of the Lagrangian associated with this problem

$$\mathcal{L} = \sigma - \sum_{i=1}^N \mu_i m_i$$

with $m_i \geq 0$, $\mu_i \geq 0$ and

$$\mu_i m_i = 0 \text{ for } i = 1, \dots, N, \quad (\text{B1})$$

where μ_1, \dots, μ_N are Lagrange multipliers associated with the constraint (mass flux positivity). In order to formulate the problem in terms of energy fluxes F , we must express the inverse temperature $X = 1/T$ and the mass mixing m with F .

We use an iterative method to solve this non-linear optimization problem:

1. We linearize the radiative budget and specific energy around a given temperature profile.
2. The entropy production and constraints are then quadratic forms of energy fluxes that can be solved numerically.
3. We reiterate step 1 by linearizing around the temperature profile obtained in step 2 until convergence.

This is a rather standard procedure for optimization though there is no guarantee of finding the global solution in case of multiple local maxima. To overcome this issue, we start with various random initial temperature profiles that may lead to different local maxima. In the end, we retain only the best maximum, which is assumed to be the maximum of entropy production.

B1 Flux–temperature relation

The energy balance equation in stationary state can be written as follows:

$$\mathcal{R}_i(X) + F_i - F_{i+1} = 0. \quad (\text{B2})$$

At each iteration, we linearize the radiative budget $\mathcal{R}_i(X)$ around a reference temperature profile X^0 :

$$\mathcal{R}_i(X) \simeq \mathcal{R}_i(X^0) + \sum_{j=0}^N R_{ij} (X_j - X_j^0), \quad (\text{B3})$$

where \mathbf{R} is a square matrix of size N and $\mathcal{R}(X^0)$ is the radiative budget for the profile X^0 . If we assume \mathbf{R} to be invertible, the energy flux can be computed with

$$X_i = X_i^0 - \sum_{j=0}^N R_{ij}^{-1} (F_j - F_{j+1} + \mathcal{R}_j(X^0)). \quad (\text{B4})$$

B2 Flux–mass relation

We first consider the dry static energy $e^d = C_p T + gz$. Considering the atmosphere is an ideal gas at hydrostatic equilibrium, and for prescribed pressure levels, layer volume depends only on temperature. Therefore, the elevation of a layer is a function of temperatures of layers below only and we can express the energy of a layer as (see Appendix A)

$$e_i^d = \sum_{k=0}^N E_{ik}^d T_k, \quad (\text{B5})$$

where \mathbf{E}^d is a square, triangular matrix of size N . If we linearize around X^0 , one obtains

$$e_i^d \simeq \sum_{k=0}^N \frac{E_{ik}^d}{X_k^0} (2X_k^0 - X_k). \quad (\text{B6})$$

Using Eq. (B4) gives the expression of energy as a function of flux

$$e_i^d(F) \simeq \sum_{k=0}^N \frac{E_{ik}^d}{X_k^0} \left(X_k^0 + \sum_{j=0}^N R_{kj}^{-1} (F_j - F_{j+1} + \mathcal{R}_j(X^0)) \right). \quad (\text{B7})$$

We also can take into account the latent heat for a water-vapour-saturated atmosphere. The mixing ratio at the saturation point, q_s , depends only on temperature T (in K) and pressure p (in Pa). It is given by the Bolton equation (Bolton, 1980):

$$q_s(T, p) = \frac{622.0 h_s(T)}{p - h_s(T)} \quad \text{with } h_s(T) = 6.112 \exp\left(\frac{17.62(T - 273.15)}{T - 30.03}\right), \quad (\text{B8})$$

where h_s is saturation vapour pressure of the mixture (in Pa). At fixed pressure, the moist static energy at saturation $e^s = C_p T + gz + Lq_s$ of layers is only a function of temperatures. If we linearize around the profile X^0 ,

$$e_i^s = e_i^d + Lq_s \left(\frac{1}{X_i} \right) \simeq e_i^d + Lq_s \left(\frac{1}{X_i^0} \right) - L \left. \frac{\partial q_s}{\partial T} \right|_{\frac{1}{X_i^0}} \frac{X_i - X_i^0}{X_i^0}. \quad (\text{B9})$$

Then, we can use the same reasoning as for the dry static heat and replace the matrix \mathbf{E}^d by \mathbf{E}^s to consider the effect of latent energy for a saturated moisture profile. However, the radiative budget is still computed with reference water vapour profiles. In the following, e can represent e^d or e^s .

B3 Constraint

By multiplying both sides of

$$F_i = -m_i (e_i - e_{i-1}) \quad (\text{B10})$$

by $(e_i - e_{i-1})$, we obtain

$$F_i (e_i - e_{i-1}) = -m_i (e_i - e_{i-1})^2. \quad (\text{B11})$$

So the constraint $m_i \geq 0$ is equivalent to

$$\alpha_i(F) \equiv -F_i (e_i(F) - e_{i-1}(F)) \geq 0. \quad (\text{B12})$$

B4 Associated Lagrangian in flux space

Using the linearized energy budget (Eq. B4) and the constraint (Eq. B12), the problem (Eq. 11) is supposed to be equivalent to the search of critical points of the following Lagrangian

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(F, \mu) &= \sigma(F) - \sum_{i=1}^N \mu_i \alpha_i(F) \\ &= \sum_{i=0}^N X_i (F_i - F_{i+1}) - \sum_{i=1}^N \mu_i \alpha_i \end{aligned} \quad (\text{B13})$$

$$\begin{aligned} &\simeq \sum_{i=0}^N \left(X_i^0 - \sum_{j=0}^N R_{ij}^{-1} (F_j - F_{j+1} + \mathcal{R}_j(X^0)) \right) \\ &(F_i - F_{i+1}) - \sum_{i=1}^N \mu_i \alpha_i(F), \end{aligned} \quad (\text{B14})$$

while respecting the Karush–Kuhn–Tucker (KKT) conditions

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial F_i} = 0 \quad \text{with} \quad &\begin{cases} \alpha_i(F) \geq 0, \\ \mu_i \geq 0, \end{cases} \\ \text{and } \mu_i \alpha_i(F) = 0 \quad &\text{for } i = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (\text{B15})$$

The problem is solved numerically by using an interior point method (Boyd and Vandenberghe, 2004).

B5 Convergence of the algorithm

In practice, the algorithm may fail to find the global optimum for large N (≥ 50) but is robust for $N \leq 40$. As N increases, the algorithm converges rapidly to a solution (Fig. B1). The choice $N = 20$ is a good compromise between computation time and resolution.

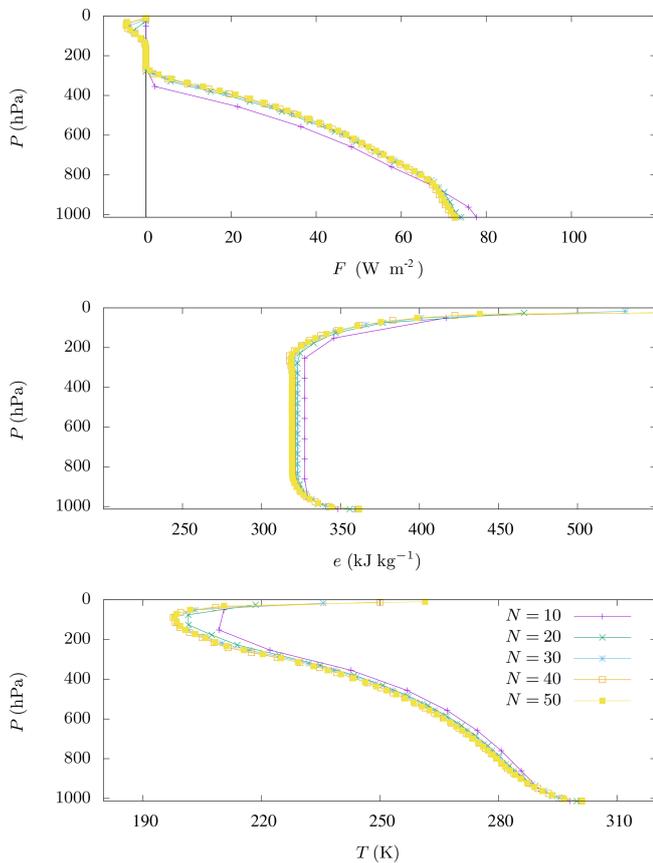


Figure B1. Energy flux F , specific energy e , and temperature T computed by our constrained model with $e = C_p T + gz + Lq_s$ for imposed tropical atmospheric composition measured by McClatchey et al. (1972), with various resolutions N .

Author contributions. DP developed the model code. VL performed the simulations and prepared the manuscript under the supervision of DP and BD.

Competing interests. The authors declare that they have no conflict of interest.

Special issue statement. This article is part of the special issue “Thermodynamics and optimality in the Earth system and its subsystems (ESD/HESS inter-journal SI)”. It is not associated with a conference.

Acknowledgements. We thank Stan Schymanski and the anonymous reviewer for their useful comments that helped us to improve the article.

Review statement. This paper was edited by Michel Crucifix and reviewed by Stan Schymanski and one anonymous referee.

References

- Bolton, D.: The Computation of Equivalent Potential Temperature, *Mon. Weather Rev.*, 108, 1046–1053, [https://doi.org/10.1175/1520-0493\(1980\)108<1046:TCOEPT>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0493(1980)108<1046:TCOEPT>2.0.CO;2), 1980.
- Boyd, S. and Vandenberghe, L.: *Convex Optimization*, Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2004.
- Dewar, R.: Information theory explanation of the fluctuation theorem, maximum entropy production and self-organized criticality in non-equilibrium stationary states, *J. Phys. A-Math. Gen.*, 36, 631–641, <https://doi.org/10.1088/0305-4470/36/3/303>, 2003.
- Dewar, R. C.: Maximum Entropy Production as an Inference Algorithm that Translates Physical Assumptions into Macroscopic Predictions: Don't Shoot the Messenger, *Entropy*, 11, 931–944, <https://doi.org/10.3390/e11040931>, 2009.
- Dixit, P. D., Wagoner, J., Weistuch, C., Pressé, S., Ghosh, K., and Dill, K. A.: Perspective: Maximum caliber is a general variational principle for dynamical systems, *J. Chem. Phys.*, 148, 010901, <https://doi.org/10.1063/1.5012990>, 2018.
- Dufresne, J.-L. and Bony, S.: An Assessment of the Primary Sources of Spread of Global Warming Estimates from Coupled Atmosphere–Ocean Models, *J. Climate*, 21, 5135–5144, <https://doi.org/10.1175/2008JCLI2239.1>, 2008.
- Dufresne, J.-L., Fournier, R., Hourdin, C., and Hourdin, F.: Net Exchange Reformulation of Radiative Transfer in the CO₂ 15- μ m Band on Mars, *J. Atmos. Sci.*, 62, 3303–3319, <https://doi.org/10.1175/JAS3537.1>, 2005.
- Dufresne, J.-L., Foujols, M.-A., Denvil, S., Caubel, A., Marti, O., Aumont, O., Balkanski, Y., Bekki, S., Bellenger, H., Benshila, R., Bony, S., Bopp, L., Braconnot, P., Brockmann, P., Cadule, P., Cheruy, F., Codron, F., Cozic, A., Cugnet, D., de Noblet, N., Duvel, J.-P., Ethé, C., Fairhead, L., Fichefet, T., Flavoni, S., Friedlingstein, P., Grandpeix, J.-Y., Guez, L., Guilyardi, E., Hauglustaine, D., Hourdin, F., Idelkadi, A., Ghattas, J., Jous-
- saume, S., Kageyama, M., Krinner, G., Labetoulle, S., Lahellec, A., Lefebvre, M.-P., Lefevre, F., Levy, C., Li, Z. X., Lloyd, J., Lott, F., Madec, G., Mancip, M., Marchand, M., Masson, S., Meurdesoif, Y., Mignot, J., Musat, I., Parouty, S., Polcher, J., Rio, C., Schulz, M., Swingedouw, D., Szopa, S., Talandier, C., Terray, P., Viovy, N., and Vuichard, N.: Climate change projections using the IPSL-CM5 Earth System Model: from CMIP3 to CMIP5, *Clim. Dynam.*, 40, 2123–2165, <https://doi.org/10.1007/s00382-012-1636-1>, 2013.
- Forster, P. M. F. and Gregory, J. M.: The Climate Sensitivity and Its Components Diagnosed from Earth Radiation Budget Data, *J. Climate*, 19, 39–52, <https://doi.org/10.1175/JCLI3611.1>, 2006.
- Goody, R.: Maximum Entropy Production in Climate Theory, *J. Atmos. Sci.*, 64, 2735–2739, <https://doi.org/10.1175/JAS3967.1>, 2007.
- Goody, R. M.: A statistical model for water-vapour absorption, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 78, 165–169, <https://doi.org/10.1002/qj.49707833604>, 1952.
- Goosse, H., Brovkin, V., Fichefet, T., Haarsma, R., Huybrechts, P., Jongma, J., Mouchet, A., Selten, F., Barriat, P.-Y., Campin, J.-M., Deleersnijder, E., Driesschaert, E., Goelzer, H., Janssens, I., Loutre, M.-F., Morales Maqueda, M. A., Opsteegh, T., Mathieu, P.-P., Munhoven, G., Pettersson, E. J., Renssen, H., Roche, D. M., Schaeffer, M., Tartinville, B., Timmermann, A., and Weber, S. L.: Description of the Earth system model of intermediate complexity LOVECLIM version 1.2, *Geosci. Model Dev.*, 3, 603–633, <https://doi.org/10.5194/gmd-3-603-2010>, 2010.
- Herbert, C.: Applications de la mécanique statistique à la modélisation du climat: thermodynamique et dynamique de l'atmosphère, PhD thesis, available at: <http://www.theses.fr/2012PA066661> (last access: 20 October 2018), thèse de doctorat dirigée par Paillard, Didier et Dubrulle, Bérengère Géophysique Paris 6, 2012.
- Herbert, C., Paillard, D., and Dubrulle, B.: Entropy production and multiple equilibria: the case of the ice-albedo feedback, *Earth Syst. Dynam.*, 2, 13–23, <https://doi.org/10.5194/esd-2-13-2011>, 2011a.
- Herbert, C., Paillard, D., Kageyama, M., and Dubrulle, B.: Present and Last Glacial Maximum climates as states of maximum entropy production, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 137, 1059–1069, <https://doi.org/10.1002/qj.832>, 2011b.
- Herbert, C., Paillard, D., and Dubrulle, B.: Vertical Temperature Profiles at Maximum Entropy Production with a Net Exchange Radiative Formulation, *J. Climate*, 26, 8545–8555, <https://doi.org/10.1175/JCLI-D-13-00060.1>, 2013.
- Hourdin, F., Mauritsen, T., Gettelman, A., Golaz, J.-C., Balaji, V., Duan, Q., Folini, D., Ji, D., Klocke, D., Qian, Y., Rauser, F., Rio, C., Tomassini, L., Watanabe, M., and Williamson, D.: The Art and Science of Climate Model Tuning, *B. Am. Meteorol. Soc.*, 98, 589–602, <https://doi.org/10.1175/BAMS-D-15-00135.1>, 2017.
- Jaynes, E. T.: Information Theory and Statistical Mechanics, *Phys. Rev.*, 106, 620–630, <https://doi.org/10.1103/PhysRev.106.620>, 1957.
- Karkar, S. and Paillard, D.: Inferring global wind energetics from a simple Earth system model based on the principle of maximum entropy production, *Earth Syst. Dynam. Discuss.*, 6, 407–433, <https://doi.org/10.5194/esdd-6-407-2015>, 2015.
- Kleidon, A.: A basic introduction to the thermodynamics of the Earth system far from equilibrium and maximum en-

- ropy production, *Philos. T. Roy. Soc. B*, 365, 1303–1315, <https://doi.org/10.1098/rstb.2009.0310>, 2010.
- Lacis, A. A. and Hansen, J.: A Parameterization for the Absorption of Solar Radiation in the Earth's Atmosphere, *J. Atmos. Sci.*, 31, 118–133, [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1974\)031<0118:APFTAO>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1974)031<0118:APFTAO>2.0.CO;2), 1974.
- Labarre, V., Paillard, D., and Dubrulle, B.: Supplementary Materials to: A Radiative Convective Model based on constrained Maximum Entropy Production, Zenodo, 18 March 2019, <https://doi.org/10.5281/zenodo.2597543>, 2019.
- Lorenz, R. D., Lunine, J. I., Withers, P. G., and McKay, C. P.: Titan, Mars and Earth: Entropy production by latitudinal heat transport, *Geophys. Res. Lett.*, 28, 415–418, <https://doi.org/10.1029/2000GL012336>, 2001.
- Manabe, S. and Strickler, R. F.: Thermal Equilibrium of the Atmosphere with a Convective Adjustment, *J. Atmos. Sci.*, 21, 361–385, [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1964\)021<0361:TEOTAW>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1964)021<0361:TEOTAW>2.0.CO;2), 1964.
- Martyushev, L. and Seleznev, V.: Maximum entropy production principle in physics, chemistry and biology, *Physics Reports*, 426, 1–45, <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2005.12.001>, 2006.
- McClatchey, R. A., Fenn, R. W., Selby, J. E. A., Volz, F. E., and Garing, J. S.: Optical properties of the atmosphere, 3rd Edn., Tech. Rep. AFCRL-72-0497, 108 pp., Air Force Geophys. Lab., Hanscom AFB, Mass., 1972.
- Mellor, G. L. and Yamada, T.: Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems, *Rev. Geophys.*, 20, 851–875, <https://doi.org/10.1029/RG020i004p00851>, 1982.
- Mihelich, M.: Vers une compréhension du principe de maximisation de production d'entropie, PhD thesis, available at: <http://www.theses.fr/2015SACLS038> (last access: 20 October 2018), thèse de doctorat dirigée par Dubrulle, Bérengère Physique Paris Saclay 2015, 2015.
- Monthus, C.: Non-equilibrium steady states: maximization of the Shannon entropy associated with the distribution of dynamical trajectories in the presence of constraints, *J. Stat. Mech.-Theory E*, 2011, P03008, <https://doi.org/10.1088/1742-5468/2011/03/p03008>, 2011.
- North, G. R., Cahalan, R. F., and Coakley Jr., J. A.: Energy balance climate models, *Rev. Geophys.*, 19, 91–121, <https://doi.org/10.1029/RG019i001p00091>, 1981.
- O'Brien, D. M. and Stephens, G. L.: Entropy and climate. II: Simple models, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 121, 1773–1796, <https://doi.org/10.1002/qj.49712152712>, 1995.
- Ozawa, H. and Ohmura, A.: Thermodynamics of a Global-Mean State of the Atmosphere – A State of Maximum Entropy Increase, *J. Climate*, 10, 441–445, [https://doi.org/10.1175/1520-0442\(1997\)010<0441:TOAGMS>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0442(1997)010<0441:TOAGMS>2.0.CO;2), 1997.
- Paillard, D.: The timing of Pleistocene glaciations from a simple multiple-state climate model, *Nature*, 391, 378–381, 1998.
- Paltridge, G. W.: Global dynamics and climate – a system of minimum entropy exchange, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 101, 475–484, <https://doi.org/10.1002/qj.49710142906>, 1975.
- Pascale, S., Gregory, J. M., Ambaum, M. H. P., Tailleux, R., and Lucarini, V.: Vertical and horizontal processes in the global atmosphere and the maximum entropy production conjecture, *Earth Syst. Dynam.*, 3, 19–32, <https://doi.org/10.5194/esd-3-19-2012>, 2012.
- Peixoto, J. P. and Oort, A. H.: Physics of climate, American Institute of Physics, New York, 1992.
- Pujol, T. and Fort, J.: States of maximum entropy production in a one-dimensional vertical model with convective adjustment, *Tellus A*, 54, 363–369, <https://doi.org/10.3402/tellusa.v54i4.12157>, 2002.
- Randall, D. A., Wood, R. A., Bony, S., Colman, R., Fichet, T., Fyfe, J., Kattsov, V., Pitman, A., Shukla, J., Srinivasan, J., Stouffer, R. J., Sumi, A., and Taylor, K. E.: Climate models and their evaluation, in: *Climate Change 2007: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the fourth assessment report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*, edited by: Solomon, S., Qin, D., Manning, M., Chen, Z., Marquz, M., Averyt, K. B., Tignor, M., and Miller, H. L., Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom/New York, NY, USA, 2007.
- Rieutord, M.: Fluid dynamics: an introduction, Graduate Texts in Physics, Springer, ISBN 978-3-319-09351-2, 2015.
- Rodgers, C. D.: Comments on paltridge's "minimum entropy exchange" principle, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 102, 455–458, <https://doi.org/10.1002/qj.49710243216>, 1976.
- Rodgers, C. D. and Walshaw, C. D.: The computation of infra-red cooling rate in planetary atmospheres, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 92, 67–92, <https://doi.org/10.1002/qj.49709239107>, 1966.
- Stevens, B. and Bony, S.: What Are Climate Models Missing?, *Science*, 340, 1053–1054, <https://doi.org/10.1126/science.1237554>, 2013.
- Yano, J.-I., Bister, M., Fuchs, Ž., Gerard, L., Phillips, V. T. J., Barkidija, S., and Piriou, J.-M.: Phenomenology of convection-parameterization closure, *Atmos. Chem. Phys.*, 13, 4111–4131, <https://doi.org/10.5194/acp-13-4111-2013>, 2013.

3.4 Résultats

On discute ici les résultats les plus importants en utilisant le code Python fourni dans les données supplémentaires de l'article (<https://doi.org/10.5281/zenodo.2597543>). Des analyses supplémentaires sur la sensibilité du modèle aux profils d'humidité, d'ozone et de CO_2 sont disponibles dans l'article.

Le flux d'énergie convectif net entre les couches n et $n + 1$ est $F_{n+1} = (J_{n(n+1)} - J_{(n+1)n})/S = m_{n+1}(e_n - e_{n+1})/S$ est opposé au gradient d'énergie spécifique ($e_n - e_{n+1}$) en raison de la contrainte $m_{n+1} \geq 0$. Cette contrainte peut également être vue comme une contrainte de production d'entropie locale positive. À noter que la production d'entropie locale positive n'est pas garantie par la contrainte $m_{nn'} \geq 0$ pour un schéma de convection quelconque, c'est une spécificité du schéma linéaire. Ainsi, les profils verticaux de température (qui détermine complètement l'énergie spécifique dans notre modèle) et de flux d'énergie dépendent naturellement de l'expression de l'énergie spécifique que l'on utilise. On en considère trois :

- L'énergie sensible seule $e = C_p T$;
- L'énergie statique sèche, qui est la somme de l'énergie sensible et de l'énergie géopotentielle $e = C_p T + gz$;
- L'énergie statique humide à saturation qui est la somme de l'énergie statique sèche et de l'énergie latente à saturation $e = C_p T + gz + Lh_s$;

Les profils de température, d'énergie spécifique et de flux d'énergie calculés par le modèle pour ces différentes expressions d'énergie spécifiques sont représentés en figure 3.3. On utilise les profils de gaz à effet de serre des conditions tropicales de [A. McClatchey et al., 1972] en fixant l'humidité relative dans le modèle radiatif. L'albédo de surface est fixé à $\alpha = 0.1$ et la concentration en CO_2 est fixée à sa valeur pré-industrielle de 280 *ppm*. On calcule l'énergie géopotentielle avec la prescription de couches isentropiques (voir annexe A de l'article). Les résultats obtenus avec le modèle de [Herbert et al., 2013] sont aussi représentés.

Si on considère uniquement l'énergie sensible $e = C_p T$, notre modèle donne des résultats similaires à [Herbert et al., 2013] excepté qu'on observe un changement de signe du gradient de température au sommet de l'atmosphère dans le modèle de [Herbert et al., 2013] (lié au chauffage dû à l'ozone) qui n'est pas présent dans notre modèle. Dans les deux cas, les flux sont surestimés et le gradient de température est donc sous-estimé. Lorsqu'on considère l'énergie statique sèche $e = C_p T + gz$, on tient compte du fait qu'une parcelle d'air transportée adiabatiquement vers le haut (respectivement le bas) se détend (se comprime), perd (gagne) de l'énergie sensible au profit d'un gain (d'une perte) d'énergie potentielle. Le modèle prédit des flux d'énergie qui sont diminués par rapport au cas où seule l'énergie sensible est considérée. Le gradient de température est donc augmenté. Dans le cas où l'on considère l'énergie statique humide saturée $e = C_p T + gz + Lh_s$, on tient compte du fait qu'une parcelle d'air transportée d'une région humide vers une région plus sèche perd de l'énergie latente par évaporation au profit de l'énergie sensible et inversement. La basse atmosphère étant plus humide, l'ajout du terme d'énergie latente introduit un transport d'énergie du bas vers le haut : on obtient alors des flux d'énergie qui sont supérieures au cas où l'énergie statique sèche est considérée. Le gradient de température est alors diminué dans la basse atmosphère.

Quand l'énergie géopotentielle est considérée ($e = C_p T + gz$ ou $e = C_p T + gz + Lq_s$), les profils d'énergie spécifique et de flux d'énergie permettent d'identifier trois régions distinctes. La première est une couche de mélange au niveau de la surface. Elle est caractérisée par un gradient de température stable (supérieur au gradient adiabatique sec pour $e = C_p T + gz$ ou

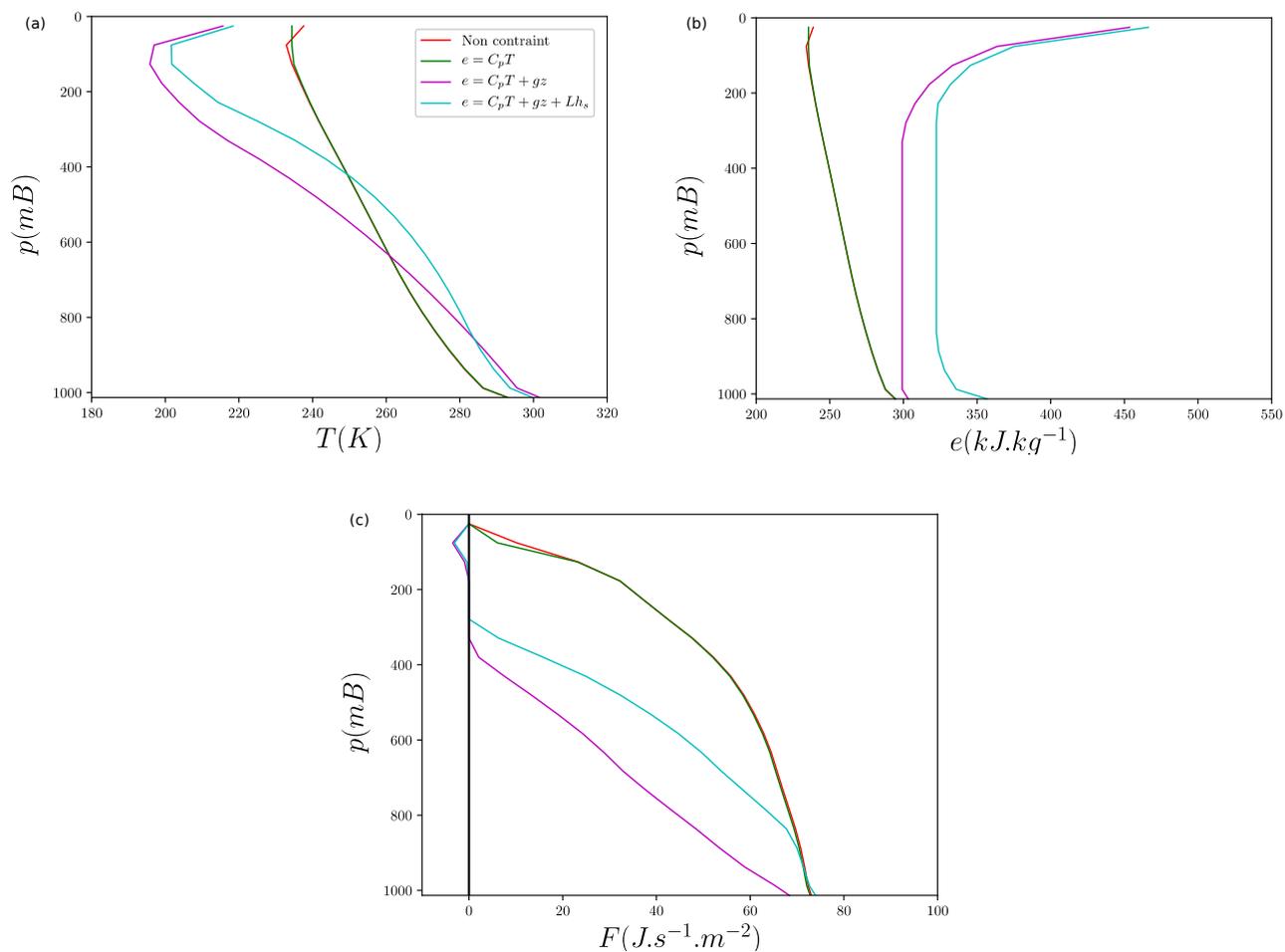


FIGURE 3.3 – Résultats de notre modèle radiatif-convectif MEP. Les profils verticaux de température (a), d'énergie spécifique (b), et de flux d'énergie (c) pour les différentes expressions d'énergie spécifique. Les prédictions du modèle de [Herbert et al., 2013] sont également montrées pour comparaison ("non contraint" dans la légende).

humique saturé pour $e = C_p T + gz + Lh_s$) et un coefficient de mélange m_1 strictement positif et fini. La seconde région correspond aux couches mélangées (i.e. $e = \text{constante}$)³ au milieu de l’atmosphère et qui correspond à un gradient de température adiabatique sec pour $e = C_p T + gz$ ou humique saturé pour $e = C_p T + gz + Lh_s$. La troisième région est la stratosphère dans laquelle le flux d’énergie est nul (i.e. $m = 0$) (ou dirigé vers le bas à cause du chauffage radiatif lié à la présence d’ozone dans cette région). La stratosphère est à une altitude plus élevée (pression inférieure) dans le cas où l’on considère $e = C_p T + gz + Lh_s$ à cause du transport d’énergie latente. Cette structure en trois zones est plus réaliste que la structure obtenue par les modèles dans lesquels la description de l’énergie et des flux est absente [Ozawa and Ohmura, 1997, Herbert et al., 2013].

3.5 Conclusions et perspectives

Notre modèle montre qu’une représentation simplifiée de la convection d’énergie dans un modèle utilisant MEP en hypothèse de fermeture permet d’obtenir des prédictions plus réalistes sans introduire des paramètres représentant la dynamique de l’écoulement comme les coefficients de transferts ou la viscosité turbulente. En particulier, le modèle prédit un flux de surface non-trivial (i.e. avec un coefficient de mélange non nul, mais fini) sans utiliser une relation du type aerodynamic formulae. La région bien mélangée énergétiquement au milieu de l’atmosphère, obtenue avec notre modèle quand on considère l’énergie géopotentielle, rappelle la prescription d’ajustement convectif utilisée dans les premiers modèles de climat [Manabe and Strickler, 1964], et est en accord avec les observations, au moins en première approximation.

On pourrait comparer plus précisément les résultats du modèle aux observations et aux modèles plus complets en calculant le coefficient de transfert. Ce problème n’est cependant pas encore l’objectif principal compte tenu de la simplicité du modèle. Un problème plus essentiel est d’incorporer le cycle de l’eau de façon cohérente (i.e. représenter explicitement le bilan d’eau et calculer le bilan radiatif avec le profil d’humidité utilisé dans le bilan d’eau). Les équations de bilans s’écrivent alors

$$\frac{dM_n}{dt} = \sum_{n'=1}^N (m_{n'n} - m_{nn'}) = 0, \quad (3.10)$$

$$\frac{dE_n}{dt} = \sum_{n'=1}^N (m_{n'n} e_{n'} - m_{nn'} e_n) + Q_n[T, h] = 0, \quad (3.11)$$

$$\frac{dH_n}{dt} = \sum_{n'=1}^N (m_{n'n} h_{n'} - m_{nn'} h_n) + C_n[T, h] = 0, \quad (3.12)$$

où H_n est la vapeur d’eau contenue dans la couche n et $C_n[T, h]$ est la source d’humidité dans la même couche (i.e. la différence entre la condensation et les précipitations).

3. Rigoureusement, le gradient d’énergie n’est pas nul sinon le flux d’énergie le serait également. Pour être plus exact, l’algorithme semble converger vers la solution $m_{n+1} \rightarrow \infty$ avec $J_{n+1} = m_{n+1}(e_n - e_{n+1})$ constant.

Chapitre 4

Formulation de l'hypothèse de maximisation de production d'entropie pour les problèmes dépendant du temps : le cas du cycle saisonnier

4.1 Le problème

Jusqu'ici, l'hypothèse MEP n'a été que très peu utilisée pour étudier des problèmes dépendant du temps. Pourtant, l'hypothèse peut facilement se formaliser en maximisant la variation d'entropie (i.e. la production d'entropie intégrée en temps entre deux instants). Nous commencerons par présenter le problème que nous voudrions représenter : le cycle saisonnier, puis nous construirons un modèle conceptuel pour ce problème.

Le cycle saisonnier

Les variations saisonnières d'insolation entraînent naturellement une variation des températures atmosphériques, de la surface (qui correspond à une fine couche continentale ou océanique pénétrée par le rayonnement), et du sous-sol (en profondeur). Les processus les plus importants pour la représentation du cycle saisonnier sont :

- L'insolation qui correspond à l'énergie solaire reçue par unité de surface et de temps au sommet de l'atmosphère ;
- Le bilan radiatif qui dépend de l'insolation et des propriétés de réflexion, d'absorption, et de transmission des constituants atmosphériques et de la surface. On distinguera l'atmosphère et la surface qui sont directement affectées par le rayonnement d'une part, et le sous-sol ou l'océan profond qui n'interceptent pas le rayonnement solaire mais stockent de la chaleur d'autre part. On simplifie la structure verticale en séparant l'atmosphère de capacité calorifique C_a , la surface de capacité calorifique C_s et de hauteur H_s (qui est la profondeur typique de pénétration du chauffage radiatif), et la couche profonde (sous-sol ou océan profond) de capacité calorifique C_g et de hauteur H_g . Cette approximation est

par exemple utilisée dans [Thompson and Schneider, 1979] (mais l'atmosphère n'y est pas représentée);

- La convection atmosphérique redistribue l'énergie sensible, l'énergie potentielle et l'énergie latente dans l'atmosphère;
- Le flux de surface représente le transfert d'énergie entre la surface et l'atmosphère. Il dépend de nombreux processus comme la friction, l'évaporation ou l'évapotranspiration;
- Le flux d'énergie entre la surface et le sous-sol est en partie dû à la diffusion, mais il dépend aussi de l'hydrologie. Ce flux permet un stockage/une libération d'énergie contenue dans la couche de surface. Le sous-sol a donc un effet tampon;
- Les flux géothermiques sont ceux qui interviennent dans les couches terrestres plus profondes. Nous ne les discuterons pas ici.

À cause de sa faible capacité calorifique et de son exposition directe au rayonnement, la température atmosphérique est quasiment en phase avec le forçage. À l'inverse, le sol qui a une capacité calorifique plus importante et qui n'est pas exposé directement au rayonnement réagit avec un temps de latence plus important et une amplitude moindre. En tant que frontière entre l'atmosphère et le sol, la couche de surface a naturellement un comportement intermédiaire : elle est constamment influencée par le sol, l'atmosphère, et le bilan radiatif. D'un point de vue idéalisé, on représente le forçage en insolation et la réponse en température par des signaux sinusoïdaux caractérisés par leurs valeurs moyennes, leurs amplitudes et leurs déphasages par rapport à l'insolation (figure 4.1). L'une des questions de base concernant le cycle saisonnier est de déterminer l'amplitude et le déphasage des températures par rapport au forçage en insolation [Stine et al., 2009].

La première cause de variabilité spatiale de l'amplitude et du déphasage est le contraste entre océan et terre [Prescott and Collins, 1951]. Il s'explique simplement par la différence de capacité calorifique entre l'eau liquide et le sol continental et la différence entre le mélange convectif dans l'océan et le mélange diffusif dans le sol. Cependant, le cycle saisonnier est aussi influencé par les circulations atmosphériques [Stine and Huybers, 2012] et océaniques, et les flux de surface. Ainsi, la bonne simulation du cycle saisonnier dans les modèles de circulations générales dépend de la représentation des flux turbulents atmosphériques et océaniques, et des flux turbulents de surface (et donc des paramétrisations). Nous aimerions proposer un modèle simplifié basé sur l'hypothèse MEP pour ce problème.

Hypothèse MEP pour les problèmes dépendants du temps

Comme proposé dans [Herbert, 2012], on maximise la production d'entropie intégrée sur un cycle

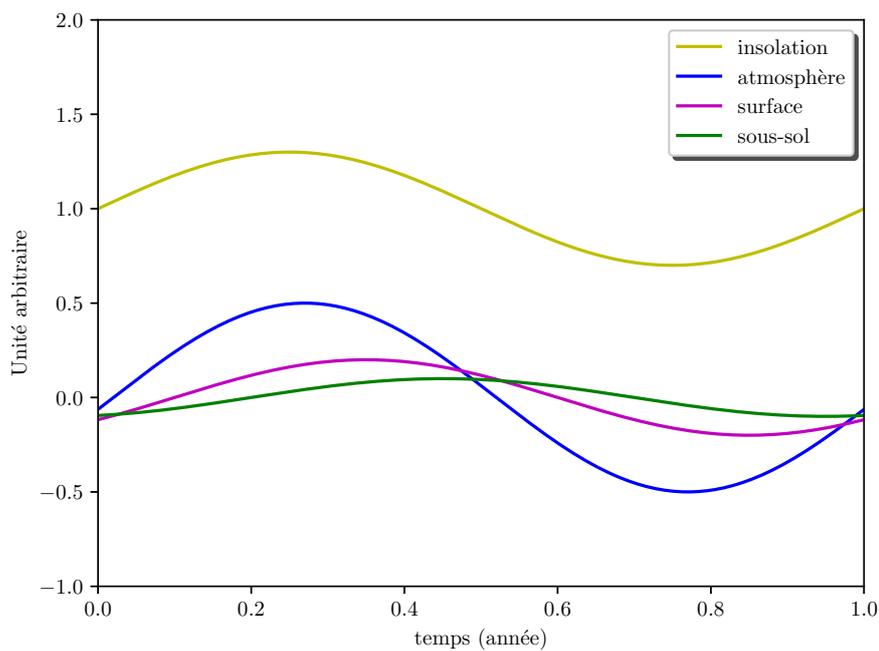
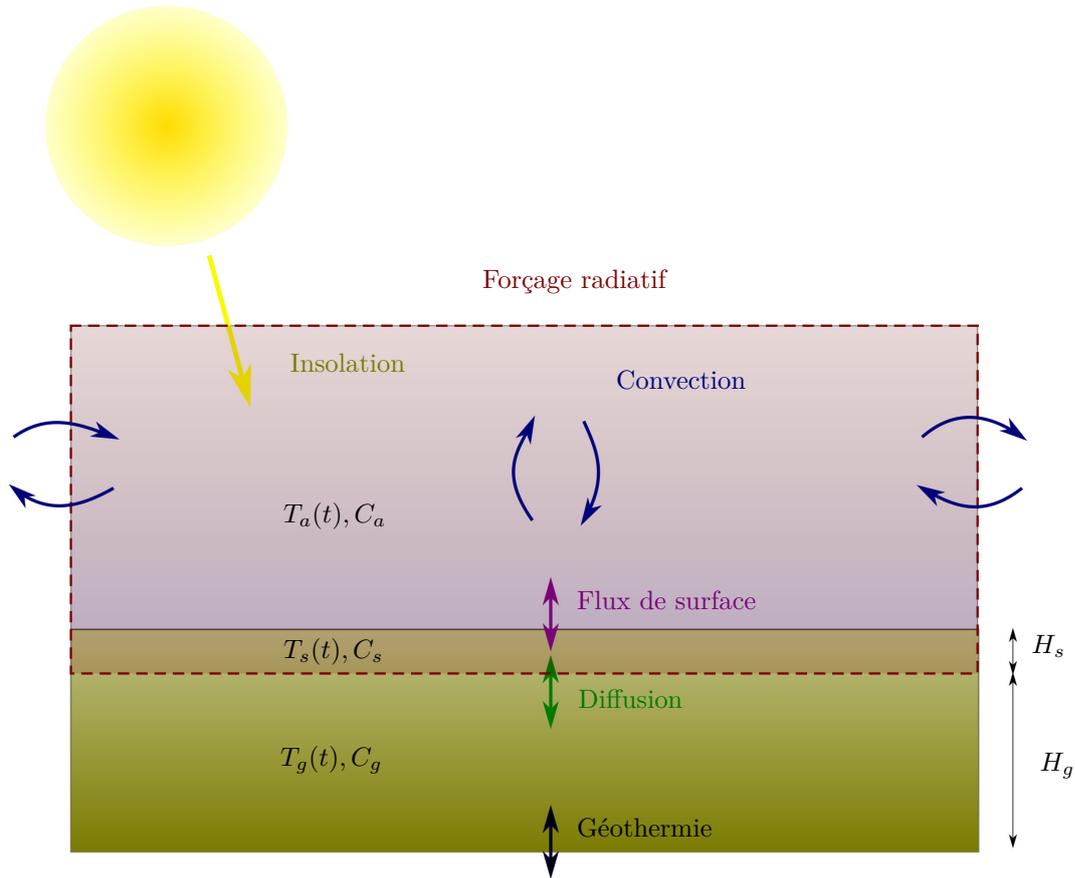
$$\Sigma = \int_0^{\mathcal{T}} \int_V \mathbf{J} \cdot \nabla \left(\frac{1}{T} \right) \mathrm{d}\mathbf{r} \mathrm{d}t = \int_0^{\mathcal{T}} \int_V \frac{-\nabla \cdot \mathbf{J}}{T} \mathrm{d}\mathbf{r} \mathrm{d}t \quad (4.1)$$

$$= \int_0^{\mathcal{T}} \int_V \frac{C_p \partial_t T - Q[T]}{T} \mathrm{d}\mathbf{r} \mathrm{d}t \quad (4.2)$$

(où l'on a utilisé l'équation de bilan d'énergie $C_p \partial_t T + \nabla \cdot \mathbf{J} = Q[T]$) en imposant les contraintes

$$\mathcal{C}(t) = \int_V \nabla \cdot \mathbf{J} \mathrm{d}\mathbf{r} = \int_V (-C_p \partial_t T + Q[T]) \mathrm{d}\mathbf{r} = 0 \quad \forall t \in [0 : \mathcal{T}]. \quad (4.3)$$

FIGURE 4.1 – Vue simplifiée des processus influençant les variations de température à l'échelle saisonnière et illustration des variations de température et d'insolation idéalisées (unités arbitraires).



Le problème variationnel à résoudre s'écrit donc

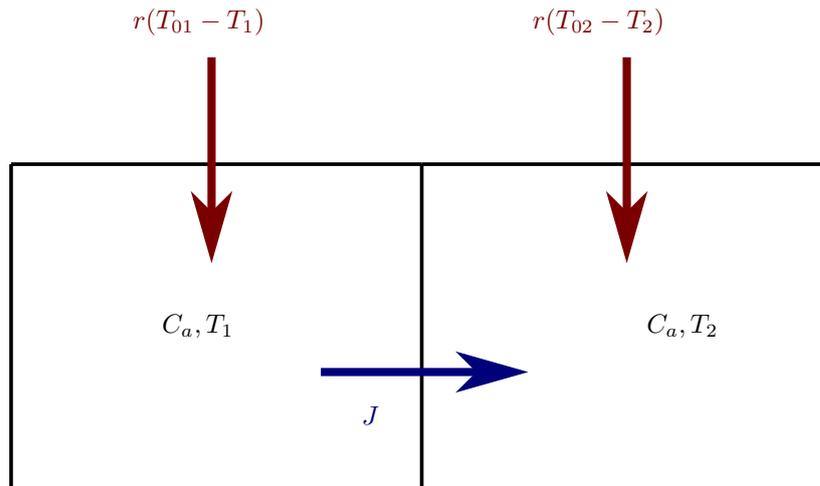
$$\max_T \left\{ \Sigma = \int_0^{\mathcal{T}} \int_V \frac{C_p \partial_t T - Q[T]}{T} \, d\mathbf{r} \, dt \left| \mathcal{C}(t) = \int_V (-C_p \partial_t T + Q[T]) \, d\mathbf{r} = 0 \quad \forall t \in [0, \mathcal{T}] \right. \right\} \quad (4.4)$$

Dans le cas de l'étude d'un cycle, on cherche une solution périodique en temps. Pour la résolution numérique, les intégrales sont approximées par des sommes, et la dérivée temporelle $\partial_t T$ est estimée par une différence finie (par exemple le schéma centré $\partial_t T \simeq \frac{T(t+dt) - T(t-dt)}{2dt}$). On note qu'il y a autant d'équations de contraintes que de pas de temps. Cela peut allonger significativement le temps de calcul.

Le problème

Dans [Paillard and Herbert, 2013], on considère le modèle conceptuel à deux boîtes décrit sur la figure 4.2. Lorsque les forçages entre les deux boîtes sont en opposition de phase, chacune des boîtes peut être assimilée à un hémisphère : il s'agit donc du modèle le plus simple pour illustrer l'effet du forçage radiatif saisonnier à l'échelle globale. Dans ce modèle, il n'y a pas de boîtes pour représenter le sous-sol qui stocke l'énergie via des flux non-turbulents. On observe qu'il n'y a pas de déphasage entre le forçage et la réponse en température, quelle que soit la capacité calorifique des boîtes, ce qui n'est pas réaliste. Ces résultats montrent que l'hypothèse MEP ne permet pas de représenter le stockage d'énergie, qui doit être représenté séparément. Ici, on se focalisera sur ce problème. Aussi, on ne représentera pas le transport d'énergie comme au chapitre précédent et on maximisera la production d'entropie par rapport aux températures.

FIGURE 4.2 – Le modèle à deux boîtes considéré dans [Paillard and Herbert, 2013]. Les flux en rouge représentent le forçage tandis que le flux J représente la convection, optimisée par MEP. Les deux boîtes ont la même capacité calorifique C_a . La boîte 1 (2) est à la température T_1 (T_2). Le forçage est représenté par une force de rappel linéaire vers l'équilibre radiatif T_{01} (T_{02}) avec un coefficient de rappel r (en $W.K^{-1}$).



4.2 Le modèle conceptuel

Compte tenu du problème soulevé à la section précédente, un premier objectif est de comprendre si l'on peut utiliser l'hypothèse MEP dans un problème dépendant du temps. Si oui, comment cette hypothèse peut être utilisée. Évidemment, tous les processus importants ne peuvent pas être représentés avec l'hypothèse MEP, qui a été introduite pour représenter les processus rapides (turbulents), qui ne sont pas calculables explicitement. Cette hypothèse paraît cependant peu applicable à des processus lents (non-turbulents), comme le stockage d'énergie dans le sous-sol, qui est de plus calculable explicitement. On introduit donc deux boîtes supplémentaires au modèle de [Paillard and Herbert, 2013] pour représenter le sous-sol, qui stockent de l'énergie via des flux diffusifs (non représenté par l'hypothèse MEP). Il s'agit du seul ajout par rapport au modèle de [Paillard and Herbert, 2013].

Description et équations de bilan d'énergie

Le modèle est représenté en figure 4.3. Il est constitué de deux colonnes (pouvant être associées aux hémisphères dans le cas d'un forçage symétrique) avec deux couches. La couche supérieure représente la partie du système qui est chauffée radiativement (l'atmosphère et la couche de surface si on compare à la figure 4.1) par les flux R_i , $i = 1, 2$. Il y a un flux d'énergie interne entre les deux boîtes supérieures J qui est optimisé par MEP. On note les températures des boîtes supérieures T_{ui} , $i = 1, 2$ et leur capacité calorifique C_u (en $J.K^{-1}$). Les deux boîtes inférieures représentent des réservoirs d'énergie (le sous-sol si on compare à la figure 4.1) qui stocke/relache de l'énergie par conduction D_i , $i = 1, 2$. On note leurs températures T_{bi} , $i = 1, 2$ et leur capacité calorifique C_b (en $J.K^{-1}$). Le forçage radiatif est le même que pour le modèle à deux boîtes :

$$R_i = r (T_{0i} - T_{ui}) \quad i = 1, 2, \quad (4.5)$$

où r est une quantité extensive (en $W.K^{-1}$). La conduction est représentée par

$$D_i = k (T_{bi} - T_{ui}) \quad i = 1, 2, \quad (4.6)$$

où k est aussi une quantité extensive (en $W.K^{-1}$). Les équations de bilan d'énergie pour les 4 boîtes s'écrivent

$$C_u \dot{T}_{u1} = -J + R_1 + D_1 = -J + r (T_{01} - T_{u1}) + k(T_{b1} - T_{u1}), \quad (4.7)$$

$$C_u \dot{T}_{u2} = +J + R_2 + D_2 = +J + r (T_{02} - T_{u2}) + k(T_{b2} - T_{u2}), \quad (4.8)$$

$$C_b \dot{T}_{b1} = -D_1 = -k(T_{b1} - T_{u1}), \quad (4.9)$$

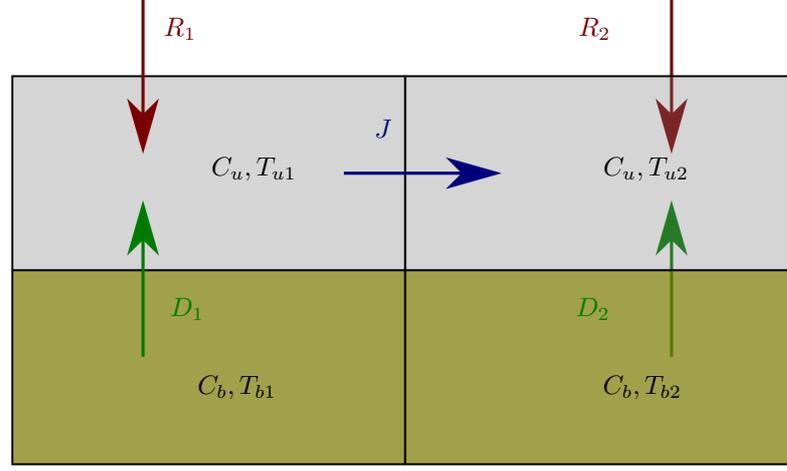
$$C_b \dot{T}_{b2} = -D_2 = -k(T_{b2} - T_{u2}). \quad (4.10)$$

Dans la suite, on appellera T_u la température de l'atmosphère et T_b la température du sous-sol pour discuter les résultats de façon plus intuitive (i.e. plus en lien avec le problème du cycle saisonnier).

Le problème MEP

Dans le problème (4.4), on considère l'ensemble du champ de température comme variable d'optimisation. Cependant, cela paraît assez peu vraisemblable : la température du sous-sol influence le flux turbulent de façon indirecte seulement. Cela suggère d'optimiser la production d'entropie

FIGURE 4.3 – Notre modèle conceptuel du cycle saisonnier.



associée aux processus turbulents (i.e. le flux d'énergie F), uniquement par rapport aux variables qui interviennent directement dans ces processus (i.e. les températures atmosphériques). On considère donc plutôt le problème d'optimisation suivant :

$$\max_{T_{u1}, T_{u2}} \left\{ \Sigma = \int_0^{\mathcal{T}} \left(\frac{C_u \dot{T}_1 - R_1 - D_1}{T_{u1}} + \frac{C_u \dot{T}_2 - R_2 - D_2}{T_{u2}} \right) dt \left| \begin{array}{l} \mathcal{C}(t) = C_u(\dot{T}_1 + \dot{T}_2) - R_1 - R_2 - D_1 - D_2 = 0 \quad \forall t \in [0, \mathcal{T}] \end{array} \right. \right\} \quad (4.11)$$

Il est résolu par la méthode des multiplicateurs de Lagrange (en supposant que le problème dual est équivalent au problème initial). On cherche donc les points critiques de la fonctionnelle

$$\mathcal{A}[T_{u1}, T_{u2}, \beta] \equiv \Sigma - \int_0^{\mathcal{T}} \beta(t) \mathcal{C}(t) dt \equiv \int_0^{\mathcal{T}} \mathcal{L}(T_{u1}, \dot{T}_{u1}, T_{u2}, \dot{T}_{u2}, \beta) dt \quad (4.12)$$

où

$$\mathcal{L}(T_{u1}, \dot{T}_{u1}, T_{u2}, \dot{T}_{u2}, \beta) = \sum_{i=1,2} (C_u \dot{T}_i - R_i - D_i) \left(\frac{1}{T_{ui}} - \beta \right) \quad (4.13)$$

est le Lagrangien du problème et β le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte (qui est une fonction du temps). Il est connu que la solution de ce problème satisfait les équations d'Euler-Lagrange (voir par exemple [Basdevant, 2010])

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial T_{ui}} = \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{T}_{ui}} \right], \quad i = 1, 2, \quad (4.14)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \beta} = 0. \quad (4.15)$$

Après quelques lignes de calcul, on obtient les équations d'évolution

$$C_u \dot{\beta} - (r + k)\beta - \frac{rT_{0i} + kT_{bi}}{T_{ui}^2} = 0 \quad i = 1, 2, \quad (4.16)$$

$$\sum_{i=1}^2 \{C_u \dot{T}_{ui} - r(T_{0i} - T_{ui}) - k(T_{bi} - T_{ui})\} = 0, \quad (4.17)$$

$$C_b \dot{T}_{bi} = -k(T_{bi} - T_{ui}) \quad i = 1, 2, \quad (4.18)$$

où l'on a ajouté les équations d'évolution des températures du sous-sol pour clore le système d'équations.

Résolution numérique

Les équations d'évolution (4.16-4.18) sont des équations différentielles ordinaires non-linéaires. À notre connaissance, elles n'ont pas de solution analytique. Nous optons donc pour une résolution numérique, qui est décrite dans l'annexe de l'article donné à la section 4.4. Le code est écrit dans le langage Python. Il permet de varier le forçage T_{0i} , $i = 1, 2$ et les paramètres de contrôle (4.20) donnés dans la suite.

4.3 Résultats

Effet du stockage d'énergie

Pour comprendre l'effet de l'ajout du stockage diffusif, il est utile d'exprimer les températures atmosphériques en fonction des autres variables. À partir de l'équation (4.16), on obtient

$$T_{ui}(t) = \sqrt{\frac{rT_{0i}(t) + kT_{bi}(t)}{C_u \dot{\beta}(t) - (r + k)\beta(t)}} \equiv \alpha(t) \sqrt{T_{0i}(t) + \frac{k}{r} T_{bi}(t)}. \quad (4.19)$$

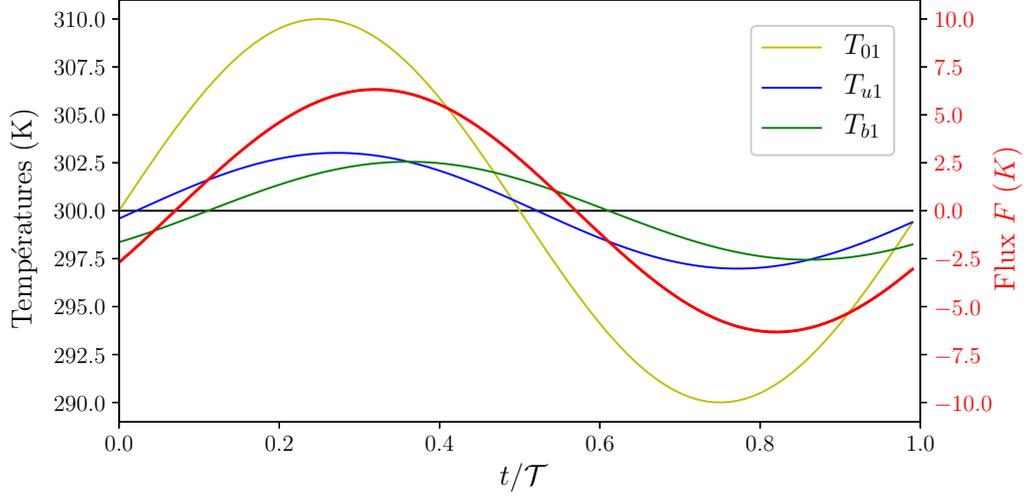
où $\alpha(t) \equiv \sqrt{r} / \sqrt{C_u \dot{\beta} - (r + k)\beta}$. Dans le cas où l'on n'a pas de stockage diffusif ($k = 0$), $T_{ui}(t) = \alpha(t) \sqrt{T_{0i}}$. Cela signifie que la température atmosphérique est reliée au forçage par une modulation globale (i.e. qui ne dépend pas de la colonne). Cette solution ne correspond pas à un "vrai" déphasage local lié au stockage d'énergie. Dans le cas où l'on a un stockage diffusif ($k \neq 0$), la réponse en température est toujours non locale, à cause, de la modulation globale. Cependant, on a naturellement introduit un "vrai" déphasage local, car la température atmosphérique est maintenant reliée à la température du sous-sol, qui sera déphasée à cause de la relation de diffusion (4.18). On s'attend à ce que la température atmosphérique soit en phase avec le forçage lorsque $k \ll r$. Au contraire, elle sera en phase avec la température du sous-sol si $r \ll k$.

Etude de l'influence des paramètres de contrôle

Le problème dépend des capacités calorifiques C_u et C_b et de la constante k . Pour un forçage périodique, le problème dépend également de la période du cycle \mathcal{T} , de la température d'équilibre radiative moyenne $\langle T_0 \rangle$, de son amplitude ΔT_0 et de la constante r . Ces 7 quantités font intervenir 4 dimensions (masse, temps, longueur et température). L'analyse dimensionnelle prédit donc que le problème ne dépend que de $7 - 4 = 3$ quantités sans dimension. On choisit les nombres suivant

$$\mathcal{N}_b = \frac{C_b}{k\mathcal{T}}, \quad \mathcal{N}_r = \frac{C_u}{r\mathcal{T}} \quad \text{et} \quad \mathcal{N}_k = \frac{C_u}{k\mathcal{T}}. \quad (4.20)$$

FIGURE 4.4 – Évolution des températures dans la première colonne et de F durant le cycle pour $\mathcal{N}_b = \mathcal{N}_r = \mathcal{N}_k = 0.1$, $T_{01} = 300 + 10 \sin(\frac{2\pi}{\tau}t)$ K et $T_{02} = 300 - 10 \sin(\frac{2\pi}{\tau}t)$ K.



Ils représentent respectivement les temps de chauffage des boîtes de sous-sol par diffusion, le temps de chauffage des boîtes atmosphériques par rayonnement, et le temps de chauffage des boîtes atmosphériques par diffusion (divisés pas la période du cycle). Typiquement, pour des conditions réelles, on a $\mathcal{N}_r \ll 1$ (i.e. le temps de chauffage radiatif de l'atmosphère et de la surface est faible par rapport à une durée d'un an). La capacité calorifique du sous-sol étant bien plus importante que celle de l'atmosphère, on a également $\mathcal{N}_k \ll \mathcal{N}_b$ pour des conditions climatiques "réalistes".

Les équations d'évolution (4.16-4.18) peuvent alors se réécrire

$$\dot{\beta} - \left(\frac{1}{\mathcal{N}_r} + \frac{1}{\mathcal{N}_k} \right) \beta - \frac{\frac{1}{\mathcal{N}_r} T_{0i} + \frac{1}{\mathcal{N}_k} T_{bi}}{T_{ui}^2} = 0 \quad i = 1, 2, \quad (4.21)$$

$$\sum_{i=1}^2 \left\{ \dot{T}_{ui} - \frac{1}{\mathcal{N}_r} (T_{0i} - T_{ui}) - \frac{1}{\mathcal{N}_k} (T_{bi} - T_{ui}) \right\} = 0, \quad (4.22)$$

$$\dot{T}_{bi} = -\frac{1}{\mathcal{N}_b} (T_{bi} - T_{ui}) \quad i = 1, 2, \quad (4.23)$$

où toutes les quantités ont été adimensionnées sauf les températures (i.e. elles sont toujours exprimées en K) et β (en K^{-1}). En plus de l'évolution des températures, il est utile de regarder l'évolution du flux d'énergie. Pour cela, on introduit la quantité

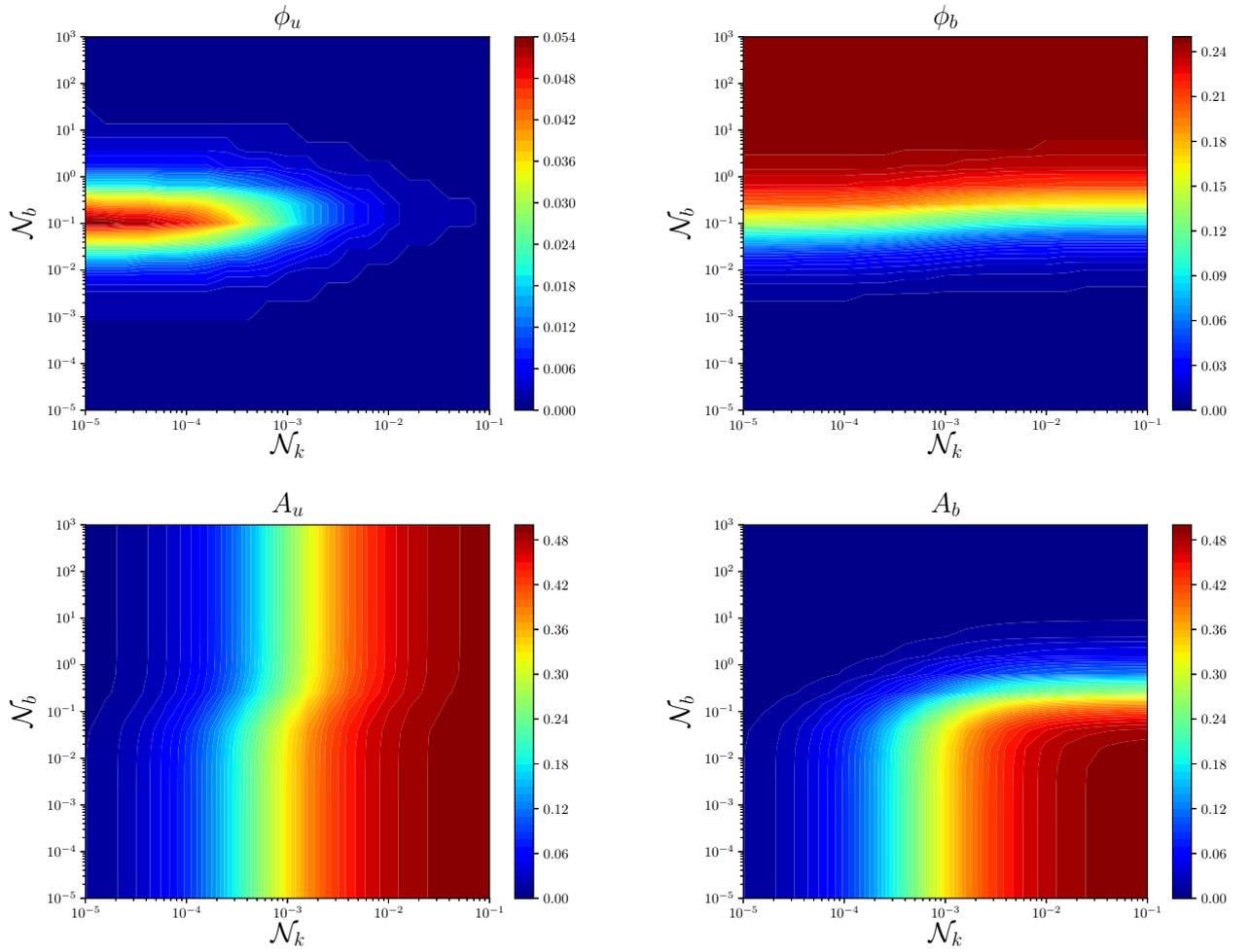
$$F = \frac{\mathcal{T}J}{C_u} = \frac{1}{\mathcal{N}_r} (T_{01} - T_{u1}) + \frac{1}{\mathcal{N}_k} (T_{b1} - T_{u1}) - \dot{T}_{u1}, \quad (4.24)$$

qui représente l'élévation de température d'une boîte atmosphérique si on la chauffe avec un flux d'énergie J durant un cycle. C'est une mesure du flux d'énergie turbulent qui a la dimension d'une température (en K).

On présente ici les résultats dans le cas d'un forçage antisymétrique $T_{01} = 300 + 10 \sin(\frac{2\pi}{\tau}t)$ K et $T_{02} = 300 - 10 \sin(\frac{2\pi}{\tau}t)$ K. La réponse en température est alors aussi antisymétrique par rapport

à $T = 300 \text{ K}$. L'évolution des températures et de F pour une simulation typique est montrée en figure 4.4. On observe que F n'est pas en phase avec la température atmosphérique, ce qui se traduit par une production d'entropie qui est parfois négative (le flux d'énergie va de la boîte froide vers la boîte chaude). On définit le déphasage atmosphérique ϕ_u (du sous-sol ϕ_b) comme la distance entre le maximum de T_{u1} (T_{b1}) et le maximum de T_{01} . Le gain atmosphérique A_u (du sous-sol A_b) est le rapport entre l'amplitude de T_{u1} (T_{b1}) et de l'amplitude de T_{01} . Les observables ϕ_u , ϕ_b , A_u , et A_b sont représentées sur la figure 4.5 pour une gamme de valeurs des paramètres \mathcal{N}_k et \mathcal{N}_b et $\mathcal{N}_r = 10^{-4}$ (i.e. un temps de chauffage atmosphérique de quelques heures).

FIGURE 4.5 – Influence des paramètres \mathcal{N}_k et \mathcal{N}_b sur le déphasage atmosphérique ϕ_u , le déphasage du sous-sol ϕ_b , le gain atmosphérique A_u et le gain du sous-sol A_b pour $\mathcal{N}_r = 10^{-4}$, $T_{01} = 300 + 10 \sin(\frac{2\pi}{\tau}t) \text{ K}$ et $T_{02} = 300 - 10 \sin(\frac{2\pi}{\tau}t) \text{ K}$.



On peut distinguer quatre régimes limites :

- $\mathcal{N}_b \ll 1$: Le temps de chauffage du sous-sol est faible par rapport à la durée du cycle. Autrement dit, le sous-sol a peu d'inertie thermique. On observe alors que la température du sous-sol est presque égale à celle de l'atmosphère ($\phi_u \simeq \phi_b$ et $A_u \simeq A_b$). Comme

- $\mathcal{N}_r \ll 1$, le système est en phase avec le forçage ($\phi_u \simeq \phi_b \simeq 0$);
- $\mathcal{N}_b \gg 1$: Le sous-sol a une grande inertie thermique. On observe alors que la température du sous-sol varie peu au cours du cycle ($A_b \simeq 0$) et est très déphasée par rapport au forçage. L'atmosphère subit un effet tampon du sous-sol d'autant plus important. On observe que A_u est décroissant avec \mathcal{N}_b , avec une zone de transition autour de $\mathcal{N}_b \simeq 10^{-1}$ entre les deux régimes $\mathcal{N}_b \ll 1$ et $\mathcal{N}_b \gg 1$;
 - $\mathcal{N}_b \in [\sim 10^{-3}; \sim 10^1]$ et $\mathcal{N}_k \gg \mathcal{N}_r = 10^{-4}$: Le temps de chauffage par diffusion est grand devant le temps de chauffage par rayonnement ($\mathcal{N}_k/\mathcal{N}_r = r/k \gg 1$). L'atmosphère est donc plus influencée par le chauffage radiatif (A_u élevé et ϕ_u faible);
 - $\mathcal{N}_b \in [\sim 10^{-3}; \sim 10^1]$ et $\mathcal{N}_k \ll \mathcal{N}_r = 10^{-4}$: Le temps de chauffage par diffusion est faible devant le temps de chauffage par rayonnement ($\mathcal{N}_k/\mathcal{N}_r = r/k \ll 1$). L'atmosphère est plus influencée par le sous-sol que par le chauffage radiatif (A_u faible et ϕ_u plus important). C'est naturellement dans ce régime que l'on observe les déphasages atmosphériques les plus importants, jusqu'à 5% ($\simeq 18$ jours pour un cycle saisonnier) quand $\mathcal{N}_b = 10^{-1} \gg \mathcal{N}_k = 10^{-5}$;
- Cette étude fait l'objet d'un article publié dans le journal Entropy.

4.4 Article

Article

A Maximum Entropy Production Hypothesis for Time Varying Climate Problems: Illustration on a Conceptual Model for the Seasonal Cycle

Vincent Labarre ^{1,2,*}, Didier Paillard ^{1,*} and Bérengère Dubrulle ²

¹ Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement, UMR 8212 CEA-CNRS-UVSQ, IPSL and Université Paris-Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

² SPEC, CEA, CNRS, Université Paris-Saclay, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France; berengere.dubrulle@cea.fr

* Correspondence: vincent.labarre@lsce.ipsl.fr (V.L.); didier.paillard@lsce.ipsl.fr (D.P.)

† These authors contributed equally to this work.

Received: 27 July 2020; Accepted: 28 August 2020; Published: 31 August 2020



Abstract: We investigated the applicability of the maximum entropy production hypothesis to time-varying problems, in particular, the seasonal cycle using a conceptual model. Contrarily to existing models, only the advective part of the energy fluxes is optimized, while conductive energy fluxes that store energy in the ground are represented by a diffusive law. We observed that this distinction between energy fluxes allows for a more realistic response of the system. In particular, a lag is naturally observed for the ground temperature. This study therefore shows that not all energy fluxes should be optimized in energy balance models using the maximum entropy production hypothesis, but only the fast convective (turbulent) part.

Keywords: maximum entropy production; energy balance model; closure hypothesis; seasonal cycle

1. Introduction

Time varying problems are ubiquitous in climate modeling. Indeed, the amount of radiative energy coming from the Sun, which is the dominant contribution to the energy budget of the Earth, depends on time. The variations of this radiative forcing occur on different time scales (from hours for the diurnal cycle to several thousand years for the variations of orbital parameters). To predict the time evolutions of relevant variables (temperature, humidity, wind, . . .) around the globe, one must consider how the different components of the climate system respond to this forcing, and how these components interact with each other.

The representation of the diurnal and seasonal variations of surface temperature in climate models depends on many processes. The type of surface (ocean or land with more or less vegetation) influences the sensible and latent energy fluxes between the ground and the atmosphere. For the ocean, the radiation that penetrates over a depth of $\simeq 70$ m under the surface allows the ocean to buffer the radiative energy input during daytime and more (days, weeks or months). This is not the case for land because of its opacity. In addition, change of surface type naturally modifies its heat capacity and the kind of energy transfers that can occur in the medium. For example, the heat capacity is more important for water than for ground, and convection usually does not occur in the ground. Overall, change in surface type has an important impact on the mass (water vapor and CO₂), momentum (by friction) and energy (sensible and latent heat) exchanges between ground and atmosphere. Obviously, the water and energy budget at the surface, and so the representation of the turbulent sensible and latent heat fluxes, is of particular importance to describe these phenomena.

Most of global climate models use parameterizations to represent sub-grid processes like turbulent fluxes. For example, one of the most popular representations of surface fluxes relies on semi-empirical relations called aerodynamic bulk formulas. They are based on the application of the similitude theory on the atmospheric boundary layer [1]. Such relations aim to predict the relation between the turbulent fluxes between ground and atmosphere as a function of the wind and differences of humidity and temperature. The applicability of these formulas and the estimations of the empirical coefficients have been the subject of numerous studies [2–6]. The issues that are raised by the use of aerodynamic formulas are the same than for the closures used for the representations of turbulent fluxes in the atmosphere and ocean [7,8]. Namely, the applicability of these formulas to various conditions is still an open question. For example, the coefficients appearing in the simplest sensible heat flux parameterizations depend on the stability of the atmosphere. This issue has been addressed by using conditional formulas [9] or by adding more free parameters to fit experimental data over a wider range of conditions [10]. Global climate models are used to perform many experiments such as sensitivity of surface temperature tests [11], but usually fail to represent the last trends of the seasonal cycle [12].

The question of the phase and amplitude of the ground surface temperature during the seasonal (or diurnal) cycle can also be investigated with energy balance models. Such models can be useful to explore how local processes may cause variability in the phase and amplitude of the seasonal cycle of surface temperature [12]. For example, a model based only on a simplified energy budget and a maximum power closure hypothesis to fix the surface energy flux, has been constructed to explain the difference in sensitivity over ocean and land [13]. The maximum power closure hypothesis takes the form of a constrained variational problem that does not involve free parameters. It belongs to a class of thermodynamic optimality hypotheses used in various contexts [14]. Similarly, some climate models have been constructed on the maximum entropy production hypothesis or “principle” (hereafter MEP) [15–18] (see also the discussion [19] and the reviews [20,21]). All of them are based on the energy budget equation, and MEP appears as a closure hypothesis to determine the energy fluxes.

The statute of the MEP hypothesis is still not clear. It is argued in [22] that MEP is an inference. Other studies suggest that among several steady-states, the most stable is the one of maximum entropy production. This fact is observed for example in numerical simulation of the oceanic circulation [23] or simple bistable chemical system [24]. In spite of the lack of strong physical understanding, MEP models give correct estimations for the meridional atmospheric energy fluxes and temperature profiles in the stationary state [15].

In the context of time-varying problems, it has been observed in [25] that the MEP hypothesis could not reproduce a lag between the forcing and the response in the case of an antisymmetric forcing, which is quite unexpected for a system with thermal inertia. The discussion [26] suggested that there is a link between the maximum entropy production hypothesis and the minimum mixing time of a nonequilibrium system. If true, this statement implies that the MEP hypothesis should not be used to represent slow dynamics, but only the fast turbulent mixing.

Typically, the seasonal cycle is characterized by the amplitude and phase of the periodic surface temperature (relative to the periodic local solar insolation). The difference between the temperature and local insolation phases is called the lag, and the ratio of the amplitudes is the gain [12]. We propose a conceptual model of four boxes where the two upper boxes are forced radiatively, and energy is exchanged with a turbulent energy flux that is optimized with MEP. These two boxes are connected to buffers (bottom boxes) that roughly represent ground and store/release energy by conduction. Interestingly, the lag of the upper box can be modified by a parameter that represents the heating time of the upper box by diffusion. This behavior was not observed in [25]. It suggests that the MEP hypothesis could be used to construct simple climate models for time varying problems if we take care to separate slow processes (energy storage) and fast processes (turbulent mixing), and apply MEP only to the last ones. The outline of the paper is as follows:

In Section 2, we present the MEP hypothesis formalism in energy balance models, and we present our conceptual model with four boxes and introduce the control parameters. In Section 3, we study

the influence of the control parameters on the temperatures and the energy fluxes represented with MEP. We discuss the results in Section 4.

2. Materials and Methods

2.1. Time Dependent MEP-Based Climate Models

A climate model is usually a discretization of atmosphere and ground (ocean or land) into boxes that exchange mass, momentum, and energy. Atmospheric models explicitly represent these exchanges, with parameterizations for the representation of the small scales' motions. Energy balance models are only based on the energy budget equation. We represent the climate system by $(H_a + H_g + 1) \times L_x \times L_y$ boxes where H_a is the number of atmospheric boxes in each vertical column, H_g is the number of ground boxes in each vertical column and $L_x \times L_y$ is the number of boxes in each horizontal layer. The position of a box is indexed by its discrete position $(x, y, z) \in [1 : L_x] \times [1 : L_y] \times [-H_g : H_a]$. The layer $z = 0$ corresponds to the thin surface of the ground that is radiatively heated/cooled.

To construct an energy balance model, one must specify the energy content as a function of the thermodynamic variables (temperature, humidity, etc.) and properties of the media (heat capacities). We also have to represent the energy fluxes between different boxes (Figure 1). Those energy fluxes are usually mainly driven by turbulent (sub-grid) motions and are difficult to represent in practice. We note:

- Atmospheric ($z > 0$) and oceanic ($z \leq 0$) energy fluxes $F_{xyz,x'y'z'}$ from box (x, y, z) to (x', y', z') (in W);
- Surface energy fluxes due to sensible and latent heat fluxes between the ground and the atmosphere Q_{xy} (in W);
- Conduction in the ground between box (x, y, z) and box $(x, y, z + 1)$ is noted $D_{xyz}[T]$ (in W). In oceans, energy transfers can also occur by turbulent mixing and oceanic circulation. We have neglected the horizontal diffusion in the ground due to the large aspect ratio of the Earth's crust.

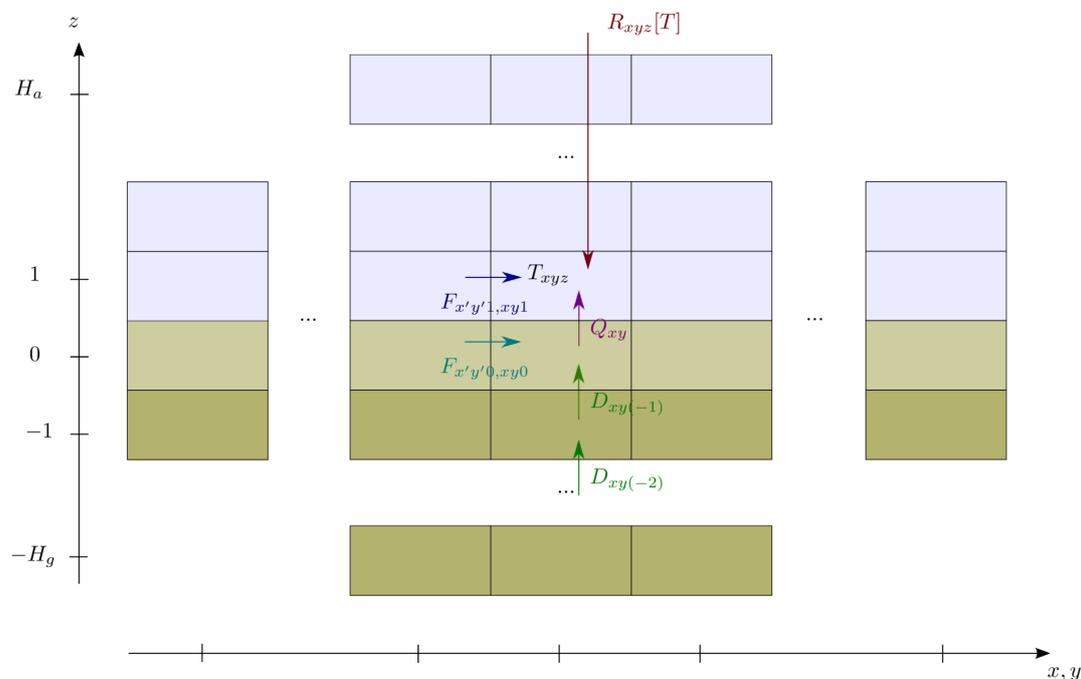


Figure 1. Schematic view of an energy balance model.

It is also necessary to model the external radiative forcing $R_{xyz}[T]$ (in W) that is a functional of the temperature T and greenhouse gases concentrations. The radiative forcing is also strongly affected by the surface albedo which depends on the kind of surface (land or ocean, type of soil/vegetation, ice cover, . . .). Physically, $R_{xyz}[T]$ represents the net radiative balance of box (x, y, z) (in W). Boxes represent different kind of material, with a more or less important size. Therefore, their properties such as heat capacities C_{xyz} (in $J \cdot K^{-1}$) vary from a box to another.

Considering only the sensible heat term in the expression of the energy of each box, the energy budget can be written as follows $\forall x, y$:

$$C_{xyz} \dot{T}_{xyz} = R_{xyz}[T] + \gamma_{xyz}, \quad z \in [2 : H_a], \tag{1}$$

$$C_{xy1} \dot{T}_{xy1} = R_{xy1}[T] + \gamma_{xy1} + Q_{xy}, \tag{2}$$

$$C_{xy0} \dot{T}_{xy0} = R_{xy0}[T] - Q_{xy} + D_{xy-1}[T], \tag{3}$$

$$C_{xyz} \dot{T}_{xyz} = -D_{xyz}[T] + D_{xy(z-1)}[T], \quad z \in [-1 : -H_g], \tag{4}$$

where we have introduced the convergence of atmospheric energy fluxes $\gamma_{xyz} = \sum_{x'y'z'} (F_{x'y'z',xyz} - F_{xyz,x'y'z'})$. In usual energy balance models, $F_{xyz,x'y'z'}$ and Q_{xy} are related to the gradient of temperature and humidity by parameterizations (sometimes only by diffusion, as in references [27–31]). Alternatively, the maximum entropy production hypothesis consists of determining γ_{xyz} and Q_{xy} by maximizing the entropy production created by the turbulent sensible heat exchanges over all the domain and time $t \in [0 : \mathcal{T}]$:

$$\sigma = \int_0^{\mathcal{T}} \left\{ \underbrace{\sum_{x,y,z \in [2:H_a]} \frac{\gamma_{xyz}}{T_{xyz}}}_{\text{upper atmosphere}} + \underbrace{\sum_{x,y} \frac{\gamma_{xy1} + Q_{xy}}{T_{xy1}}}_{\text{boundary layer}} - \underbrace{\sum_{x,y} \frac{Q_{xy}}{T_{xy0}}}_{\text{surface}} \right\} dt, \tag{5}$$

taking into account that the energy fluxes F are, by definition, internal to the atmosphere so the sum of its convergence over the domain is zero at any time:

$$\sum_{x,y,z} \gamma_{xyz} = 0 \quad \forall t \in [0 : \mathcal{T}]. \tag{6}$$

Maximum entropy production is here applied to the convergence of turbulent energy fluxes and we directly compute the temperatures. Physically, it represents an efficient heat mixing that is only constrained by the energy budget (Equations (1)–(4)) and the constraint (Equation (6)). The reason why we do not optimize the entropy production created inside the ground layer is that the heat exchange is not ensured by the fast convective processes but by slow conductive processes. For the same reason, only the variables directly involved in the turbulent entropy production are considered as variables of the optimization problem. Following [25], the solution of the problem is a critical point of the following functional:

$$A[\gamma_{xyz}, Q_{xy}, \beta] = \int_0^{\mathcal{T}} \left\{ \sum_{x,y,z \in [2:H_a]} \frac{\gamma_{xyz}}{T_{xyz}} + \sum_{x,y} \frac{\gamma_{xy1} + Q_{xy}}{T_{xy1}} - \sum_{x,y} \frac{Q_{xy}}{T_{xy0}} - \beta \sum_{x,y,z \in [1:H_a]} \gamma_{xyz} \right\} dt, \tag{7}$$

where β is the function of time that is the continuous set of Lagrange multipliers associated with the constraints (6) for all times. We express this functional in terms of the temperatures using the energy budget Equations (1)–(4) as follows:

$$A[T_{xyz}, \dot{T}_{xyz}, \beta] = \int_0^T L[T_{xyz}, \dot{T}_{xyz}, \beta] dt, \tag{8}$$

where

$$L[T_{xyz}, \dot{T}_{xyz}, \beta] = \sum_{x,y,z \in [1:H_a]} (C_{xyz} \dot{T}_{xyz} - R_{xyz}[T]) \left(\frac{1}{T_{xyz}} - \beta \right) + \sum_{x,y} (C_{xy0} \dot{T}_{xy0} - R_{xy0}[T] - D_{xy-1}[T]) \left(\frac{1}{T_{xy0}} - \beta \right) \tag{9}$$

is the Lagrangian of the optimization problem. It can be expressed in a more compact form

$$L[T_{xyz}, \dot{T}_{xyz}, \beta] = \sum_{x,y,z \in [0:H_a]} (C_{xyz} \dot{T}_{xyz} - \mathcal{F}_{xyz}[T]) \left(\frac{1}{T_{xyz}} - \beta \right) \tag{10}$$

where

$$\mathcal{F}_{xyz}[T] = R_{xyz}[T] + D_{xy(z-1)}[T] - D_{xyz}[T] \tag{11}$$

simply represents the convergence of energy fluxes that are not optimized with MEP, namely, the sum of the net radiative energy input and the convergence of conductive energy fluxes. The diffusive part of the energy transport in the atmosphere is negligible compared to the convective part so we consider that $D_{xyz} = 0 \forall x, y, z \geq 0$. We observe that the sum in the Lagrangian is performed over all boxes where there is turbulent energy fluxes (optimized with MEP). At this point, it is worth mentioning that MEP makes no distinction on the nature of the energy fluxes that are optimized (surface or atmospheric heat fluxes, sensible or latent, diffusive or convective). The solution of the optimization problem satisfies the following Euler–Lagrange equations (see, for example, [32] for an introduction to variational problems in physics):

$$\frac{\partial L}{\partial T_{xyz}} - \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{T}_{xyz}} \right] = 0 \quad \forall x, y, z \in [0 : H_a] \tag{12}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \beta} = 0. \tag{13}$$

These equations have to be complemented by the energy budget equations in the ground for $z < 0$. All in all, we then obtain the following set of equations:

$$C_{xyz} \dot{\beta} + \left(\sum_{x'y'z' \in [0, H_a]} \frac{\partial \mathcal{F}_{x'y'z'}[T]}{\partial T_{xyz}} \right) \beta + \tag{14}$$

$$\frac{\mathcal{F}_{xyz}[T]}{T_{xyz}^2} - \sum_{x'y'z' \in [0, H_a]} \left(\frac{\partial \mathcal{F}_{x'y'z'}[T]}{\partial T_{xyz}} \frac{1}{T_{x'y'z'}} \right) = 0 \quad \forall x, y, z \in [0 : H_a],$$

$$\sum_{x,y,z \in [0:H_a]} (C_{xyz} \dot{T}_{xyz} - \mathcal{F}_{xyz}[T]) = 0, \tag{15}$$

$$C_{xyz} \dot{T}_{xyz} = -D_{xyz}[T] + D_{xy(z-1)}[T], \quad \text{for } z \in [-H_g : -1]. \tag{16}$$

The only inputs of such a model are the discretization of the domain, the radiative model $R_{xyz}[T]$ and the representation of the non-turbulent (slow) heat fluxes (here the conduction in the ground).

The differences with stationary MEP are that the radiative forcing depends on time and also that the slow variables (here the ground temperatures) can influence the fast variables through (16).

One notes that it is tempting to write the continuous field theory associated with the MEP hypothesis. In this case, spatial derivatives of the temperature field can appear in the Lagrangian (i.e., $L[T_{xyz}, \dot{T}_{xyz}, \beta]$ is replaced $L[T, \partial_\mu T, \beta]$ where $\mu = (t, x, y, z)$), so the discrete sums over boxes should be replaced by an integration, and Equations (14)–(16) should be replaced by partial differential equations (PDEs). However, contrary to systems usually described by classical field theories (like elasticity or classical electromagnetism), the system is divided here into several sub-systems (atmosphere, surface, ground) which makes it necessary to use finite difference at least to represent the interfaces between sub-systems (the surface energy flux Q_{xy} for example). Thus, expressing the optimization with discrete space coordinates (i.e., dividing the system into boxes) is more pragmatic, even if less elegant. For more, in the end, the climate modeler will need to discretize the equation to solve it numerically, at least for a sufficiently realistic radiative model $R[T]$. Thus, the derivation used here is more direct when we are interested in the applications to climate modeling, even if it is less usual when one compares it to the field’s usual formalism.

2.2. Simplified Case

To analyze the physical relevance of MEP hypothesis and get insights into the effect it has on the represented variables, it is instructive to consider the model with only four boxes shown in Figure 2. It represents two columns of two layers. The upper boxes represent the part of the system that is forced radiatively (typically the troposphere and the thin ground surface) by source terms $R_i, i = 1, 2$. They can exchange energy by a “turbulent” heat flux $F = \gamma_2 = -\gamma_1$ that will be optimized with MEP. We note their temperature $T_{ui}, i = 1, 2$. The two bottom boxes represent buffers of energy that store/release energy by conduction $D_i, i = 1, 2$ to the upper boxes (typically the ground). We note their temperature $T_{bi}, i = 1, 2$. R_i, F and D_i are expressed in W . We consider a local radiative forcing (i.e., that depends only on the box temperature $R_i(T_{ui})$ and external parameters), which is, of course, over-simplistic for a true atmospheric column, but allow for useful simplifications. Furthermore, one assumes that the radiative forcing can be linearized around a temperature T_{0i} that physically represents the radiative equilibrium solution of the problem (i.e., the temperature of the upper box T_{ui} in the absence of thermal inertia, no convective fluxes $\gamma_i = 0$ and no diffusive heat fluxes $D_i = 0$). The linearization around T_{0i} assumes that the temperatures stay close to the radiative equilibrium solution. In this toy model, the atmosphere is reduced to only one layer (that even includes the surface layer). However, for models with several atmospheric layers and a realistic description of the radiative forcing, the radiative equilibrium temperatures are not the same for all the boxes. The radiative forcing then reads

$$R_i = r_i (T_{0i} - T_{ui}), \tag{17}$$

where r_i are extensive quantities (in $W \cdot K^{-1}$) proportional to the size of the box i . Conduction is represented by

$$D_i = k_i (T_{bi} - T_{ui}), \tag{18}$$

where k_i is also an extensive quantity (in $W \cdot K^{-1}$). We consider the homogeneous case where $r_i = r$ and $k_i = k$ for $i = 1, 2$. It can be shown that the Equations (14)–(16) reduce to

$$C_u \dot{\beta} - (r + k)\beta - \frac{rT_{0i} + kT_{bi}}{T_{ui}^2} = 0 \quad i = 1, 2, \tag{19}$$

$$\sum_{i=1}^2 \{C_u \dot{T}_{ui} - r(T_{0i} - T_{ui}) - k(T_{bi} - T_{ui})\} = 0, \tag{20}$$

$$C_b \dot{T}_{bi} = -k(T_{bi} - T_{ui}) \quad i = 1, 2. \tag{21}$$

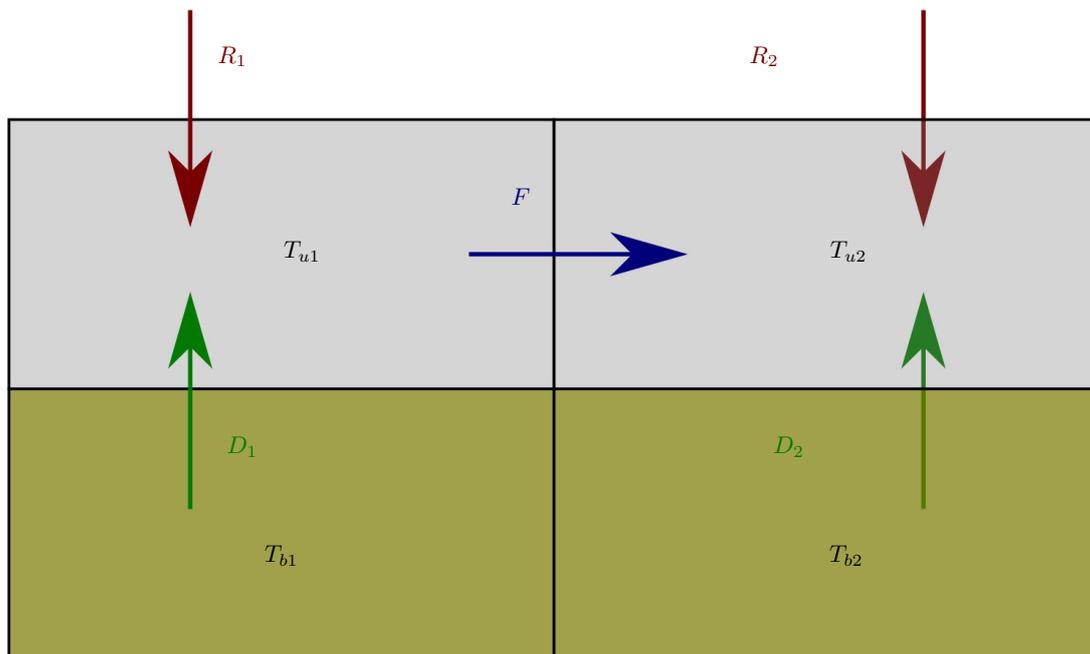


Figure 2. The four-box model.

The case $k = 0$ corresponds to the model presented in [25]. In this case, one has

$$T_{ui} = \sqrt{\frac{rT_{0i}}{C_u\dot{\beta} - r\beta}} \equiv \alpha(t)\sqrt{T_{0i}}, \tag{22}$$

such that T_{ui} is directly linked to the forcing T_{0i} , modulated by the function $\alpha(t) \equiv \sqrt{r} / \sqrt{C_u\dot{\beta} - r\beta}$. This solution does not correspond to a “true” local lag due to the local energy storage because $\sqrt{T_{0i}}$ is naturally in phase with the local forcing, and $\alpha(t)$ does not depend on i so it represents a global response (independent of the position) of the system at time t . In contrast, in the case $k \neq 0$, we have

$$T_{ui} = \sqrt{\frac{rT_{0i} + kT_{bi}}{C_u\dot{\beta} - r\beta}} \equiv \alpha(t)\sqrt{T_{0i} + \frac{k}{r}T_{bi}}. \tag{23}$$

The response is still non-local due to the use of MEP and one still have the global modulation $\alpha(t)$. Yet, we naturally have introduced a “true” lag because T_{bi} is related to T_{ui} through the diffusion Equation (21). We expect that T_{ui} will be in phase with the forcing temperature T_{0i} if $k \ll r$. On the contrary, T_{ui} will be in phase with the buffer temperature T_{bi} if $r \ll k$. For real climatic conditions, we obviously observe an intermediate situation.

To illustrate this point, we show the temperatures and the energy flux during the cycle for a typical case when $k \ll r$ and with various values of C_u in Figure 3. We observed that there was almost no lag of the upper boxes temperatures, even if we increased C_u by several orders of magnitude as in [25]. That is quite unexpected in a real system since the heat capacity naturally controls the thermal inertia of a system. It is explained here by the fact that the energy flux F which maximizes the entropy production adjusts with the change of the heat capacity such that we do not observe a lag. It means that the energy storage (and hence the induced lag) cannot be represented with the MEP hypothesis alone.

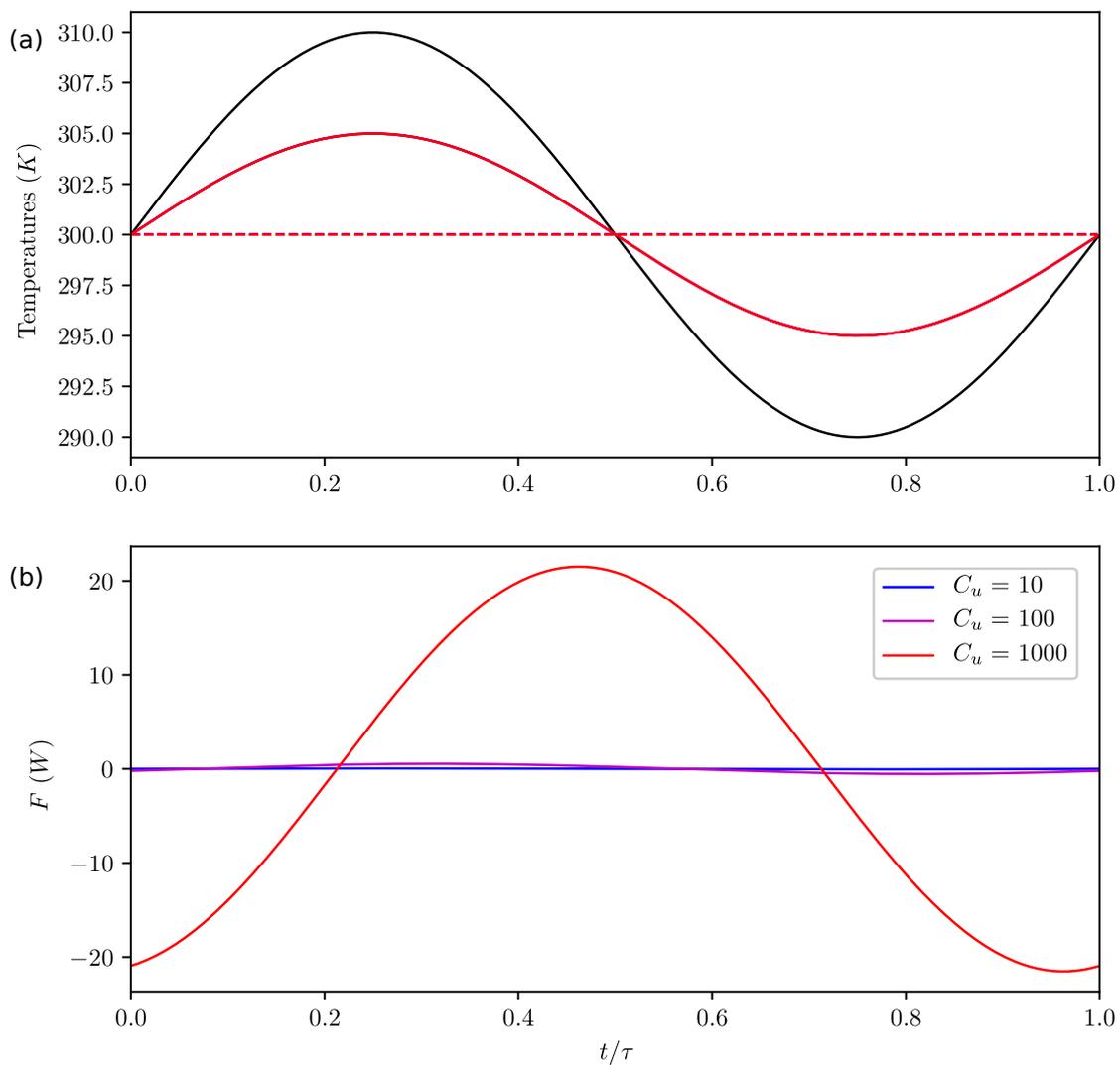


Figure 3. Evolution of temperatures in the first column T_{u1} (full lines) and T_{b1} (dashed lines); (a) and energy flux F (b) during the cycle for $C_b = 1000, \tau = 1000, k = 0.001 \ll r = 1.5$, various values of C_u and antisymmetric forcing temperatures: $T_{01} = 300 + 10 \sin(\frac{2\pi}{\tau}t)$ K and $T_{02} = 300 - 10 \sin(\frac{2\pi}{\tau}t)$ K. The forcing temperature T_{01} is shown in black. The temperatures in the second column T_{u2}, T_{b2} and T_{02} are the antisymmetric versions of T_{u1}, T_{b1} and T_{01} with respect to the line $T = 300$ K. We see that C_u does not influence the temperatures. Here, there is no lag between the forcing and the temperature response.

If the geometry (i.e., the sizes of the boxes) is fixed, the problem depends on the heat capacities C_u and C_b , and the conductivity k . In the context of a cyclic forcing, the radiative forcing is characterized by a typical time τ , a reference temperature $\langle T_0 \rangle$, an amplitude ΔT_0 and the constant r . These seven physical quantities depend on four physical units (mass, time, length, temperature). Through dimensional analysis, we can characterize the problem through only three dimensionless quantities. We chose the following dimensionless numbers

$$N_b = \frac{C_b}{k\tau}, \quad N_r = \frac{C_u}{r\tau} \quad \text{and} \quad N_k = \frac{C_u}{k\tau}, \tag{24}$$

which respectively represent the dimensionless (divided by the cycle's time τ) inertial thermal time scale by conduction in the bottom box, the inertial thermal time scale by radiative forcing in the upper box and the inertial thermal time scale by conduction in the upper box. These parameters control the relative amplitude and lag between temperatures. τN_b is the typical lag of the ground (\approx two weeks

to two months). τN_r is the typical lag of the atmospheric response and the radiative forcing ($\ll 1$ year). N_k controls the influence of the bottom on the top by diffusion. Then, the evolution equations for our model can be written as

$$\dot{\beta} - \left(\frac{1}{N_r} + \frac{1}{N_k} \right) \beta - \frac{\frac{1}{N_r} T_{0i} + \frac{1}{N_k} T_{bi}}{T_{ui}^2} = 0 \quad i = 1, 2, \quad (25)$$

$$\sum_{i=1}^2 \left\{ \dot{T}_{ui} - \frac{1}{N_r} (T_{0i} - T_{ui}) - \frac{1}{N_k} (T_{bi} - T_{ui}) \right\} = 0, \quad (26)$$

$$\dot{T}_{bi} = -\frac{1}{N_b} (T_{bi} - T_{ui}) \quad i = 1, 2. \quad (27)$$

where the time has been scaled by τ . The temperatures have not been scaled (i.e., they are still expressed in K) for simplicity. This set of equation has no explicit solution but it can be solved numerically using the Newton's method (Appendix A).

We studied the evolution of the temperatures' gains and lags with the variations of the control parameters N_b , N_r and N_k . These quantities depend mainly on the heat capacities (and so the dimensionless parameters introduced above). It is also useful to track the evolution of the energy flux between the upper boxes. For this, we introduce the quantity

$$q = \frac{\tau F}{C_u} = \frac{1}{N_r} (T_{01} - T_{u1}) + \frac{1}{N_k} (T_{b1} - T_{u1}) - \dot{T}_{u1}, \quad (28)$$

that can be tracked as a diagnostic variable. It represents the temperature elevation of an upper box due to an energy input τF .

3. Results

We focused on the case of an antisymmetric forcing: $T_{01} = 300 + 10 \sin(\frac{2\pi}{\tau} t)$ K and $T_{02} = 300 - 10 \sin(\frac{2\pi}{\tau} t)$ K, and varied the control parameters N_b , N_r and N_k to study their influences. In this case, the two columns can be viewed as a crude representation of the two hemispheres of the Earth. Due to the symmetry, we only present the temperatures of the first column T_{u1} and T_{b1} . Indeed, T_{u2} and T_{b2} are the antisymmetric versions of T_{u1} and T_{b1} with respect to the line $T = 300$ K.

Influence of N_b : lag of ground:

We clearly observe in Figure 4a that N_b controls the lag and amplitude of the bottom temperature (with respect to the upper box). This parameter does not significantly affect the upper box temperature (Figure 4a,b) nor q . As N_b increases, the amplitude of T_b decreases and its lag increases. This is a classical behavior for diffusion. When N_b is finite (i.e., $k \neq 0$), a local lag is naturally introduced, giving a more satisfactory temperature response than in [25]. q is not influenced by N_b .

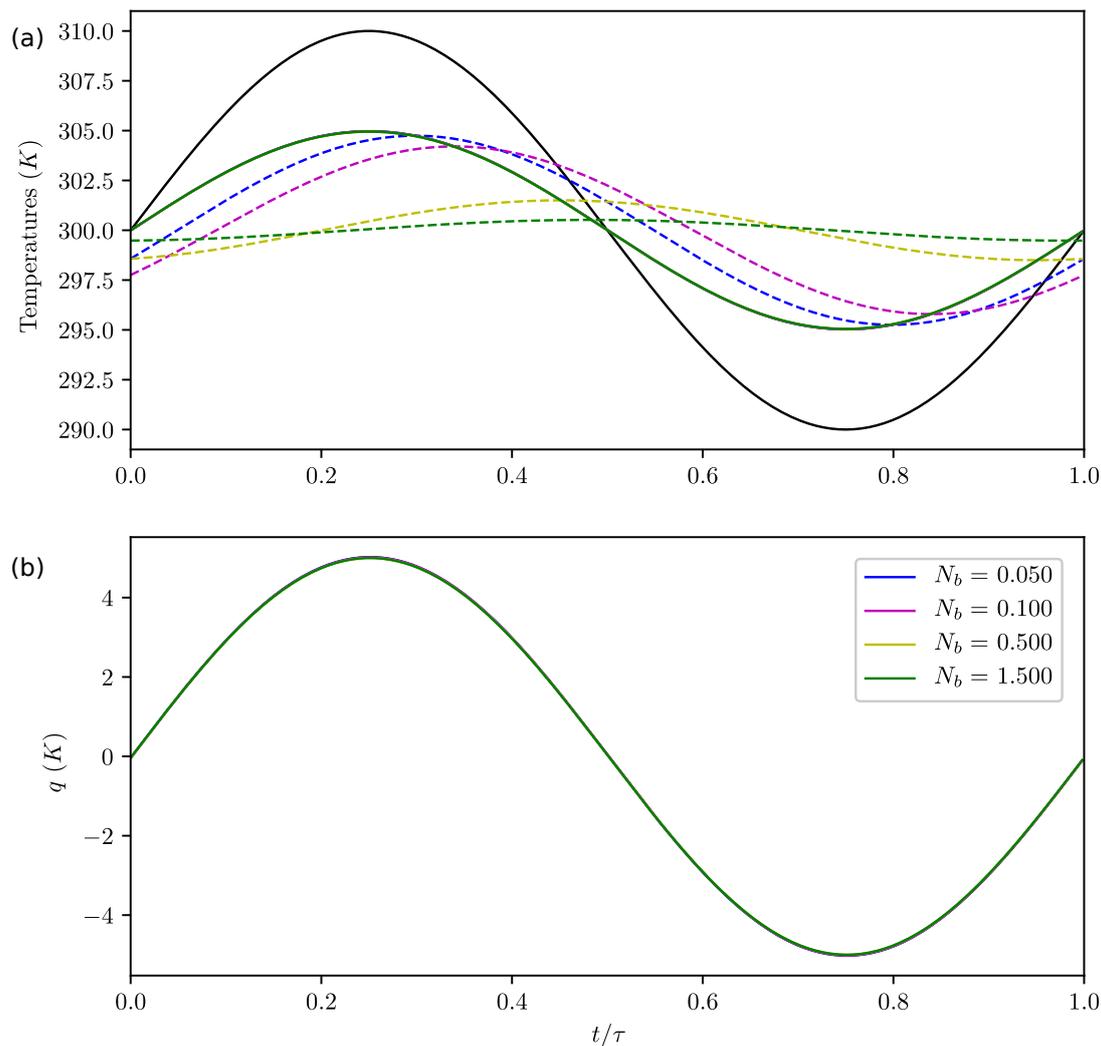


Figure 4. Evolutions of temperatures in the first column T_{u1} (full lines) and T_{b1} (dashed lines); (a) and q (b) during the cycle for varying N_b , $N_r = 0.001$, $N_k = 0.1$ and antisymmetric forcing. The forcing temperature T_{01} is shown in black. The temperatures in the second column T_{u2} , T_{b2} and T_{02} are the antisymmetrics of T_{u1} , T_{b1} and T_{01} with respect to the line $T = 300$ K. The curves $q(t)$ for different N_b cannot be distinguished.

Influence of N_k : bottom to top diffusion:

On Figure 5a, we observe that N_k influences the lag and amplitude of the upper and bottom boxes temperatures (with respect to the radiative forcing). As N_k increases, the lag decreases and the temperature amplitudes increase. That is easily understood since a high value for N_k represents a large heating time of the upper boxes by diffusion, so they are mainly following the evolution of the radiative forcing. This parameter therefore controls the influence of the bottom ("buffer") on the upper box by conduction. As explained above, it induces a "true" lag of the upper boxes. q decreases with N_k (Figure 5b).

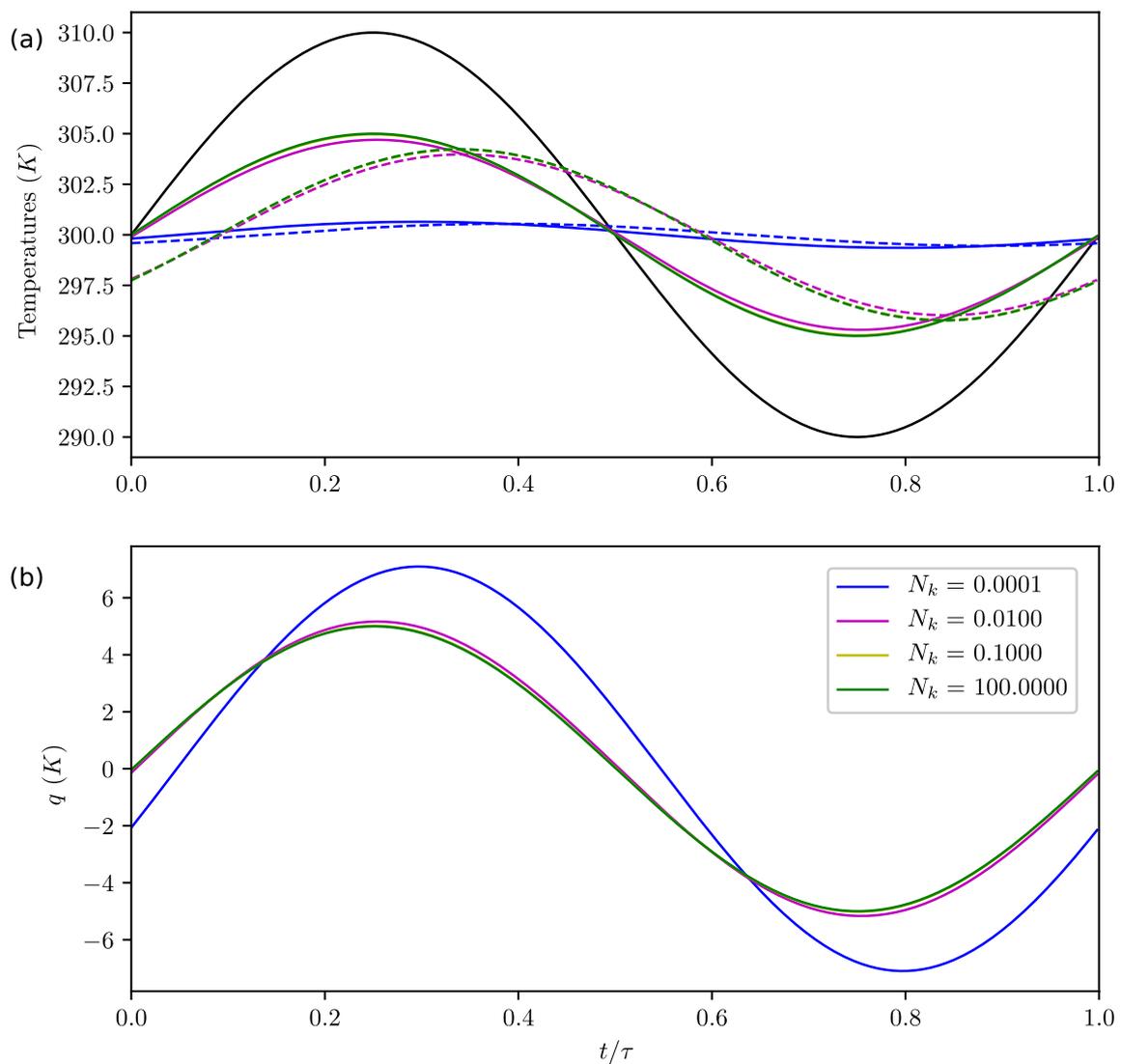


Figure 5. Same as Figure 4 for $N_b = 0.1$, $N_r = 0.001$ and various N_k .

Influence of N_r :

Results presented in Figure 6a show that N_r controls the lag and amplitude of the upper boxes' temperatures (with respect to the radiative forcing). This parameter has an impact on q (Figure 6b). As N_r increases, the amplitude and the lag of q increase.

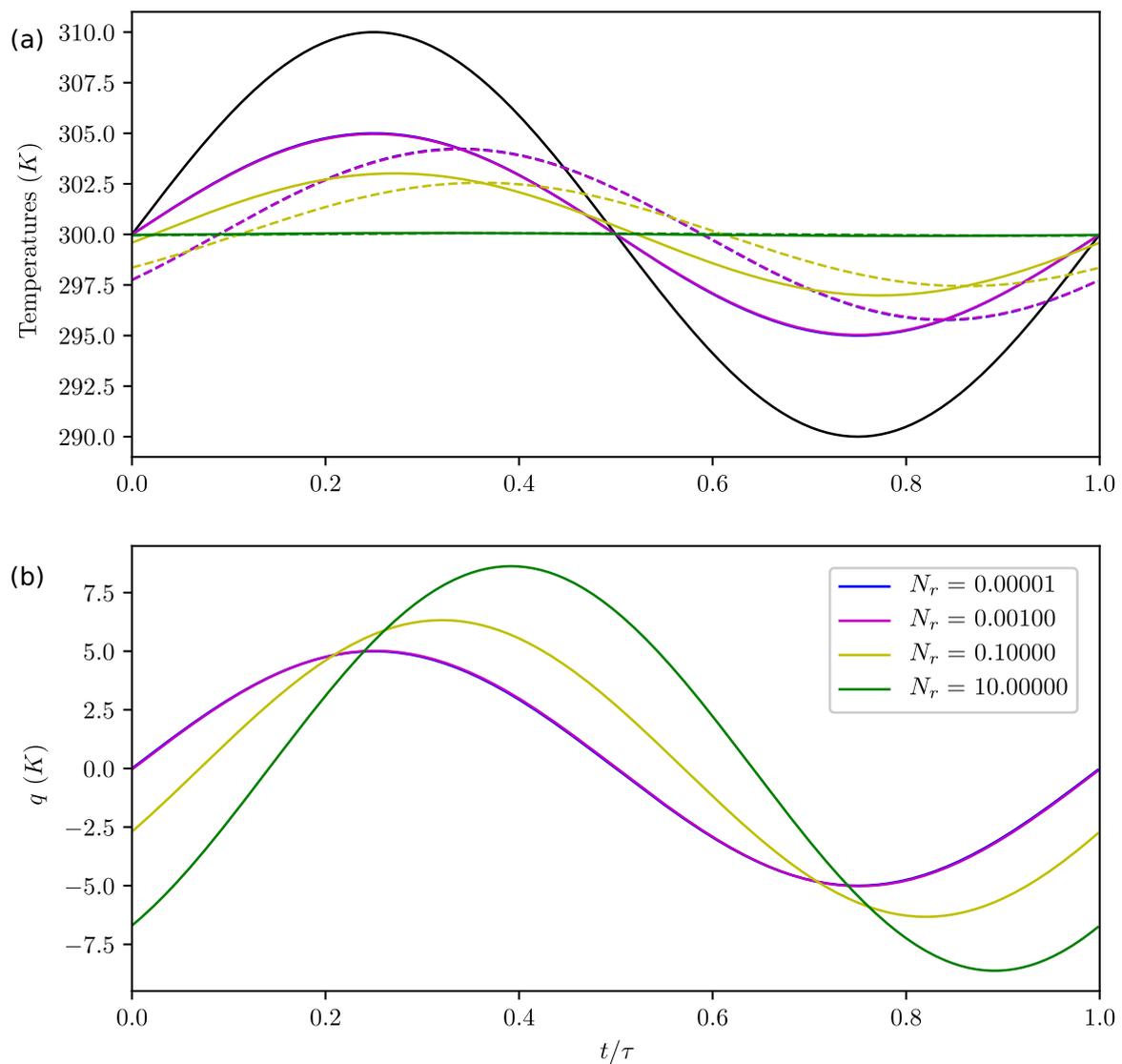


Figure 6. Same as Figure 4 for $N_b = 0.1$, various N_r and $N_k = 0.1$.

We observed that the lag of q is not the same as the lag of the upper boxes' temperatures (in other words, there is a lag between the upper boxes' temperatures and the energy flux). As a consequence, the local entropy production $F(1/T_{u1} - 1/T_{u2})$ can be negative during the cycle. It is important to note that it does not necessarily contradict the 2nd law of nonequilibrium thermodynamics which says that the local entropy production due to diffusive heat exchanges is positive, since the definition of entropy production used here encompasses the convective fluxes. We now consider the case of an asymmetric forcing $T_{01} = 290 + 10 \sin(\frac{2\pi}{\tau}t)$ K and $T_{02} = 310 + 3 \sin(\frac{2\pi}{\tau}t + \frac{\pi}{4})$ K with $N_b = 0.1$, $N_r = 0.001$ and $N_k = 0.1$. The temperatures and q are shown on Figure 7a,b. The expected lag between the upper boxes and bottom boxes is of order N_b .

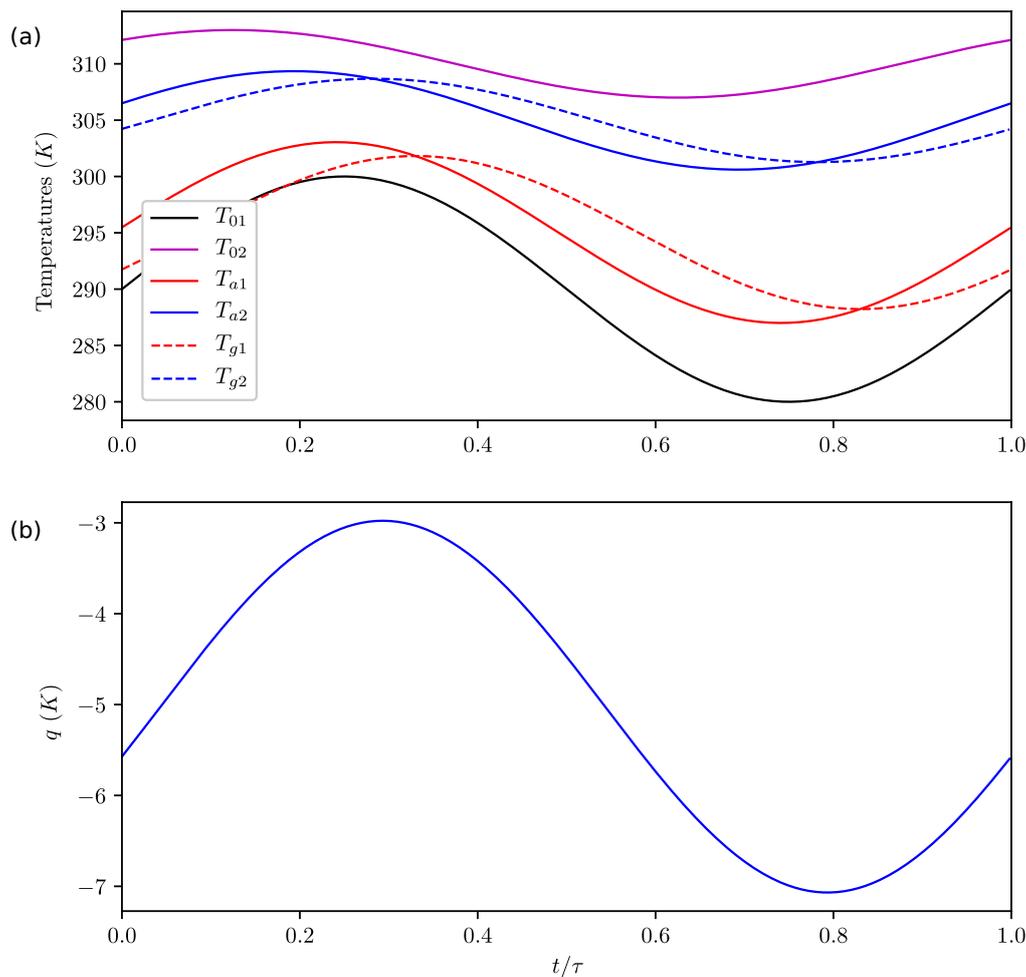


Figure 7. Evolution of temperatures (a) and q (b) during the cycle for $N_b = 0.1$, $N_r = 0.001$, $N_k = 0.1$, $T_{01} = 290 + 10 \sin(\frac{2\pi}{\tau}t)$ K and $T_{02} = 310 + 3 \sin(\frac{2\pi}{\tau}t + \frac{\pi}{4})$ K.

4. Discussion

Our model based on the MEP hypothesis has an over-simplistic representation of the Earth system. It was constructed to test the effects of the inclusion of energy storage by conduction in such models, in particular on the lag in the temperature response. The only aspect that MEP keeps about the dynamics is its ability to mix heat. Dynamical constraints have to be combined with the MEP hypothesis (see, for example, [33]) to obtain more realistic results. As discussed in [19], the relevant constraints depend on the problem, and MEP then appears as a useful closure hypothesis that fixes the remaining unknowns, namely, turbulent convective heat fluxes.

When MEP is used, we lose the precise nature and timescales of the different kinds of energy fluxes that are optimized. This means that MEP must obviously be used with caution. This study suggests that we need to have a separation of scales between the global mixing time due to fast turbulent processes, and the scale of interest (which is the period of the cycle here) in order to apply MEP to time-varying problems. This separation of scale is more or less valid for the atmospheric turbulent mixing, but is not true for the energy storage in the ground by conduction that operates on larger timescales. One notes that the separation into fast processes and slow processes recalls the quasi-static approximation, and that this separation depends on the problem considered.

An important question is why entropy production is the relevant quantity to optimize (and why not the power?). This study does not provide a definitive answer. However, one can give the following heuristic explanation: The maximum power hypothesis is interesting for “smart” systems

like living organisms (or devices) that are adapting themselves (or adapted) in order to maximize their performances (for example, the energy consumption) despite a reduced efficiency. In such systems, work (the output power) is extracted from the system. On the contrary, convection is not a “smart” adaptative (or adapted) process, but mixes energy (and other quantities) inside the atmosphere so the entropy production is certainly the most pertinent quantity to optimize in this case.

As a final remark, one notes that the maximization of the global entropy production due to turbulent convection implicitly assumes that the turbulent convection is fast enough to mix the atmosphere globally so the global entropy production can be optimized.

We therefore think that it is possible to use MEP to represent turbulent atmospheric motions in more realistic energy balance models (i.e., with a more precise description of the climatic system and its associate radiative budget) to study the seasonal cycle.

5. Conclusions

We have used the MEP hypothesis in the context of a time-varying problem for a conceptual model. Contrarily to the existing MEP based models, only some energy fluxes were optimized with MEP (the convective ones) and energy was buffered via conduction. This feature naturally led to a lag in the local temperature response, even in the case of an antisymmetric forcing, where no significant lag was observed if we optimized all energy fluxes with MEP. This result suggests that MEP could be used to construct simple climate models for time-varying problems if slow processes, such as conduction in the ground, are decoupled from fast (convective) processes that are fixed by the optimization of entropy production.

Supplementary Materials: The following are available online at <http://www.mdpi.com/1099-4300/22/9/966/s1>, Python code.

Author Contributions: Conceptualization, V.L. and D.P.; methodology, V.L. and D.P.; software, V.L.; validation, V.L., D.P. and B.D.; formal analysis, V.L. and D.P.; investigation, V.L. and D.P.; writing—review and editing, V.L., D.P. and B.D.; supervision, D.P. and B.D.; funding acquisition, D.P. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Funding: This research received no external funding.

Acknowledgments: We thank the anonymous referees for their useful comments that have helped to improve significantly the article.

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest.

Appendix A. Numerical Algorithm

Equations (25)–(27) are a set of nonlinear differential equations that can be solved numerically using the following procedure:

1. The equations correspond to a dynamical system of unknown $x = (T_{a1}, T_{a2}, T_{g1}, T_{g2}, \beta)$ that we formally write as

$$\dot{x} = f(x). \quad (\text{A1})$$

2. We discretize the cycle in T discrete time steps $t_k = k/T$, $k = 0, \dots, T - 1$. The temporal derivative of a function f at time t_k is expressed using the second order approximation $(f(t_{k+1}) - f(t_{k-1})) / (t_{k+1} - t_{k-1})$. Formally, the dynamical system is transformed into an equation of unknown $X = (x(t_1), \dots, x(t_T))$:

$$g(X) = 0, \quad (\text{A2})$$

where g is a function that depends on the discretization scheme for the temporal derivative. The problem therefore reduces to the search of zero of the vectorial function g that is solved using Newton’s method:

- (a) We consider $X^{(n)}$, a reference point for the n th iteration.

(b) We linearize the equation around $X^{(n)}$:

$$g_i(X^{(n)}) + \frac{\partial g_i}{\partial X_j}(X^{(n)})(X_j - X_j^{(n)}) + O((X - X^{(n)})^2) = 0. \tag{A3}$$

(c) Keeping only the first order, we obtain the correction for the next iteration:

$$X_i^{(n+1)} = X_i^{(n)} - G_{ij}^{-1} g_j(X^{(n)}) \tag{A4}$$

where $G_{ij}(X) = \frac{\partial g_i}{\partial X_j}(X)$ is supposed to be invertible.

(d) We reiterate the last steps until convergence.

More precisely, we note

$$X = (T_{a1}(t_1), \dots, T_{a1}(t_T), T_{a2}(t_1), \dots, T_{a2}(t_T), T_{g1}(t_1), \dots, T_{g1}(t_T), T_{g2}(t_1), \dots, T_{g2}(t_T), \beta(t_1), \dots, \beta(t_T))$$

the unknown vector that contains the the concatenated vectors of temperatures and β at discrete times. We approximate the temporal derivative of any function f at discrete time t_k by the finite difference.

$$\dot{f}(t_k) \simeq \frac{f(t_{k+1}) - f(t_{k-1})}{t_{k+1} - t_{k-1}} = \frac{f(t_{k+1}) - f(t_{k-1})}{2/T}. \tag{A5}$$

We therefore obtain the following equations $\forall k \in [0 : T - 1]$:

$$-\frac{1}{N_r} T_{0i}(t_k) + \frac{1}{N_k} T_{bi}(t_k) - \left(\frac{1}{N_r} + \frac{1}{N_k}\right) \beta(t_k) + T \frac{\beta(t_{k+1}) - \beta(t_{k-1})}{2} = 0 \quad i = 1, 2, \tag{A6}$$

$$T \frac{T_{bi}(t_{k+1}) + T_{bi}(t_{k+1})}{2} + \frac{1}{N_b} (T_{bi}(t_k) - T_{ui}(t_k)) = 0 \quad i = 1, 2, \tag{A7}$$

$$\sum_{i=1}^2 \left\{ \dot{T}_{ui}(t_k) - \frac{1}{N_r} (T_{0i}(t_k) - T_{ui}(t_k)) - \frac{1}{N_k} (T_{bi}(t_k) - T_{ui}(t_k)) \right\} = 0, \tag{A8}$$

where we use the periodic boundary conditions $f(t_0) = f(t_T)$. This set of equation is clearly of the form $g(X) = 0$. The only nonlinear term that needs to be linearized to apply the Newton's method is

$$\frac{1}{N_r} T_{0i} + \frac{1}{N_k} T_{bi} = \frac{3}{N_r} T_{0i} + \frac{2}{N_k} T_{bi}^{(n)} - 2 \frac{1}{N_r} T_{0i} + \frac{1}{N_k} T_{bi}^{(n)} T_{ui} + \frac{1}{N_k T_{ui}^{(n)2}} T_{bi} + O((T_{ui} - T_{ui}^{(n)})^2, \dots). \tag{A9}$$

It follows that we can write the linearized evolution equations as

$$2 \frac{1}{N_r} T_{0i} + \frac{1}{N_k} T_{bi}^{(n)} (t_k) T_{ai}(t_k) - \frac{1}{N_k T_{ui}^{(n)2}} (t_k) T_{bi}(t_k) - \frac{T}{2} \beta(t_{k-1}) - \left(\frac{1}{N_r} + \frac{1}{N_k}\right) \beta(t_k) + \frac{T}{2} \beta(t_{k+1}) = \frac{3}{N_r} T_{0i} + \frac{2}{N_k} T_{bi}^{(n)}, \quad i = 1, 2, \tag{A10}$$

$$-\frac{1}{N_b} T_{ui}(t_k) - \frac{T}{2} T_{bi}(t_{k-1}) + \frac{1}{N_b} T_{bi}(t_k) + \frac{T}{2} T_{bi}(t_{k+1}) = 0, \quad i = 1, 2, \tag{A11}$$

$$\frac{T}{2} (T_{u1}(t_{k+1}) - T_{u1}(t_{k-1}) + T_{u2}(t_{k+1}) - T_{u2}(t_{k-1})) + \left(\frac{1}{N_r} + \frac{1}{N_k}\right) (T_{u1}(t_k) + T_{u2}(t_k)) - \frac{1}{N_k} (T_{b1}(t_k) + T_{b2}(t_k)) = \frac{1}{N_r} (T_{01}(t_k) + T_{02}(t_k)) \tag{A12}$$

These equations can be put under the matricial form

$$MX = S, \tag{A13}$$

where M is a constant square matrix of size $5T$ and S a constant vector that depends on N_b, N_r, N_k, T and $X^{(n)}$. M can be decomposed into 5×5 blocs of size $T \times T$ as

$$\begin{pmatrix} M_{11} & 0 & M_{13} & 0 & M_{15} \\ 0 & M_{22} & 0 & M_{24} & M_{25} \\ -\frac{I}{N_b} & 0 & M_{33} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{I}{N_b} & 0 & M_{44} & 0 \\ M_{51} & M_{52} & -\frac{I}{N_k} & -\frac{I}{N_k} & 0 \end{pmatrix} \tag{A14}$$

where I denotes the identity matrix of size T . We have the following expressions for the blocks:

$$M_{11} = 2 \operatorname{diag} \left(\frac{\frac{1}{N_r} T_{01} + \frac{1}{N_k} T_{b1}^{(n)}}{T_{u1}^{(n)3}} \right), \quad M_{22} = \operatorname{diag} \left(\frac{\frac{1}{N_r} T_{02} + \frac{1}{N_k} T_{b2}^{(n)}}{T_{u2}^{(n)3}} \right), \tag{A15}$$

$$M_{13} = -\operatorname{diag} \left(\frac{1}{\frac{1}{N_k} T_{u1}^{(n)2}} \right), \quad M_{24} = -\operatorname{diag} \left(\frac{1}{\frac{1}{N_k} T_{u2}^{(n)2}} \right), \tag{A16}$$

$$M_{15} = M_{25} = Z \left(-\left(\frac{1}{N_r} + \frac{1}{N_k} \right), \frac{T}{2} \right), \tag{A17}$$

$$M_{33} = M_{44} = Z \left(\frac{1}{N_b}, \frac{T}{2} \right), \tag{A18}$$

$$M_{51} = M_{52} = Z \left(\frac{1}{N_r} + \frac{1}{N_k}, \frac{T}{2} \right), \tag{A19}$$

where we have introduced the square matrix of size T :

$$Z(x, y) = \begin{pmatrix} x & y & 0 & \dots & 0 & -y \\ -y & x & y & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & -y & x & y \\ y & 0 & \dots & 0 & -y & x \end{pmatrix}. \tag{A20}$$

The second member S can be decomposed into 5 sub vectors of size T :

$$S = (F(T_{01}, T_{u1}^{(n)}, T_{b1}^{(n)}), F(T_{02}, T_{u2}^{(n)}, T_{b2}^{(n)}), 0, 0, \frac{1}{N_r}(T_{01} + T_{02})), \tag{A21}$$

where

$$F(x, y, z) = \frac{\frac{3}{N_r}x + \frac{2}{N_k}z}{y^2}. \tag{A22}$$

This algorithm is implemented in the Python code given in the Supplementary Materials.

References

1. Monin, A.S.; Obukhov, A.M. Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere. *Contrib. Geophys. Inst. Acad. Sci. USSR* **1954**, *151*, e187.
2. Friehe, C.A.; Schmitt, K.F. Parameterization of Air-Sea Interface Fluxes of Sensible Heat and Moisture by the Bulk Aerodynamic Formulas. *J. Phys. Oceanogr.* **1976**, *6*, 801–809. [[CrossRef](#)]

3. Large, W.G.; Pond, S. Open Ocean Momentum Flux Measurements in Moderate to Strong Winds. *J. Phys. Oceanogr.* **1981**, *11*, 324–336. [[CrossRef](#)]
4. Large, W.G.; Pond, S. Sensible and Latent Heat Flux Measurements over the Ocean. *J. Phys. Oceanogr.* **1982**, *12*, 464–482. [[CrossRef](#)]
5. DeCosmo, J.; Katsaros, K.B.; Smith, S.D.; Anderson, R.J.; Oost, W.A.; Bumke, K.; Chadwick, H. Air-sea exchange of water vapor and sensible heat: The Humidity Exchange Over the Sea (HEXOS) results. *J. Geophys. Res. Ocean.* **1996**, *101*, 12001–12016. [[CrossRef](#)]
6. Fairall, C.W.; Bradley, E.F.; Rogers, D.P.; Edson, J.B.; Young, G.S. Bulk parameterization of air-sea fluxes for Tropical Ocean-Global Atmosphere Coupled-Ocean Atmosphere Response Experiment. *J. Geophys. Res. Ocean.* **1996**, *101*, 3747–3764. [[CrossRef](#)]
7. Smagorinsky, J. General circulation experiments with the primitive equations. *Mon. Weather Rev.* **1963**, *91*, 99–164. [[CrossRef](#)]
8. Mellor, G.L.; Yamada, T. Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems. *Rev. Geophys.* **1982**, *20*, 851–875. [[CrossRef](#)]
9. Louis, J.F. A parametric model of vertical eddy fluxes in the atmosphere. *Bound. Layer Meteorol.* **1979**, *17*, 187–202. [[CrossRef](#)]
10. Kara, A.B.; Rochford, P.A.; Hurlburt, H.E. Efficient and Accurate Bulk Parameterizations of Air–Sea Fluxes for Use in General Circulation Models. *J. Atmos. Ocean. Technol.* **2000**, *17*, 1421–1438. [[CrossRef](#)]
11. Sutton, R.T.; Dong, B.; Gregory, J.M. Land/sea warming ratio in response to climate change: IPCC AR4 model results and comparison with observations. *Geophys. Res. Lett.* **2007**, *34*. [[CrossRef](#)]
12. Stine, A.R.; Huybers, P.; Fung, I.Y. Changes in the phase of the annual cycle of surface temperature. *Nature* **2009**, *457*, 435–440. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
13. Kleidon, A.; Renner, M. An explanation for the different climate sensitivities of land and ocean surfaces based on the diurnal cycle. *Earth Syst. Dyn.* **2017**, *8*, 849–864. [[CrossRef](#)]
14. Martyushev, L.; Seleznev, V. Maximum entropy production principle in physics, chemistry and biology. *Phys. Rep.* **2006**, *426*, 1–45. [[CrossRef](#)]
15. Paltridge, G.W. The steady-state format of global climate. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* **1978**, *104*, 927–945. [[CrossRef](#)]
16. O’Brien, D.M.; Stephens, G.L. Entropy and climate. II: Simple models. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* **1995**, *121*, 1773–1796. [[CrossRef](#)]
17. Herbert, C.; Paillard, D.; Kageyama, M.; Dubrulle, B. Present and Last Glacial Maximum climates as states of maximum entropy production. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* **2011**, *137*, 1059–1069. [[CrossRef](#)]
18. Pascale, S.; Gregory, J.M.; Ambaum, M.H.P.; Tailleux, R.; Lucarini, V. Vertical and horizontal processes in the global atmosphere and the maximum entropy production conjecture. *Earth Syst. Dyn.* **2012**, *3*, 19–32. [[CrossRef](#)]
19. Goody, R. Maximum Entropy Production in Climate Theory. *J. Atmos. Sci.* **2007**, *64*, 2735–2739. [[CrossRef](#)]
20. Ozawa, H.; Ohmura, A.; Lorenz, R.D.; Pujol, T. The second law of thermodynamics and the global climate system: A review of the maximum entropy production principle. *Rev. Geophys.* **2003**, *41*. [[CrossRef](#)]
21. Kleidon, A. A basic introduction to the thermodynamics of the Earth system far from equilibrium and maximum entropy production. *Philos. Trans. R. Soc. B Biol. Sci.* **2010**, *365*, 1303–1315. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
22. Dewar, R.C. Maximum Entropy Production as an Inference Algorithm that Translates Physical Assumptions into Macroscopic Predictions: Don’t Shoot the Messenger. *Entropy* **2009**, *11*, 931–944. [[CrossRef](#)]
23. Shimokawa, S.; Ozawa, H. On the thermodynamics of the oceanic general circulation: Irreversible transition to a state with higher rate of entropy production. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* **2002**, *128*, 2115–2128. [[CrossRef](#)]
24. Endres, R.G. Entropy production selects nonequilibrium states in multistable systems. *Sci. Rep.* **2017**, *7*, 1–13. [[CrossRef](#)]
25. Paillard, D.; Herbert, C. Maximum Entropy Production and Time Varying Problems: The Seasonal Cycle in a Conceptual Climate Model. *Entropy* **2013**, *15*, 2846–2860. [[CrossRef](#)]
26. Mihelich, M.; Faranda, D.; Paillard, D.; Dubrulle, B. Is Turbulence a State of Maximum Energy Dissipation? *Entropy* **2017**, *19*, 154. [[CrossRef](#)]
27. Sellers, W.D. A Global Climatic Model Based on the Energy Balance of the Earth-Atmosphere System. *J. Appl. Meteorol.* **1969**, *8*, 392–400. [[CrossRef](#)]
28. Faegre, A. An Intransitive Model of the Earth-Atmosphere-Ocean System. *J. Appl. Meteorol.* **1972**, *11*, 4–6. [[CrossRef](#)]

29. Oerlemans, J.; Van Den Dool, H.M. Energy Balance Climate Models: Stability Experiments with a Refined Albedo and Updated Coefficients for Infrared Emission. *J. Atmos. Sci.* **1978**, *35*, 371–381. [[CrossRef](#)]
30. Thompson, S.L.; Schneider, S.H. A seasonal zonal energy balance climate model with an interactive lower layer. *J. Geophys. Res. Ocean.* **1979**, *84*, 2401–2414. [[CrossRef](#)]
31. North, G.R.; Cahalan, R.F.; Coakley, J.A., Jr. Energy balance climate models. *Rev. Geophys.* **1981**, *19*, 91–121. [[CrossRef](#)]
32. Basdevant, J.L. *Variational Principles in Physics*, 1st ed.; Springer: New York, NY, USA, 2007.
33. Jupp, T.E.; Cox, P.M. MEP and planetary climates: Insights from a two-box climate model containing atmospheric dynamics. *Philos. Trans. R. Soc. B Biol. Sci.* **2010**, *365*, 1355–1365. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]



© 2020 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

4.5 Conclusions et perspectives

Le modèle conceptuel présenté dans ce chapitre a été construit pour étudier l'effet de l'inclusion d'un stockage d'énergie par diffusion dans un modèle utilisant l'hypothèse MEP. On a observé que cela permettait d'introduire naturellement un déphasage dans la réponse des températures "atmosphériques" pour des valeurs qualitativement réalistes des paramètres de contrôle. Nous concluons que si l'on souhaite utiliser l'hypothèse MEP dans un contexte non-stationnaire, il est nécessaire de distinguer les processus turbulents rapides qui sont optimisés avec MEP, des processus lents (ou non-turbulents) comme le stockage d'énergie par diffusion qui est à représenter avec des méthodes habituelles. On optimise donc la production d'entropie due aux échanges d'énergie turbulents, uniquement par rapport aux variables qui interviennent directement dans les processus turbulents. Cette séparation entre les variables ou processus lents d'une part, et les variables et processus rapides d'autre part rappelle la formulation de l'hypothèse d'équilibre quasi-statique. La séparation des composantes rapides et des composantes lentes dépend du problème considéré. Dans le cas du cycle saisonnier, l'atmosphère et la surface constituent les composantes rapides tandis que la lithosphère et l'océan profond constituent les composantes lentes.

Dans l'équation du bilan d'énergie

$$C_p \partial_t T + \nabla \cdot \mathbf{J} = Q[T], \quad (4.25)$$

$-\nabla \cdot \mathbf{J}$ représente la convergence des flux d'énergie associés à l'ensemble des processus turbulents rapides tandis que $Q[T]$ est la convergence des flux d'énergie associés à l'ensemble des processus non-turbulents. Dans la vision simple du cycle saisonnier décrite en figure 4.1, $-\nabla \cdot \mathbf{J}$ représente les flux convectifs et les flux de surface, tandis que $Q[T]$ représente le chauffage radiatif et le stockage d'énergie par conduction. Nous formulons donc l'hypothèse MEP de la façon suivante :

$$\max_{T_{MEP}} \left\{ \begin{array}{l} \Sigma = \int_0^{\mathcal{T}} \int_{V_{MEP}} \frac{C_p \partial_t T - Q[T]}{T} \, d\mathbf{r} \, dt \\ \mathcal{C}(t) = \int_{V_{MEP}} (C_p \partial_t T - Q[T]) \, d\mathbf{r} = 0 \quad \forall t \in [0, \mathcal{T}], \\ C_p \partial_t T = Q[T] \quad \forall \mathbf{r} \in V/V_{MEP} \quad \text{et} \quad t \in [0, \mathcal{T}] \end{array} \right. \quad (4.26)$$

où V_{MEP} est le volume sur lequel les processus turbulents interviennent et la variable d'optimisation $T_{MEP} = \{T(\mathbf{r}, t) \mid \mathbf{r} \in V_{MEP}, t \in [0, \mathcal{T}]\}$ est le champ de température sur ce volume (i.e. l'ensemble des températures qui influencent directement les processus turbulents). L'objectif est maintenant de construire un modèle du cycle saisonnier avec une vraie couche de surface (qui est comprise dans les boîtes supérieures dans notre modèle), et un modèle radiatif plus réaliste.

Deuxième partie

Analyse et modélisation stochastique des processus sous-maille

Chapitre 5

Le problème de la modélisation sous-maille

5.1 La simulation numérique : pourquoi et comment ?

Dans ce chapitre, on tente de poser le problème pratique de modélisation sous-maille de façon plus formelle. Ce problème survient lorsque l'on veut simuler (i.e. résoudre numériquement) l'équation d'évolution de champs décrits par des équations aux dérivées partielles. Afin de simplifier la discussion, on considère un unique champ scalaire $\{q(\mathbf{r}, t), \mathbf{r} \in V \subset \mathbb{R}^3, t \in [0; \mathcal{T}]\}$ dont l'évolution est régie par une équation de conservation. On pourrait étendre la description du problème sous-maille aux équations non conservatives avec plusieurs champs, mais ces complications ne changent pas la nature du problème et ne sont pas étudiées dans cette thèse.

Le problème initiale : la vision "microscopique" continue

L'évolution du champ est complètement déterminée par

$$\text{l'équation de continuité : } \quad \partial_t q + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (5.1)$$

$$\text{la relation de fermeture : } \quad \mathbf{J} = \mathbf{J}(q, \nabla q, p), \quad (5.2)$$

$$\text{la condition initiale : } \quad q(\mathbf{r}, t = 0) = q_0(\mathbf{r}), \quad \forall \mathbf{r} \in V, \quad (5.3)$$

$$\text{les conditions aux limites sur } \quad q(\mathbf{r}, t) \quad \text{et} \quad \nabla q(\mathbf{r}, t), \quad \forall \mathbf{r} \in \partial V, t \in [0, \mathcal{T}], \quad (5.4)$$

où p représente les paramètres du problème et \mathbf{J} est le flux de la quantité q . On suppose que la dérivation de ces équations repose sur une théorie de milieu continu (comme la mécanique des fluides, l'élasticité, l'électromagnétisme, ...) dont on ne remet pas la validité en question. De telles théories reposent sur deux hypothèses (similaires aux postulats de la thermodynamique hors-équilibre) :

1. L'équilibre local qui stipule qu'on peut décrire le système localement par quelques variables thermodynamiques (ici q).
2. L'hypothèse de continuité qui consiste à considérer que les variables thermodynamiques varient continuellement en espace et en temps.

Ces hypothèses permettent d'exprimer le bilan de la quantité q sur un volume $d\mathbf{r} \neq \mathbf{0}$ durant un temps $dt \neq 0$ qui représentent des échelles d'espaces et de temps sur lesquelles q et \mathbf{J} varient

suffisamment peu (i.e. q est suffisamment homogène) : ce sont les temps et volumes infinitésimaux de la théorie de milieu continu. $d\mathbf{r}$ et dt seront appelés ici volume microscopique et temps microscopique¹. Un champ continu en espace et en temps a un nombre infini de degré de liberté. La donnée du champ $\{q(\mathbf{r}, t), \mathbf{r} \in V, t \in [0, \mathcal{T}]\}$ est une histoire microscopique du système dans le sens où elle représente le niveau de description le plus fin du système. Les équations (5.1-5.2) représentent l'évolution microscopique. L'espace fonctionnel (de dimension infinie) des histoires microscopiques possibles, notée $\mathcal{F}^{(micro)}$, est supposé être celui des fonctions continues de $V \times [0, \mathcal{T}]$.

La vision microscopique pose deux principaux problèmes. Premièrement, la résolution finie des appareils de mesures (et aussi de nos capteurs sensitifs) nous empêche d'avoir accès à l'état microscopique du système en pratique. Les résolutions en temps, en espace, et en niveau de mesures de q sont finies. Deuxièmement, les équations d'évolutions microscopiques d'intérêts (comme celles de la dynamique atmosphérique et océanique) ne sont souvent pas solvables analytiquement. En pratique, on tente alors de résoudre ces dernières avec des méthodes numériques.

Le problème numérique : la vision "macroscopique" en volumes finis

Les capacités de calcul et de stockages étant limitées, il faut faire un maillage de l'espace et du temps. On a aussi besoin de calculer les valeurs de q et de \mathbf{J} sur les mailles en estimant les dérivées partielles par des différences finies. On présente de façon très succincte l'approche en volumes finis [Eymard et al., 2000], en évitant de nombreux détails techniques qui ne sont pas nécessaires ici (comme par exemple les types de maillage autorisés, les types de discrétisation de la dynamique, les critères de convergence comme la condition CFL...). Cette méthode a l'avantage d'être conservative et peut être formulée sur des maillages non structurés. Il existe d'autres approches de résolution numériques d'équations aux dérivées partielles dont on ne parle pas ici : les différences finies et les méthodes spectrales. Toutefois, on note que le problème de modélisation sous-maille intervient aussi dans ces approches, sous une autre forme.

Discrétisation du temps : L'intervalle $[0, \mathcal{T}]$ est divisé en $N_{\mathcal{T}}$ sous-intervalles Δt_{i_t} repérés par leurs positions moyennes $t_{i_t}, i_t = 1, \dots, N_{\mathcal{T}}$. Ces intervalles sont appelés temps de contrôle. La taille de Δt_{i_t} est notée $|\Delta t_{i_t}|$ (figure 5.1 (a)). L'ensemble des intervalles de contrôle est noté $E_{\mathcal{T}}$.

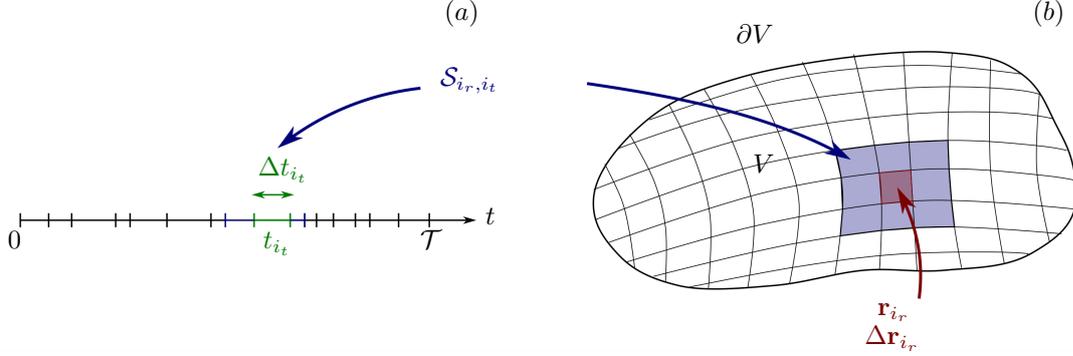
Discrétisation de l'espace : Le domaine V est approximé par N_V volumes polygonales $\Delta \mathbf{r}_{i_r}$, repérés par leurs positions moyennes $\mathbf{r}_{i_r}, i_r = 1, \dots, N_V$. Ces sous-domaines sont appelés volumes de contrôle. Le volume de $\Delta \mathbf{r}_{i_r}$ est noté $|\Delta \mathbf{r}_{i_r}|$ (figure 5.1 (b)). L'ensemble des volumes de contrôle est noté E_V .

Coarse-graining du champ : La valeur du champ q est évaluée à la position \mathbf{r}_{i_r} au temps t_{i_t} en faisant la moyenne du champ microscopique continu sur le volume de contrôle et sur le temps de contrôle. On note

$$q_{i_r, i_t} = \frac{1}{|\Delta t_{i_t}| |\Delta \mathbf{r}_{i_r}|} \int_{\Delta t_{i_t}} \int_{\Delta \mathbf{r}_{i_r}} q(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} dt. \quad (5.5)$$

1. Ces échelles de temps et d'espace sont introduites dans la théorie des milieux continus pour faire le passage entre les phénomènes moléculaires (usuellement qualifiés de microscopique) et les phénomènes à grande échelles (usuellement qualifiés de macroscopique). Ici, le terme microscopique ne doit donc pas être confondu avec la Physique à l'échelle du μm

FIGURE 5.1 – Illustration du maillage en temps et en espace dans un modèle de résolution numérique en volumes finis.



De plus, la valeur de q_{i_r, i_t} ne peut pas être stockée avec une précision infinie. En supposant que le champ est borné, q_{i_r, i_t} ne peut donc prendre qu'un nombre fini de valeurs. On note E_q l'ensemble des valeurs possibles pour q_{i_r, i_t} . L'opération qui transforme le champ microscopique continu en son champ macroscopique est appelée coarse-graining. C'est une application que l'on note

$$\mathcal{M} : \mathcal{F}^{(micro)} \rightarrow \mathcal{F}^{(macro)}$$

$$\{q(r, t)\} \rightarrow \{q_{i_r, i_t}\} = \mathcal{M}(q(r, t)).$$

où $\mathcal{F}^{(macro)} = E_q^{(E_V \times E_{\mathcal{T}})}$ est l'ensemble des histoires macroscopiques possibles, c'est à dire $\{q_{i_r, i_t}, i_r = 1, \dots, N_V, i_t = 1, \dots, N_{\mathcal{T}}\}$. La taille de cet ensemble (i.e. le nombre d'éléments) est $\#\mathcal{F}^{(macro)} = N_q^{(N_{\mathcal{T}} \times N_V)}$. Ce nombre est démesurément grand pour une simulation typique : avec un stockage en 32 bits d'un champ 3D avec 1024^3 volumes de contrôles et 10^5 temps de contrôle, $\#\mathcal{F}^{(macro)} = (2^{32})^{1024^3 \times 10^5}$.

Discretisation de la dynamique : On approxime le courant \mathbf{J} aux frontières du volume de contrôle $\Delta \mathbf{r}_{i_r}$ et du temps de contrôle Δt_{i_t} par une quadrature appropriée faisant intervenir les valeurs du champ macroscopique dans un ensemble de mailles voisines appelé stencil et noté \mathcal{S}_{i_r, i_t} . Ce genre d'approximation repose sur un développement limité. Par exemple, pour le schéma centré réduit

$$q(\mathbf{r}, t + \Delta t/2) = \frac{q(\mathbf{r}, t) + q(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + O(\Delta t^2) \quad (5.6)$$

Formellement, les dérivées partielles ∂_α pour $\alpha = x, y, z$ et ∂_t agissant sur le champ microscopique continu sont remplacées par des opérateurs arithmétiques δ_α et δ_t agissant sur le champ macroscopique discret. Les méthodes en volume finies choisissent ces opérateurs de façon à garantir la conservation de la quantité q . Cette discrétisation est ce que l'on appelle un schéma numérique.

Transition du "microscopique" vers le "macroscopique"

En résumé, la liste des modifications appliquées au problème initial pour sa résolution numérique est donnée en table 5.1. Bien que la méthode soit intuitive, ces modifications ne sont pas

TABLE 5.1 – Liste des modifications appliquées au problème initial pour sa résolution numérique.

	Microscopique (problème initial)	Opération	Macroscopique (problème numérique)
temps	t	maillage	t_{i_t}
	dt		Δt_{i_t}
position	\mathbf{r}	maillage	\mathbf{r}_{i_r}
	$d\mathbf{r}$		$\Delta \mathbf{r}_{i_r}$
quantité physique	$q(\mathbf{r}, t)$	coarse-graining	q_{i_r, i_t}
dérivés partielles	$\partial_t q(\mathbf{r}, t)$	schéma	$\delta_t q_{i_r, i_t}$
	$\partial_\alpha q(\mathbf{r}, t)$	numérique	$\delta_\alpha q_{i_r, i_t}$

anodines. La solution du problème microscopique initiale, doit être obtenue par une résolution mathématique rigoureuse tandis que la solution du problème numérique, est obtenue par calculs itératifs avec d'inévitables erreurs d'arrondis. On doit donc s'interroger sur la capacité de la méthode numérique à approcher la solution microscopique réelle avec une précision suffisante (i.e. la convergence de la méthode numérique). Cela est quantifié, entre autres, par l'erreur locale en temps :

$$\epsilon(t_{i_t}) = \sum_{i_r=1}^{N_V} |q_{i_r, i_t} - q(\mathbf{r}_{i_r}, t_{i_t})| |\Delta \mathbf{r}_{i_r}|. \quad (5.7)$$

Deux sources d'erreurs sont à distinguer. Nous allons les schématiser dans le cas d'une méthode numérique convergente. Pour cela, on note l'erreur tolérée ϵ_{tol} qui représente par exemple l'incertitude sur les instruments de mesure. On introduit également l'espace fonctionnel $\mathcal{F}_t^{(micro)}$ auquel appartiennent les champs instantanés microscopiques $q(t) = \{q(r, t), r \in V\}$. On suppose qu'il s'agit de l'ensemble des fonctions continues sur V .

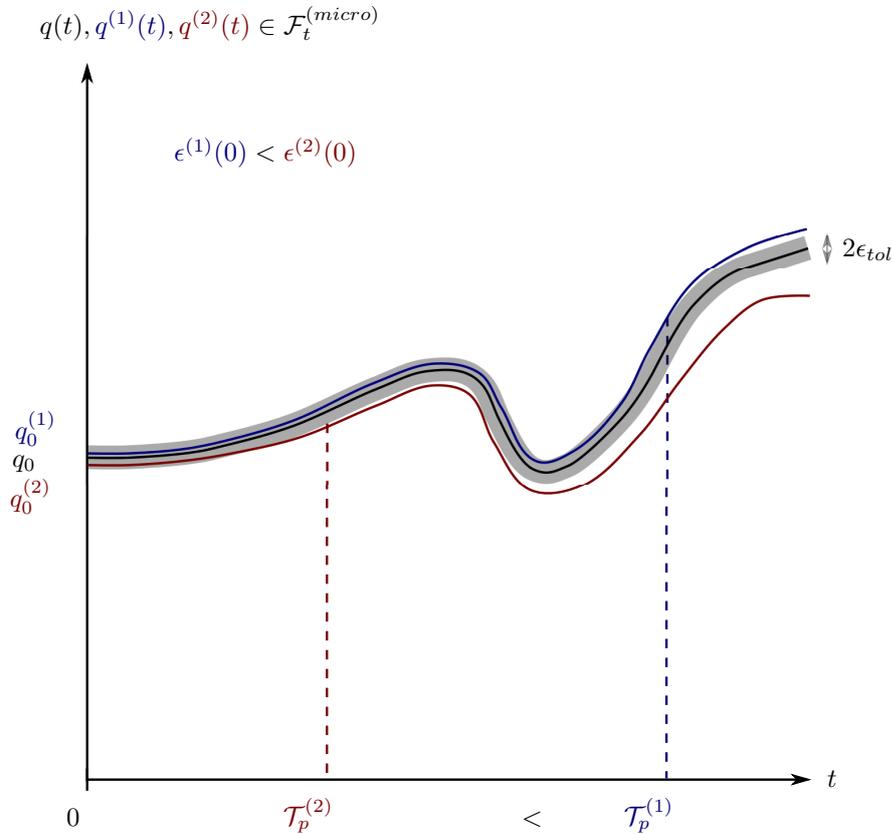
Erreur liée au coarse-graining des observables :

On considère une dynamique microscopique fixée et trois conditions initiales différentes :

- Celle du vrai système, notée q_0 ;
- $q_0^{(1)}$ qui représente une légère perturbation de la vraie condition initiale telle que $|q_0^{(1)} - q_0| \equiv \epsilon^{(1)}(0) < \epsilon_{tol}$ (i.e. indétectable par la mesure).
- $q_0^{(2)}$ qui représente une perturbation plus importante de la vraie condition initiale telle que $\epsilon^{(1)}(0) < |q_0^{(2)} - q_0| \equiv \epsilon^{(2)}(0) < \epsilon_{tol}$ (toujours indétectable par la mesure).

La résolution de la dynamique microscopique exacte avec ces trois conditions initiales aboutira à trois trajectoires différentes dans l'espace des phases $\mathcal{F}_t^{(micro)}$. On observe généralement le comportement suivant (figure 5.2) : quelle que soit la perturbation initiale, il existe un temps au-delà duquel on peut distinguer (par la mesure) la trajectoire calculée avec la perturbation de la trajectoire réelle du système. Autrement dit, l'impossibilité de connaître exactement l'état

FIGURE 5.2 – Illustration de l'imprédictibilité liée à la sensibilité à la condition initiale.



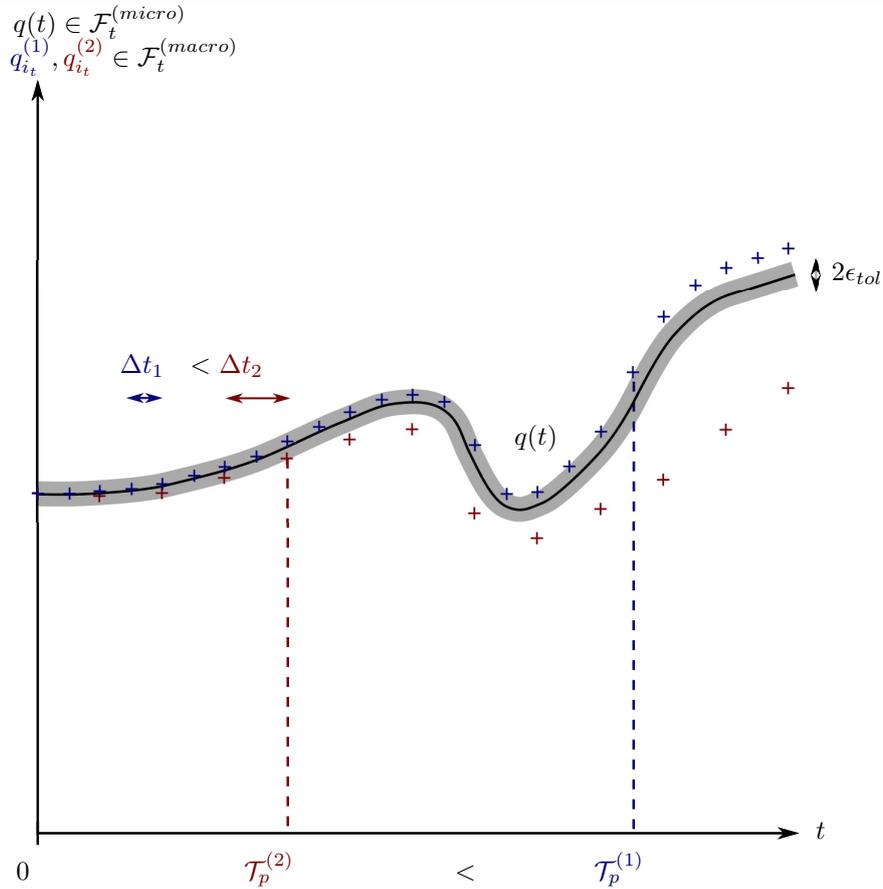
initial du système à l'échelle microscopique empêche de prédire l'évolution du système au-delà d'un temps fini. Une illustration célèbre de ce problème est donnée dans [Lorenz, 1963]. On parle de "chaos déterministe" : pour certains systèmes dynamiques déterministes, il est impossible de prédire l'évolution sur une durée infinie, même si l'on sait résoudre l'équation d'évolution microscopique. Plus formellement, on peut exprimer cette propriété de la façon suivante

$$\forall \epsilon(0) > 0, \exists t \quad \text{tq} \quad \epsilon(t) > \epsilon_{tol}. \quad (5.8)$$

Erreur liée à la discrétisation de la dynamique (schéma numérique) :

On considère deux solutions numériques obtenues avec le même maillage en espace, la même condition initiale, le même schéma numérique, mais des temps de contrôle de taille différentes Δt_1 et Δt_2 telles que $\Delta t_1 < \Delta t_2$. L'ensemble des champs numériques possibles à un instant donné est noté $\mathcal{F}_t^{(macro)}$. On observe généralement le comportement suivant (figure 5.3) : quel que soit le temps de contrôle $\Delta t > 0$, il existe un temps au-delà duquel on peut distinguer (par la mesure) la trajectoire calculée numériquement de la trajectoire du système réel. Autrement dit,

FIGURE 5.3 – Illustration de l'imprédictibilité liée à la résolution finie du maillage et à la discrétisation de la dynamique.



l'approximation de la dynamique microscopique continue par une dynamique discrète empêche de prédire l'évolution du système au-delà d'un temps fini. On peut par exemple simuler la dynamique de [Lorenz, 1963] avec un même schéma numérique, mais différentes résolutions temporelles pour observer cet effet. Plus formellement, on peut exprimer cette propriété de la façon suivante

$$\forall \Delta t, |\Delta \mathbf{r}| > 0, \exists i_t \quad \text{tq} \quad \epsilon(t_{i_t}) > \epsilon_{tol}. \quad (5.9)$$

En pratique, les deux types d'erreurs se cumulent. On définit le temps de prédictibilité

$$\mathcal{T}_p = \min_t \{t \mid \epsilon(t) > \epsilon_{tol}\}. \quad (5.10)$$

qui dépend de la condition initiale $q_0(\mathbf{r})$, de l'erreur initiale $\epsilon(0)$, de l'équation microscopique, du schéma numérique, de la résolution du maillage (i.e. de Δt et $|\Delta \mathbf{r}|$) et de l'erreur tolérée ϵ_{tol} . Pour une méthode numérique convergente, le temps de prédictibilité est une fonction décroissante de l'erreur initiale et une fonction décroissante de Δt et $|\Delta \mathbf{r}|$.

5.2 Simulation numérique directe vs modélisation sous-maille

Compte tenu des limitations des simulations numériques, on peut se retrouver dans deux cas que nous présentons ici.

Simulation numérique directe : Intuitivement, si $\Delta t \rightarrow dt \neq 0$ et $|\Delta \mathbf{r}| \rightarrow d\mathbf{r} \neq 0$, q peut être considéré comme assez homogène dans le volume de contrôle durant le temps de contrôle (par définition des échelles microscopiques introduites dans le cadre de la théorie de milieu continu). Ainsi, en considérant une erreur tolérée qui ne soit pas trop petite, le temps de prédictibilité \mathcal{T}_p sera supérieur au temps de simulation \mathcal{T} . On considère alors que le problème initial est résolu numériquement. On appelle cela une simulation numérique directe [Moin and Mahesh, 1998] (voir aussi [Pope, 2001] chapitre 9 ou autre livre de référence). Cette méthode est très coûteuse en ressources numériques et n'est pas envisageable pour beaucoup de problèmes pratiques comme la météorologie et le climat.

La modélisation sous-maille : Dans beaucoup de cas d'intérêt, on a plutôt

$$dt \ll \Delta t \ll \mathcal{T} \quad \text{et} \quad d\mathbf{r} \ll \Delta r \ll V \quad (5.11)$$

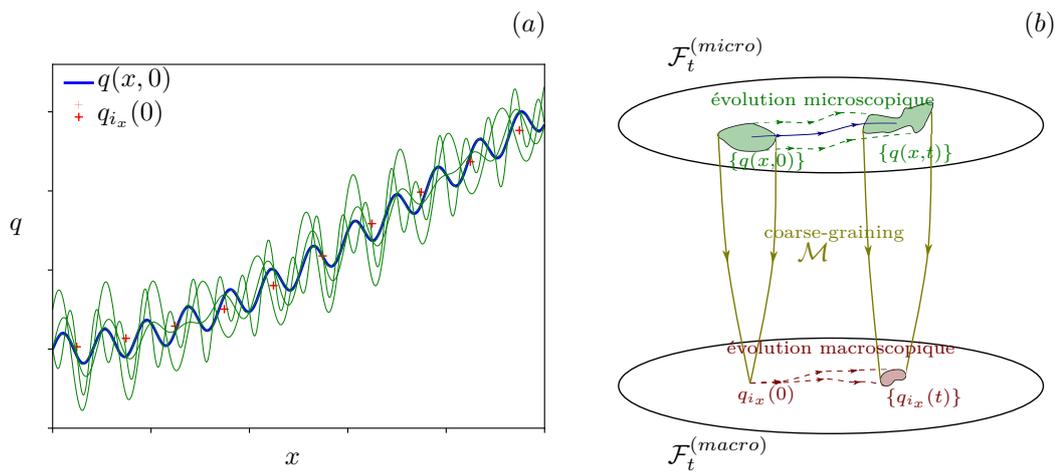
si bien que le champ q peut être très inhomogène dans un volume de contrôle et varie significativement sur un temps de contrôle. On a alors besoin de modéliser ce qui se passe à l'intérieur du volume de contrôle durant le temps de contrôle en fonction du champ macroscopique et des paramètres du problème, qui représentent les seules informations dont on peut disposer sur le champ réel en pratique. La condition (5.11) constitue le problème de modélisation sous-maille.

Hypothèse : localité macroscopique.

On suppose en général que la réponse à l'échelle de la maille est locale. C'est-à-dire que l'on peut exprimer la variation de q dans une maille comme une fonction des valeurs de q dans les mailles voisines et des paramètres uniquement. A priori, cette approximation sera valide uniquement si l'équation d'évolution microscopique est locale et si le pas de temps est suffisamment faible pour que l'information n'ait pas le temps de traverser les volumes de contrôle voisins durant le temps de contrôle (critère CFL). Avec cette approximation, le problème est grandement simplifié. Il faut alors trouver une relation qui relie le flux de q au gradient de q estimé à l'échelle de la maille, et non au champ macroscopique en entier.

Un aspect fondamental du problème est le fait qu'à un état du stencil $\{q_{j_r, j_t}, (j_r, j_t) \in \mathcal{S}_{i_r, i_t}\}$ ne correspond pas un unique champ microscopique $q(\mathbf{r}, t)$, mais une infinité. Cette caractéristique est plus facilement illustrée sur un champ ne dépendant que d'une coordonnée spatiale x , et coarse-grainée seulement en espace et non en temps, ni en niveau de mesure (figure 5.4). Les champs microscopiques compatibles avec le champ macroscopique initial auront des évolutions différentes, menant généralement à des champs macroscopiques différents au bout d'un temps fini [Gorban, 2006]. À un état macroscopique à un instant correspondent donc plusieurs évolutions possibles : le chaos déterministe, associé au coarse-graining, implique d'utiliser une modélisation probabiliste des processus sous-maille. C'est précisément le type de problème représenté en physique statistique (et dans les systèmes dynamiques stochastiques).

FIGURE 5.4 – Pour un champ coarse-grainé uniquement en espace $q_{i_x}(0)$, il existe une infinité de champs microscopiques $q(x,0)$ compatibles avec le champ coarse-grainé (dont certains sont représentés en vert) (a). Chacun des champs microscopiques évoluera vers un unique champ microscopique $q(x,t)$ après un temps t . Cependant, ces champs microscopiques ne correspondront plus forcément à un unique champ coarse-grainé $q_{i_x}(t)$, d'où la nécessité d'une vision stochastique de l'évolution du champ coarse-grainé (macroscopique) (b). L'évolution du système réel est schématisée en bleu.



5.3 Les modélisations sous-maille usuelles

Dans le contexte de la mécanique des fluides, le problème de la représentation des processus sous-mailles est appelé problème de fermeture turbulente. On distinguera trois types de modélisation sous-maille utilisées dans les modèles de climat.

Les premiers modèles sont inspirés des idées de Boussinesq et Reynolds [Boussinesq, 1877, Reynolds, 1883]. On les appelle les Reynolds Average Navier Stokes (RANS). Ils sont basés sur la décomposition de Reynolds, qui sépare les champs en une partie moyenne (résolue) et une partie fluctuante (non-résolue) via une opération de moyenne d'ensemble. Appliquer l'opération de moyenne à l'équation d'évolution microscopique (i.e. les équations de Navier-Stokes) pour obtenir l'équation d'évolution du champ moyen fait apparaître des termes d'origines fluctuantes, non résolues, qui doivent être modélisés. On suppose généralement une séparation d'échelle qui justifie une forme d'équilibre thermodynamique local (i.e. les petites échelles fluctuantes ont un temps de relaxation vers leur comportement "moyen" bien plus rapide que pour les échelles résolues). Il s'agit d'une hypothèse assez similaire à celle utilisée en théorie cinétique des gaz pour dériver les équations de la dynamique des fluides et des coefficients de transport (comme la viscosité et la diffusivité moléculaire) à partir de la dynamique atomique (voir [Kremer, 2010] pour une introduction sur le sujet). On introduit alors des paramètres comme la viscosité turbulente pour représenter le caractère mélangeant de la turbulence.

Plus tard, des modèles appelés Large Eddy Simulation (LES) ont été proposés [Smagorinsky, 1963] (voir aussi [Pope, 2001] chapitre 13 et [Lesieur and Metais, 1996, Meneveau and Sagaut, 2006]). Ils sont basés sur un filtrage spatio-temporel qui décompose les champs en une partie filtrée (résolue) et une partie résiduelle (non résolue). En filtrant l'équation microscopique pour obtenir l'équation d'évolution du champ filtré, on a le même problème que pour les modèles de type RANS : des termes faisant intervenir les champs résiduels interviennent et on a besoin de les modéliser. La modélisation des termes résiduels en LES n'est pas fondamentalement différente de la modélisation des termes fluctuants en RANS, excepté pour les modèles dynamiques [Germano et al., 1991].

Les modèles stochastiques se basent sur le formalisme de la physique statistique (ou des systèmes dynamiques stochastiques). Le principe de ces modèles est de séparer les variables lentes (résolues) des variables rapides (non-résolues) [Hasselmann, 1976, Frankignoul and Hasselmann, 1977, Lemke, 1977, Majda et al., 2001, Majda et al., 2003, Franzke et al., 2015, Berner et al., 2017]. Certains de ces modèles se basent sur l'approche des projecteurs [Zwanzig, 1965, Mori, 1965b, Mori, 1965a, Kawasaki, 1973, Zwanzig, 2001]. Ce type de méthode permet d'écrire, au moins formellement, l'équation d'évolution satisfaite par les variables lentes en tenant compte de l'effet des variables rapides. À notre connaissance, les termes faisant intervenir les variables rapides sont toujours simplifiés en supposant la séparation d'échelle (voir par exemple la section 2.4 de [Gottwald et al., 2017]). En fait, la séparation d'échelle est implicite à partir du moment où l'on divise le système en variables lentes et variables rapides. Bien que ce ne soit pas toujours le cas, on finit souvent par considérer un bruit blanc Gaussien pour représenter la variabilité des variables rapides.

Afin d'illustrer le principe d'une fermeture turbulente, on considère l'équation d'évolution de la température

$$\partial_t T + \nabla \cdot (T\mathbf{v} - \kappa \nabla T) \equiv \partial_t T + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (5.12)$$

où \mathbf{v} est la vitesse du fluide, T sa température, κ sa diffusivité moléculaire et $\mathbf{J} \equiv T\mathbf{v} - \kappa \nabla T$ est

le flux de température. Les quantités sont filtrées par un filtre de largeur typique τ noté K_τ , qui est normalisé

$$\int \int K_\tau(\mathbf{r}' - \mathbf{r}, t' - t) \, d\mathbf{r}' \, dt' = 1. \quad (5.13)$$

Le champ filtré q_τ associé à la quantité q est

$$q_\tau(\mathbf{r}, t) = \int \int K_\tau(\mathbf{r}' - \mathbf{r}, t' - t) q(\mathbf{r}', t') \, d\mathbf{r}' \, dt'. \quad (5.14)$$

En filtrant l'équation (5.12), on montre que

$$\partial_t T_\tau + \nabla \cdot (T\mathbf{v} - \kappa \nabla T)_\tau \equiv \partial_t T_\tau + \nabla \mathbf{J}_\tau = 0 \quad (5.15)$$

$$\Rightarrow \partial_t T_\tau + \nabla \cdot (T_\tau \mathbf{v}_\tau) = \nabla \cdot (\kappa \nabla T_\tau + T_\tau \mathbf{v}_\tau - (T\mathbf{v})_\tau) \quad (5.16)$$

Le second terme du second membre a besoin d'être modélisé. Le modèle le plus simple consiste à introduire un coefficient de diffusivité turbulente κ_T pour représenter empiriquement le caractère mélangeant de la dynamique : $T_\tau \mathbf{v}_\tau - (T\mathbf{v})_\tau = \kappa_T \nabla T_\tau$. La modélisation stochastique se limite en général à ajouter un terme de bruit à l'équation. Dans ce cas, l'équation d'évolution du champ filtré est

$$\partial_t T_\tau + \nabla \cdot (T_\tau \mathbf{v}_\tau) = \nabla \cdot ((\kappa + \kappa_T) \nabla T_\tau) + \sigma \frac{dW_t}{dt}, \quad (5.17)$$

où σ est l'amplitude du bruit et W_t est un processus stochastique dont la nature précise n'a pas d'intérêt ici.

Les approches usuelles posent plusieurs problèmes :

1. Les modèles les plus simples en diffusion turbulente ne fonctionnent que pour un nombre réduit d'écoulement. On cherche donc parfois à modéliser l'effet des champs résiduels sur les champs filtrés de façon anisotrope avec, par exemple, une version tensorielle de la viscosité turbulente pour améliorer la prédictibilité du modèle (voir par exemple [Carati and Cabot, 1996] ou [Meneveau and Sagaut, 2006] chapitre 6). Pourtant, si on prend en compte le fait qu'un fluide newtonien comme l'atmosphère ou l'océan est bien décrit par une rhéologie isotrope, et que l'anisotropie de l'écoulement est induite par un forçage opérant sur une taille typique $L = V^{1/D}$ et un temps \mathcal{T} , il paraît plus naturel de considérer que le comportement aux échelles $d\mathbf{r}^{1/D} \ll |\Delta\mathbf{r}|^{1/D} \ll L$ et $dt \ll \Delta t \ll \mathcal{T}$ soit isotrope et indépendant de la nature précise du forçage. Il est donc communément admis que la dynamique des échelles intermédiaires de la turbulence a un caractère universel et isotrope [Kolmogorov, 1941];
2. La séparation d'échelle, sur laquelle repose la forme des paramétrisations les plus simples (avec l'introduction des coefficients de transports turbulents) est une des hypothèses utilisées en théorie cinétique. Elle permet de dériver les équations de la mécanique des fluides à partir de la dynamique des particules en supposant de faibles écart à l'équilibre thermodynamique local. Cela se justifie en comparant le temps moyen entre deux collisions d'une particule, qui varie peu dans un gaz normal, au temps macroscopique d'intérêt. Cette hypothèse est aussi appliquée avec succès aux fluides 2D [Kraichnan and Montgomery, 1980, Bouchet and Venaille, 2012], et plus généralement aux systèmes à interaction à longue portée [Campa et al., 2009]. Les équations obtenues pour les applications en climat font l'objet d'investigations mathématiques (voir par exemple [Debussche et al., 2012]) et permettent des simulations sur des périodes de temps beaucoup plus longues. Cependant, la séparation d'échelle n'a pas de justification dans le cas des fluides géophysiques 3D avec forçage et dissipation [Yano, 2015]. En effet, en l'absence de mécanismes spécifiques

(comme les propriétés spécifiques aux fluides 2D), il n’y a aucune raison pour que les processus dynamiques intervenants sur des échelles d’espaces $l \sim |\Delta \mathbf{r}|^{1/3}$ et de temps $\tau \sim |\Delta t|$ soient considérés comme à l’équilibre à l’échelle de la maille. On sait que les effets de mémoire sont importants dans le cas où l’on n’a pas de séparation d’échelle. Ces effets sont observables sur la dynamique moyenne, ce qui motive la construction de modèles qui représentent le transport des variables caractérisant la turbulence (comme l’énergie cinétique turbulente) par l’écoulement moyen (voir par exemple [Rotta, 1951, Jones and Launder, 1972, Launder and Spalding, 1974, Pope, 2001] pour une approche mécanique des fluides et [Mellor and Yamada, 1982, Detering and Etling, 1985] pour des applications géophysiques). Il est aussi connu que cette non-séparation d’échelle a une influence sur le bruit à utiliser (voir par exemple [Wouters and Lucarini, 2012]).

3. Les paramètres introduits ne tiennent pas toujours compte de la résolution du maillage².

Cela pousse les modélisateurs à introduire d’avantage de paramètres dans les fermetures turbulentes. L’introduction de paramètres supplémentaires n’est pas gênante pour les applications où la calibration est réalisable. En revanche, elle l’est pour l’étude du climat où il faut tenir compte de nombreux autres paramètres intervenant dans la représentation de la biosphère, de la cryosphère, ... Ces problèmes sont bien connus par la communauté des modélisateurs (voir par exemple [Franzke et al., 2015, Berner et al., 2017]).

5.4 Discussion

Prenant en compte les problèmes soulevés aux sections précédentes, on veut avoir une approche qui respecte les points suivants :

1. Tenir compte de l’effet du coarse-graining qui est assez similaire à l’opération de filtrage spatial et temporel des LES. C’est l’outil mathématique adéquat pour représenter les limitations intrinsèques sur les résolutions spatiales et temporelles, qu’elles soient de nature expérimentale ou numérique.
2. Avoir une approche de type milieu continu avec la prise en compte des fluctuations des échelles résiduelles. On essaye de profiter du fait qu’une quantité conservée l’est à toutes les échelles et que les échelles intermédiaires ont vraisemblablement un comportement universel et isotrope (qu’il faut néanmoins déterminer). En l’occurrence, le filtrage de l’équation de continuité microscopique (5.1) donne

$$\partial_t q_\tau + \nabla \cdot \mathbf{J}_\tau = 0, \quad (5.18)$$

et il faut donc modéliser la relation de fermeture décrivant le comportement de \mathbf{J}_τ . Cela suppose implicitement que le modèle sous-maille ne dépend pas du schéma numérique et de l’opération de coarse-graining choisis³.

3. On cherche à modéliser des phénomènes pour lesquels l’hypothèse de séparation d’échelle (et donc d’équilibre local) n’est pas valable.
4. Il faut limiter le recours aux paramètres au maximum. Pour cela, il faut avoir une méthode d’analyse spécifique et systématique des champs coarse-grainés obtenus à partir des simulations numériques directes et/ou des mesures expérimentales hautes résolutions. Cette

2. On note toutefois une exception célèbre [Smagorinsky, 1963] où la taille de la maille est introduite dans l’expression de la viscosité turbulente.

3. Cette hypothèse est fautive d’un point de vue mathématique [Meneveau and Sagaut, 2006]. Néanmoins, la dépendance des modèles sous-mailles aux choix de discrétisation est encore une question ouverte à notre connaissance. Nous ne nous y intéresserons pas ici.

méthode doit permettre d'identifier les variables les plus pertinentes pour la représentation des processus sous-maille avant d'entreprendre la conception du modèle.

On procédera donc en deux étapes. La première consistera à analyser les champs microscopiques obtenues par simulation numérique directe ou expérimentalement, en vue d'obtenir des informations sur le flux coarse-grainé local \mathbf{J}_τ . On note que cette idée est déjà utilisée pour la modélisation multi-échelle [Vanden Eijnden, 2003, Dolapchiev et al., 2013, Achatz et al., 2013]. La seconde étape consistera à modéliser le comportement de \mathbf{J}_τ en fonction des résultats d'analyse.

Avant de considérer les équations d'évolution d'un fluide, il est utile de revenir à des modèles plus simples. En fait, une comparaison intéressante entre la théorie cinétique des gaz très dilués (qui est un exemple typique de système pour lequel il faut prendre en compte la non-séparation d'échelle) et la turbulence est discutée par [Chen et al., 2004]. Ils montrent que l'on peut retrouver le modèle de turbulence $k-\epsilon$ [Jones and Launder, 1972, Launder and Spalding, 1974] à partir du formalisme de la théorie cinétique des gaz. Étudier des modèles jouets de théorie cinétique des gaz est une première piste envisagée pour comprendre les problèmes de modélisation sous-maille comme la turbulence. Les travaux présentés au prochain chapitre visent à étudier un modèle dont la dynamique microscopique est intrinsèquement discrète : un gaz sur réseau [Hardy et al., 1973, Frisch et al., 1987, Grosfils et al., 1993, A Wolf-Gladrow, 2000, Rivet and Boon, 2005].

Dans un second chapitre, on tentera d'étudier un écoulement turbulent réel : l'écoulement de Von-Karman.

Chapitre 6

Cas d'un gaz sur réseau diffusif

6.1 Le système

Vue microscopique Notre modèle est un gaz sur réseau carré de $L \times L$ noeuds à 4 vitesses : $\mathbf{c}_1 = c(1, 0)$, $\mathbf{c}_2 = c(0, 1)$, $\mathbf{c}_3 = c(-1, 0)$ et $\mathbf{c}_4 = c(0, -1)$ (figure 6.1). Il correspond au modèle HPP [Hardy et al., 1973, Hardy et al., 1976] auquel on a ajouté des collisions à trois particules. Les échelles de temps et d'espace microscopiques sont le pas de temps (adimensionné) et la distance entre les noeuds c (qui est aussi la norme de la vitesse des particules). Dans la suite, on prendra $c = 1$ pour simplifier les notations. On note $n_i(\mathbf{r}_*, t_*)$ l'occupation de la cellule i au noeud $\mathbf{r}_* = (x_*, y_*)$ au temps t_* qui est une variable Booléenne. À chaque pas de temps, les particules sont collisionnées puis propagées sur le réseau selon les règles représentées sur la figure 6.2. On applique des conditions aux limites particulières aux bords du réseau pour représenter le contact avec des réservoirs de particules de densités différentes : ρ_B en $y_* = 0$, ρ_R en $x_* = L$, ρ_T en $y_* = L$ et ρ_L en $x_* = 0$. Ce gaz sur réseau est donc un système hors équilibre pour lequel on impose un gradient de densité. On introduit les observables microscopiques

$$\rho_*(\mathbf{r}_*, t_*) = \sum_{i=1}^4 n_i(\mathbf{r}_*, t_*) \quad = 0, 1, 2, 3, 4, \quad (6.1)$$

$$\mathbf{j}_*(\mathbf{r}_*, t_*) = \sum_{i=1}^4 n_i(\mathbf{r}_*, t_*) \mathbf{c}_i \quad = -1, 0, 1, \quad (6.2)$$

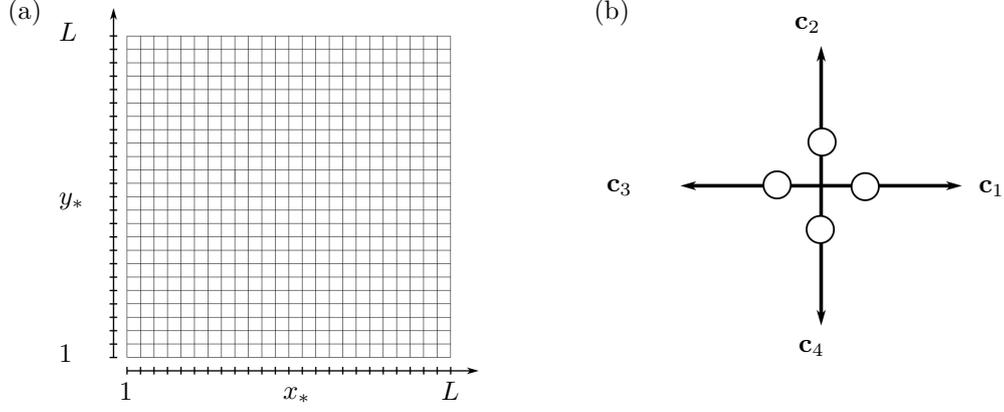
qui sont la densité microscopique et le flux de particule microscopique. Les variables microscopiques (indexées par $*$) représentent les variables d'intérêts jusqu'aux plus petites échelles dynamiques (ρ_* peut être vu comme une température locale). On écrit la dynamique microscopique sous la forme

$$n(t_* + 1) = \mathcal{S} \circ \mathcal{C} n(t_*) \quad (6.3)$$

où $n(t_*)$ est l'état du réseau au temps t_* (i.e. l'occupation de toutes les cellules), \mathcal{C} est l'opérateur de collision qui agit localement, et \mathcal{S} est l'opérateur de propagation qui déplace les particules aux noeuds voisins.

Vue macroscopique À l'échelle macroscopique, dans la limite hydrodynamique, on introduit les variables $t = \epsilon t_*$, $\mathbf{r} = (x, y) = \epsilon \mathbf{r}_*$ où $\epsilon = 1/L \rightarrow 0$. On sait dériver l'équation satisfaite par la densité moyenne et le flux moyen (voir la fin de l'annexe C)

FIGURE 6.1 – (a) Vue du réseau carré de $L \times L$ noeuds. (b) Chaque noeud est constitué de 4 cellules qui correspondent aux vitesses possibles des particules se déplaçant sur le réseau.



$$\rho = \langle \rho_* \rangle \in [0 : 4], \quad (6.4)$$

$$\mathbf{J} = \langle \mathbf{j}_* \rangle \in [-1 : 1]^2. \quad (6.5)$$

On obtient

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (6.6)$$

$$\mathbf{J} = \nabla \left(\frac{\rho}{4} + \frac{4}{q\rho} \right) = \left(\frac{1}{4} - \frac{4}{q\rho^2} \right) \epsilon \nabla \rho. \quad (6.7)$$

On peut aussi calculer la variance du flux microscopique (voir l'annexe du manuscrit donné à la section 6.4)

$$\langle (j_{*\alpha} - J_{*\alpha})^2 \rangle \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\rho}{2} \left(1 - \frac{\rho}{4} \right) \equiv \sigma_*^2(\rho), \quad \alpha = x, y. \quad (6.8)$$

Vue coarse grainée (mésoéchelle) Il est aussi possible de coarse-grainer le temps et l'espace en mailles de τ pas de temps et $\tau \times \tau$ noeuds où τ sera appelé le facteur de coarse-graining. On introduit alors les observables coarse-grainées qui sont les valeurs moyennes des observables microscopiques sur les mailles

$$\mathcal{M}_\tau(\mathbf{r}, t) = \{ \mathbf{r}_* = (x_*, y_*), t_* \mid 0 \leq x_* - Lx < \tau, 0 \leq y_* - Ly < \tau, 0 \leq t_* - Lt < \tau \} \quad (6.9)$$

FIGURE 6.2 – (a) Règles de collision du modèle. Ce sont des collisions aléatoires à deux particules avec une probabilité p , et trois particules avec une probabilité q . (b) Conditions aux limites au bord inférieur du réseau avant la collision : en $y_* = 0$, les cellules 1, 2 and 3 sont remplies aléatoirement avec une probabilité $\rho_B/4$ et l'occupation de la cellule 4 dépend de l'arrivée d'une particule. ρ_B représente la densité du réservoir. Des conditions similaires sont appliquées sur les autres bords du réseau. (c) Représentation de l'opération de propagation : les particules sont propagées aux nœuds voisins selon leurs vitesses.

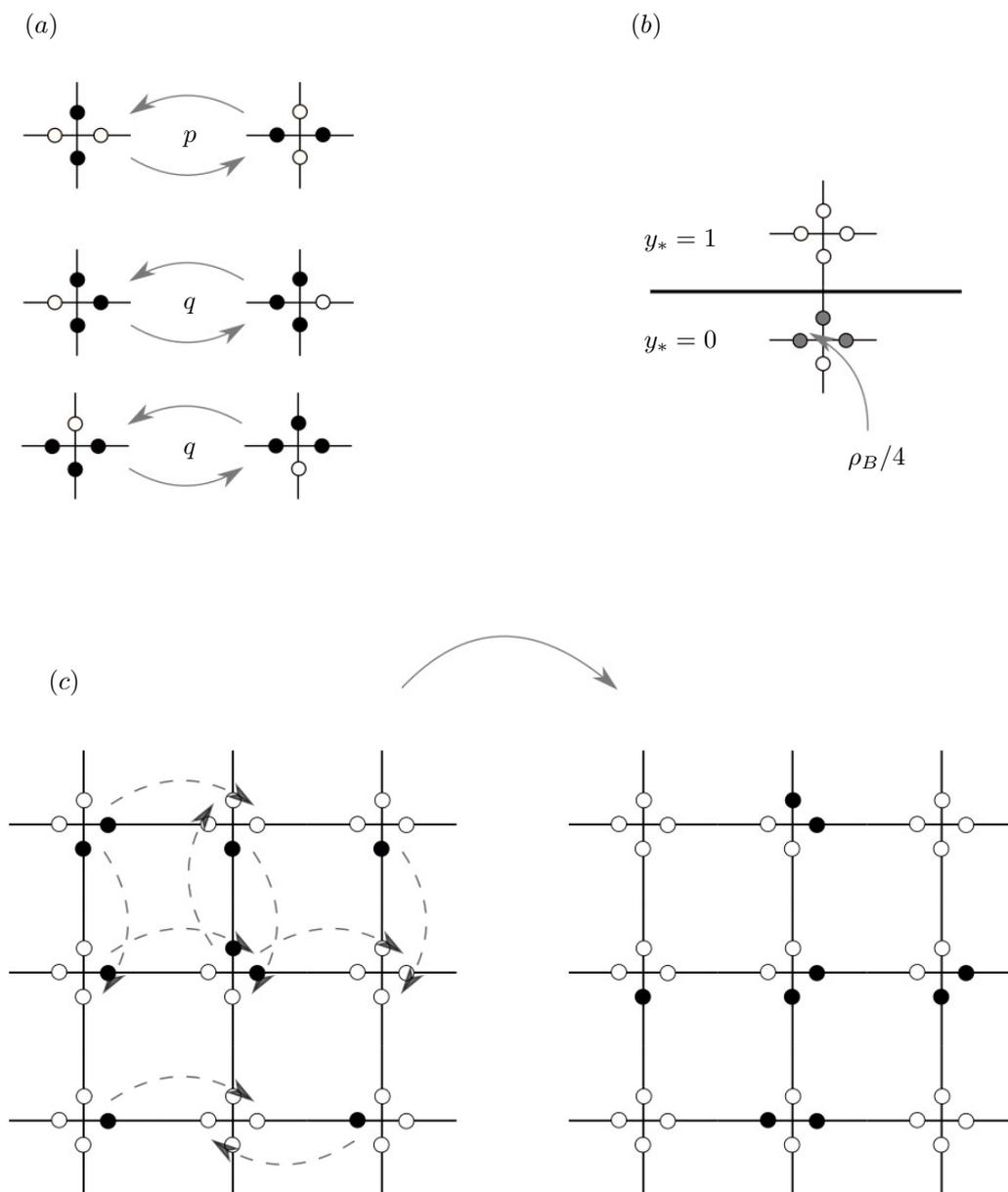
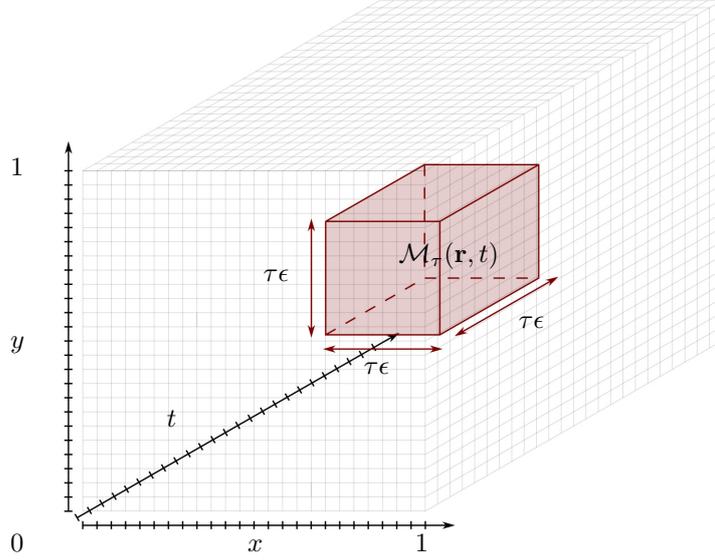


FIGURE 6.3 – Illustration du coarse-graining pour le gaz sur réseau. Les noeuds et les pas de temps sont représentés en gris clair. La maille $\mathcal{M}_\tau(\mathbf{r}, t)$ regroupe les τ^3 noeuds au voisinage de (\mathbf{r}, t) .



aux différentes positions $\mathbf{r} = (x, y)$ et aux temps t (figure 6.3) :

$$\tau^3 \rho_\tau(\mathbf{r}, t) = \sum_{(\mathbf{r}_*, t_*) \in \mathcal{M}_\tau(\mathbf{r}, t)} \sum_{i=1}^4 n_i(\mathbf{r}_*, t_*) \in \{0, 1, \dots, 4\tau^3\} \quad (6.10)$$

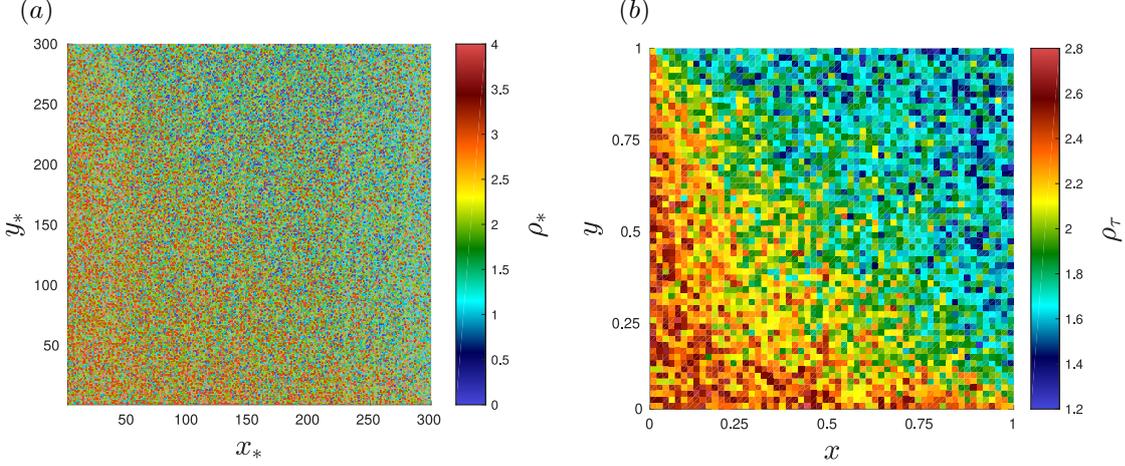
$$\tau^3 \mathbf{j}_\tau(\mathbf{r}, t) = \sum_{(\mathbf{r}_*, t_*) \in \mathcal{M}_\tau(\mathbf{r}, t)} \sum_{i=1}^4 n_i(\mathbf{r}_*, t_*) \mathbf{c}_i \in \{-\tau^3, \dots, \tau^3\}^2. \quad (6.11)$$

Les variables coarse-grainées (indexées avec τ) représentent celles qui seraient explicitement résolues numériquement (ρ_τ peut être vu comme une température moyenne à l'échelle d'une maille).

Le problème de modélisation sous-maille pour ce système consiste à obtenir les équations d'évolution de ces champs à partir de la dynamique microscopique (ou de sa simplification). Dans la suite, nous considérerons des valeurs de τ modérées, car on s'intéresse à des systèmes où on ne peut pas utiliser une séparation d'échelle pour représenter les processus sous mailles¹. Notre problème s'apparente donc plus à une modélisation mésoscopique qu'à une fermeture turbulente, néanmoins les deux cas correspondent à des modélisations sous-maille. Malgré le fait que τ soit fini et que les variables coarse-grainées prennent des valeurs discrètes, on supposera que le système peut être vu comme un milieu continu si on le décrit à partir de la méso-échelle. On supposera également que ρ_τ et \mathbf{j}_τ peuvent être vues comme des variables continues. Cela est fait

1. De plus, la limite $\tau \rightarrow \infty$ correspondrait à la limite hydrodynamique, qui est déjà bien connue.

FIGURE 6.4 – Champs instantanés de densité microscopique (a) et coarse-grainé avec $\tau = 5$ (b) pour notre simulation. Le problème de modélisation sous-maille consiste à trouver un modèle pour simuler directement l'évolution du champ coarse-grainé.



pour faciliter la discussion, mais aussi l'extension de la méthode aux systèmes d'intérêts comme les fluides turbulents.

L'idée est d'essayer d'avoir une approche de modélisation proche de l'analyse des données de simulation numériques directes afin d'éviter l'introduction d'hypothèses (et de paramètres) non-nécessaires. Nous utiliserons les résultats d'une simulation de 10^6 pas de temps pour $\rho_T = \rho_R = 1.6$, $\rho_B = \rho_L = 2.4$, $p = q = 1$, et $L = 300$ à l'état statistiquement stationnaire. Des champs de densité microscopique et de densité coarse-grainé obtenues dans notre simulation sont montrés en figure 6.4.

6.2 Analyse numérique

Étant donné que les collisions sont locales (i.e. font intervenir les occupations des cellules à un seul nœud à un pas de temps), l'information ne se propage pas plus vite que les particules, qui se déplacent à une vitesse fixe $c = 1$. Il s'ensuit que l'état de la maille $\mathcal{M}(\mathbf{r}, t)$ ne dépend que des états des mailles voisines à l'instant précédent $t - \epsilon\tau$. L'évolution de la densité coarse-grainée est donc locale et obéit à l'équation de continuité

$$\partial_t \rho_\tau + \nabla \cdot \mathbf{j}_\tau = 0. \quad (6.12)$$

S'il n'y a pas de séparation d'échelle, on s'attend à ce que le temps de relaxation du flux coarse-grainé ne soit pas négligeable devant le temps de collision². On doit alors modéliser la variation temporelle du flux coarse-grainé plutôt que le flux lui-même. Autrement dit, le flux coarse-grainé a une inertie et doit être considéré comme une variable dynamique. De plus l'absence de représentation des plus petites échelles de la dynamique chaotique entraîne une imprédictibilité du champ coarse-grainé qu'il faut modéliser (de façon probabiliste). On cherche donc une relation

2. Du point de vue rhéologique, ce comportement est commun à la turbulence et aux fluides viscoélastiques.

de la forme :

$$\partial_t \mathbf{j}_\tau = \mathcal{F}(\rho_\tau, \nabla \rho_\tau, \mathbf{j}_\tau, \nabla \mathbf{j}_\tau, p, q, \tau, \boldsymbol{\eta}) \quad (6.13)$$

où $\boldsymbol{\eta}$ est une variable aléatoire qui représente la variabilité des échelles sous-maille et dont la nature est encore indéterminée. Cette équation n'a pas de sens mathématiquement, nous l'écrivons uniquement pour exprimer la dépendance de la variation temporelle du flux de façon générale. La fermeture fait apparaître trois types de variables : les variables dynamiques (densité, flux et leurs gradients), les paramètres dynamiques (les probabilités de collisions) et les paramètres liés au coarse-graining (le facteur de coarse-graining).

Il serait très utile de pouvoir procéder à une analyse statistique détaillée de la simulation directe en calculant les corrélations partielles des variables avec la dérivée temporelle du flux pour sélectionner celles qui sont les plus pertinentes (i.e. s'appuyer sur les observations pour choisir la rhéologie du modèle sous-maille). Cependant, ce type d'analyse statistique est limitée par le nombre de variables pour des raisons de combinatoire. Si on fixe p, q et τ , $\partial_t \mathbf{j}_\tau$ dépend toujours de $1 + 2 + 2 + 4 = 9$ variables. Il faut donc commencer à faire des hypothèses sur la rhéologie du modèle sous-maille.

Hypothèse : La variation du flux selon la direction α , $\partial_t j_{\tau\alpha}$, ne dépend que de $j_{\tau\alpha}, \rho_\tau, \partial_\alpha \rho_\tau, \tau, p, q$ et les deux composantes de $\partial_t \mathbf{j}_\tau$ sont décorrélées.

Cette hypothèse simplifie grandement le problème, et on peut commencer l'analyse des champs coarse-grainés. D'un point de vue pratique, on estime les dérivées partielles à partir des différences finies :

$$\partial_t j_{\tau\alpha}(\mathbf{r}, t) \simeq \frac{j_{\tau\alpha}(\mathbf{r}, t + \tau\epsilon) - j_{\tau\alpha}(\mathbf{r}, t)}{\tau\epsilon} \equiv \frac{1}{\epsilon} v_{\tau\alpha}, \quad (6.14)$$

$$\partial_x \rho_\tau(\mathbf{r}, t) \simeq \frac{\rho_\tau(x + \tau\epsilon, y, t) - \rho_\tau(x - \tau\epsilon, y, t)}{2\tau\epsilon} \equiv \frac{1}{\epsilon} g_{\tau x}, \quad (6.15)$$

$$\partial_y \rho_\tau(\mathbf{r}, t) \simeq \frac{\rho_\tau(x, y + \tau\epsilon, t) - \rho_\tau(x, y - \tau\epsilon, t)}{2\tau\epsilon} \equiv \frac{1}{\epsilon} g_{\tau y}, \quad (6.16)$$

Au cours d'une simulation, le système va explorer un grand nombre d'états globaux (du réseau) au cours de la simulation, générant un grand nombre d'états des mailles et de leurs voisinages (i.e. des valeurs du quadruplet $(v_{\tau\alpha}, j_{\tau\alpha}, \rho_\tau, g_{\tau\alpha})$). La distribution de probabilité jointe du vecteur $(v_{\tau\alpha}, j_{\tau\alpha}, \rho_\tau, g_{\tau\alpha})$ dépend des paramètres de la simulation (i.e. de l'écoulement), de la position et du temps et n'est pas très intéressante pour déterminer le modèle sous-maille. La quantité d'intérêt est plutôt la probabilité d'observer une variation temporelle du flux $v_{\tau\alpha}$, sachant que l'on observe $(j_{\tau\alpha}, \rho_\tau, g_{\tau\alpha})$. On définit la densité de probabilité conditionnelle $p_{\tau\alpha}(\hat{v}|\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g})$ telle que la probabilité d'observer $v_{\tau\alpha} \in [\hat{v} - \frac{d\hat{v}}{2}, \hat{v} + \frac{d\hat{v}}{2}]$ sachant que $j_{\tau\alpha} \in [\hat{j} - \frac{d\hat{j}}{2}, \hat{j} + \frac{d\hat{j}}{2}]$, $\rho_\tau \in [\hat{\rho} - \frac{d\hat{\rho}}{2}, \hat{\rho} + \frac{d\hat{\rho}}{2}]$ et $g_{\tau\alpha} \in [\hat{g} - \frac{d\hat{g}}{2}, \hat{g} + \frac{d\hat{g}}{2}]$ est $p_{\tau\alpha}(\hat{v}|\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g}) d\hat{v} d\hat{j} d\hat{\rho} d\hat{g}$. Ces distributions sont indépendantes du temps et de la position. Elle peuvent donc être mesurées pour différentes valeurs de τ , et $\alpha = x, y$, en faisant les statistiques sur toutes les mailles de la simulation.

Afin d'identifier une éventuelle structure des distributions, il est utile de regarder des variables aléatoires normalisées. On introduit donc la variation temporelle du flux coarse-grainé normalisée

$$\delta_{\tau\alpha}(\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g}) = \frac{v_{\tau\alpha} - \langle v_{\tau\alpha} \rangle_{\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g}}}{\sqrt{\langle (v_{\tau\alpha} - \langle v_{\tau\alpha} \rangle_{\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g}})^2 \rangle_{\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g}}}} \quad \alpha = x, y, \quad (6.17)$$

où

$$\langle v_{\tau\alpha}^n \rangle_{\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g}} = \int \hat{v}^n p_{\tau\alpha}(\hat{v} | \hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g}) d\hat{v} \quad (6.18)$$

Les densités de probabilités empiriques des variables aléatoires $\delta_{\tau\alpha}(\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g})$ sont montrées sur la figure 6.5 pour $\tau = 10, 15, 20, 25, 30$ et $\alpha = x, y$. Les statistiques sont faites pour \hat{j} divisé en 19 créneaux entre -0.04 et 0.04 , $\hat{\rho}$ divisé en 16 créneaux entre 1.2 et 2.8 , et \hat{g} divisé en 19 créneaux entre -0.03 et 0.03 . On ne garde que les échantillons de taille supérieure à 2000 pour limiter le bruit. On observe que les distributions de $\delta_{\tau\alpha}(\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g})$ ne dépendent pas significativement du facteur de coarse-graining τ et de la direction $\alpha = x, y$ (ce qui est attendu étant donné la symétrie du forçage). De façon plus intéressante, les distributions de $\delta_{\tau\alpha}(\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g})$ ne dépendent pas significativement de la densité coarse-grainée et de son gradient. En revanche, on note une dépendance de ces distributions avec le flux coarse-grainé. Pour les valeurs les plus probables du flux (proche de zéro), les distributions suivent une loi Normale. Les déviations par rapport à la loi Normale sont en partie expliquées par le fait qu'une densité empirique est une variable aléatoire qui peut fluctuer autour de sa moyenne. Cependant, le caractère non Normale des distributions lorsque le flux prend des valeurs atypiques est très net et reproductible, il ne peut donc pas s'expliquer à partir des erreurs d'estimation des distributions empiriques. On remarque que lorsqu'on regarde la distribution de probabilité conditionnelle seulement en sachant la densité et son gradient, on trouve un comportement Normal (non montré). Étant donné que les gaz sur réseaux sont utilisés dans la limite des faibles flux (i.e. faible vitesse moyenne des particules), et que ces faibles vitesses sont celles qui sont les plus observées en pratique, on se concentrera sur la modélisation sous-maille dans la limite d'un faible flux.

Dans cette limite, la variation temporelle du flux coarse-grainé est une variable aléatoire Gaussienne, complètement déterminée par sa moyenne et son écart-type (qui sont donc les seules quantités à modéliser).

6.3 Modélisation sous-maille

Hypothèse : Dans la limite des faibles flux, on suppose que l'évolution du flux coarse-grainé peut être représentée par une équation de relaxation stochastique. Cela revient à utiliser³ :

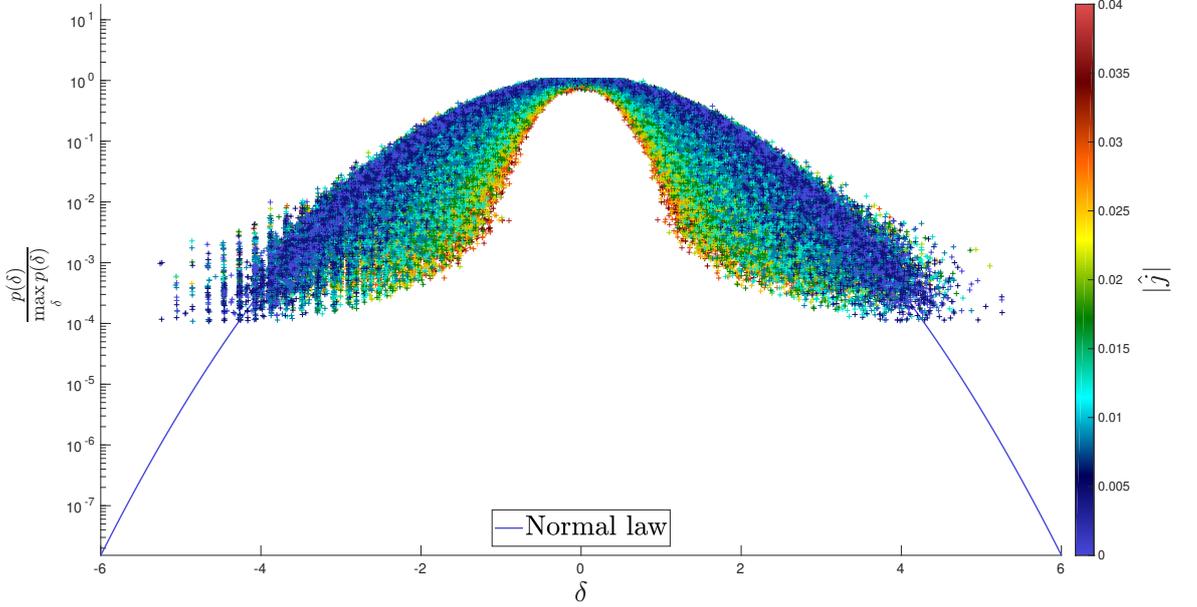
$$v_{\tau\alpha} = -\frac{j_{\tau\alpha} - \mu_{\tau\alpha}}{r_{\tau}} + \sigma_{\tau} \eta_{\alpha}, \quad (6.19)$$

où $\mu_{\tau\alpha}$ est appelé flux de relaxation, r_{τ} est le temps de relaxation, σ_{τ} est l'écart-type, et η_{α} est un bruit blanc Gaussien décorréolé en espace, en temps, et selon les deux directions. L'interprétation de cette équation est simple : le flux coarse-grainé tend à relaxer vers le flux de relaxation $\mu_{\tau\alpha}$ sous l'effet du gradient de densité appliqué à la maille sur un temps de décroissance exponentielle r_{τ} . Ici, on suppose une dépendance linéaire par rapport au flux, ce qui est justifié dans notre approximation de faible flux.

Si l'équation (6.19) est valide et si toutes les autres variables sont fixées, la régression linéaire de $v_{\tau\alpha}$ par rapport à $j_{\tau\alpha}$ a une pente $-1/r_{\tau}$, une ordonnée à l'origine $\mu_{\tau\alpha}/r_{\tau}$ et un résidu d'écart-

3. Cette équation est très largement utilisée en modélisation des processus stochastiques, bien qu'elle prenne souvent une forme différente (on sépare souvent le terme proportionnel à $j_{\tau\alpha}$ qui correspond à un terme de friction et le terme proportionnel à $\mu_{\tau\alpha}$ qui correspond à un forçage.) et que l'on utilise d'autres notations. On l'appelle généralement équation de Langevin. Ici, on utilise le terme de relaxation stochastique pour garder le sens physique de l'équation.

FIGURE 6.5 – Distributions de probabilités empiriques (divisées par leurs valeurs maximales) des variables $\delta_{\tau\alpha}(\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g})$ estimées pour notre simulation. Le comportement de la loi Normale est indiqué en trait continu bleu.



type σ_τ . Ainsi, $\mu_{\tau\alpha}$, r_τ et σ_τ sont facilement mesurés numériquement à partir des données de simulation. Dans la suite, on modélise le comportement de ces termes avec ρ_τ , $g_{\tau\alpha}$, τ , p et q .

Flux de relaxation $\mu_{\tau\alpha}$ À l'état statistiquement stationnaire, et dans la limite $\tau \rightarrow \infty$, on s'attend naturellement à retrouver la limite hydrodynamique qui décrit le comportement macroscopique du gaz sur réseau. Cela revient à choisir le flux de relaxation comme étant le flux macroscopique calculé avec la densité coarse-grainée locale et son gradient :

$$\mu_{\tau\alpha} = \left(\frac{1}{4} - \frac{4}{q\rho_\tau^2} \right) g_{\tau\alpha}. \quad (6.20)$$

Le flux de relaxation est alors théoriquement invariant d'échelle (il ne dépend pas explicitement de τ)⁴. La figure 6.6 montre le flux de relaxation $\mu_{\tau\alpha}$ mesuré pour différentes valeurs de τ et sa valeur théorique. Le flux n'est pas estimé pour toutes les valeurs de ρ_τ et de $g_{\tau\alpha}$ pour $\tau \geq 20$. La raison est que certaines valeurs sont peu, ou pas mesurés durant la simulation, car les fluctuations des observables coarse-grainées diminuent avec τ . On remarque que lorsque le flux de relaxation peut être mesuré, il dépend effectivement peu de τ . Il est aussi en bon accord qualitatif avec le flux hydrodynamique. On observe tout de même que le flux de relaxation mesuré est systématiquement supérieur au flux hydrodynamique.

4. En modélisation de la turbulence, l'hypothèse d'invariance d'échelle dans la gamme inertielle est souvent utilisée pour justifier le fait que le tenseur de Reynolds garde la même forme quelle que soit l'échelle à laquelle on fait la coupure (i.e. quel que soit le facteur de coarse-graining). Un exemple d'une telle hypothèse est donné par l'identité de Germano [Germano et al., 1991]

FIGURE 6.6 – Flux de relaxation $\mu_{\tau\alpha}$ en fonction de la densité coarse-grainée et de son gradient mesuré dans notre simulation pour différents τ . On montre également le flux hydrodynamique, qui correspond au flux de relaxation de notre modèle sous-maille.

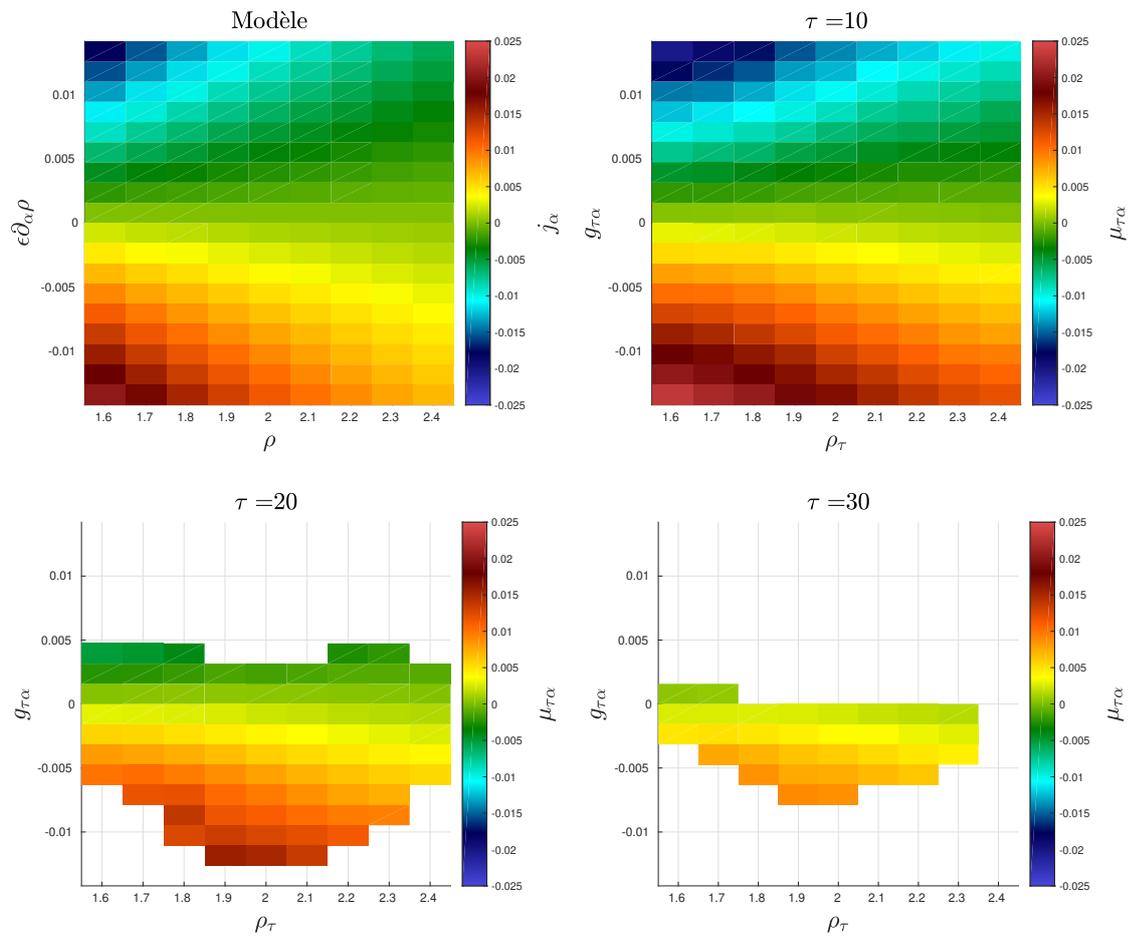
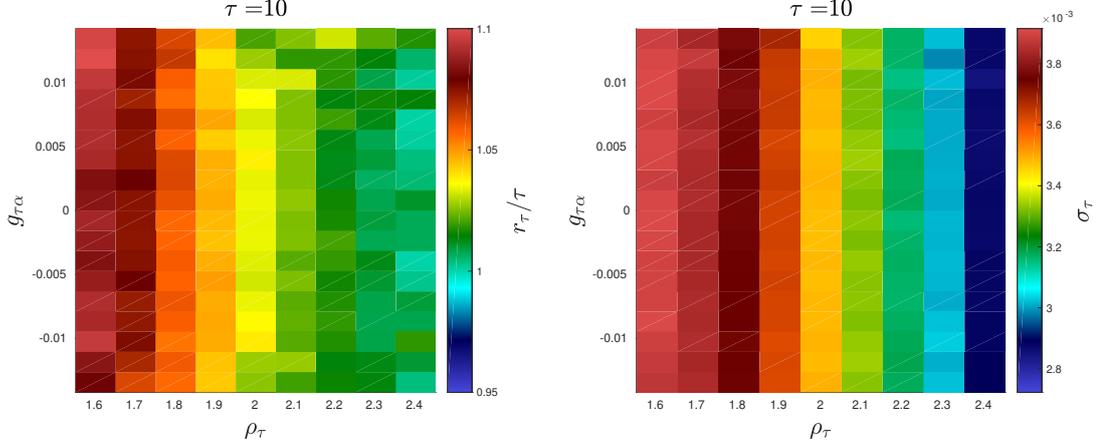


FIGURE 6.7 – Temps de relaxation r_τ divisé par le facteur de coarse-graining et l'écart-type σ_τ en fonction de la densité coarse-grainé et de son gradient pour $\tau = 10$.



Temps de relaxation r_τ et fluctuation-typique σ_τ : On montre sur la figure 6.7 le temps de relaxation (divisé par le facteur de coarse-graining) et l'écart-type pour $\tau = 10$ (les autres valeurs de τ ne sont pas montrées car on estime moins bien la dépendance de ces termes en augmentant τ). On observe qu'ils dépendent peu du gradient de la densité, du moins dans la limite des faibles flux. Cela suggère la possibilité de modéliser ces termes à partir d'un modèle d'équilibre.

On propose un modèle simple où l'on néglige les inhomogénéités spatiales à chaque pas de temps discret dans la maille. Cette approximation permet de décrire l'état d'un ensemble de τ^2 noeuds (système identique au réseau étudié et montré sur la figure 6.1, mais avec $\rho_B = \rho_R = \rho_T = \rho_L = \rho_\tau$ et $L = \tau$) uniquement à partir de l'occupation moyenne des cellules des noeuds notée $N_s = \{N_{si}(t_*), i = 1, \dots, 4\}$. Cela suppose implicitement un mélange instantané des particules à chaque pas de temps. Pour écrire l'équation d'évolution de N_s , on distingue l'introduction de particules aux bords, et les collisions qui ont lieu à tous les noeuds. On modélise la variation de population moyenne à chaque pas de temps par un processus stochastique. Les particules avec une vitesse \mathbf{c}_i entrent dans la maille à un taux $\rho_\tau/4$ à chaque noeud d'un bord et le quittent à un taux N_{si} à chaque noeud du bord opposé. On néglige implicitement les collisions aux bords. Les occupations des cellules sont modifiées par les collisions qui surviennent à tous les noeuds de la maille. On néglige les corrélations entre les occupations des cellules. Les différents termes intervenant dans l'évolution de N_{s1} à chaque pas de temps sont donnés à titre d'exemple dans le tableau 6.1.

On considère que τ est suffisamment grand pour approximer le changement aléatoire de population par des variables aléatoires Gaussiennes en utilisant le théorème central limite. L'équation stochastique qui décrit l'évolution de N_{s1} est alors

TABLE 6.1 – Notre modèle de gain moyen de l'occupation de la cellule 1.

Source	nombre de noeuds	probabilité du gain X à un noeud
entrée (bord gauche)	τ	$\left\{ \begin{array}{l} P(X = -1) = 0, \\ P(X = 0) = 1 - \rho_\tau/4, \\ P(X = 1) = \rho_\tau/4. \end{array} \right.$
sortie (bord droit)	τ	$\left\{ \begin{array}{l} P(X = -1) = N_{s1}, \\ P(X = 0) = 1 - N_{s1}, \\ P(X = 1) = 0. \end{array} \right.$
collision à deux particules	τ^2	$\left\{ \begin{array}{l} P(X = -1) = N_{s1}(1 - N_{s2})N_{s3}(1 - N_{s4})p, \\ P(X = 0) = 1 - P(X = -1) - P(X = 1), \\ P(X = 1) = (1 - N_{s1})N_{s2}(1 - N_{s3})N_{s4}p. \end{array} \right.$
collision à trois particules	τ^2	$\left\{ \begin{array}{l} P(X = -1) = N_{s1}N_{s2}(1 - N_{s3})N_{s4}q, \\ P(X = 0) = 1 - P(X = -1) - P(X = 1), \\ P(X = 1) = (1 - N_{s1})N_{s2}N_{s3}N_{s4}q. \end{array} \right.$

$$\begin{aligned} \tau^2 (N_{s1}(t_* + 1) - N_{s1}(t_*)) = & \tau \frac{\rho_\tau}{4} + \sqrt{\tau \frac{\rho_\tau}{4} \left(1 - \frac{\rho_\tau}{4}\right)} \eta_1^{in} - \tau N_{s1} - \sqrt{\tau N_{s1}(1 - N_{s1})} \eta_1^{out} \\ & + \tau^2 p N_p + \sqrt{\tau^2 \sigma_p^2} \eta_p + \tau^2 q N_{q_x} + \sqrt{\tau^2 \sigma_{q_x}^2} \eta_{q_x} \end{aligned} \quad (6.21)$$

où η_1^{in} , η_1^{out} , η_p et η_{q_x} sont toutes des variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées selon la loi Normale, et

$$N_p = (1 - N_{s1})N_{s2}(1 - N_{s3})N_{s4} - N_{s1}(1 - N_{s2})N_{s3}(1 - N_{s4}), \quad (6.22)$$

$$\sigma_p^2 = (1 - N_{s1})N_{s2}(1 - N_{s3})N_{s4}p + N_{s1}(1 - N_{s2})N_{s3}(1 - N_{s4})p - (pN_p)^2, \quad (6.23)$$

$$N_{q_x} = (1 - N_{s1})N_{s2}N_{s3}N_{s4} - N_{s1}N_{s2}(1 - N_{s3})N_{s4}, \quad (6.24)$$

$$\sigma_{q_x}^2 = (1 - N_{s1})N_{s2}N_{s3}N_{s4}q + N_{s1}N_{s2}(1 - N_{s3})N_{s4}q - (qN_{q_x})^2. \quad (6.25)$$

De façon similaire, on écrit l'équation d'évolution de N_{s3} :

$$\begin{aligned} \tau^2 (N_{s3}(t_* + 1) - N_{s3}(t_*)) = & \tau \frac{\rho_\tau}{4} + \sqrt{\tau \frac{\rho_\tau}{4} \left(1 - \frac{\rho_\tau}{4}\right)} \eta_3^{in} - \tau N_{s3} - \sqrt{\tau N_{s3}(1 - N_{s3})} \eta_3^{out} \\ & + \tau^2 p N_p + \sqrt{\tau^2 \sigma_p^2} \eta_p - \tau^2 q N_{q_x} - \sqrt{\tau^2 \sigma_{q_x}^2} \eta_{q_x}, \end{aligned} \quad (6.26)$$

où η_3^{in} et η_3^{out} sont aussi des variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées selon la loi Normale. Le flux selon x moyenné spatialement sur les τ^2 noeuds est alors $j_{sx} \equiv N_{s1} - N_{s3}$.

On obtient l'équation d'évolution de j_{sx} simplement en faisant la différence entre les équations (6.21) et (6.26), puis en divisant par τ^2 :

$$\begin{aligned} j_{sx}(t_* + 1) - j_{sx}(t_*) &= -\frac{1}{\tau}j_{sx} + 2qN_{q_x} + \sqrt{\frac{1}{\tau^3}\frac{\rho_\tau}{4}\left(1 - \frac{\rho_\tau}{4}\right)} (\eta_1^{in} - \eta_3^{in}) \\ &\quad - \sqrt{\frac{1}{\tau^3}N_{s1}(1 - N_{s1})} \eta_1^{out} + \sqrt{\frac{1}{\tau^3}N_{s3}(1 - N_{s3})} \eta_3^{out} + 2\sqrt{\frac{1}{\tau^2}\sigma_{q_x}^2} \eta_{q_x}. \end{aligned} \quad (6.27)$$

Pour simplifier cette équation, on linéarise N_{q_x} autour de l'occupation moyenne des cellules $\rho_\tau/4$: $N_{si}(t_*) \simeq \rho_\tau/4 + \delta N_{si}(t_*)$, $i = 1, \dots, 4$ avec $\delta N_{si}(t_*) \ll 1$. De plus, on ne considère que la partie additive des fluctuations (i.e. ne dépendant pas de δN_{si}). On utilise donc les approximations :

$$N_{q_x} \simeq \frac{\rho_\tau^2}{16}(\delta N_{s3} - \delta N_{s1}) = -\frac{\rho_\tau^2}{16}j_{sx}, \quad (6.28)$$

$$\sqrt{N_{si}(1 - N_{si})} \simeq \sqrt{\frac{\rho_\tau}{4}\left(1 - \frac{\rho_\tau}{4}\right)}, \quad i = 1, \dots, 4 \quad (6.29)$$

$$\sigma_{q_x}^2 \simeq 2q\left(\frac{\rho_\tau}{4}\right)^3\left(1 - \frac{\rho_\tau}{4}\right). \quad (6.30)$$

On en déduit que

$$\begin{aligned} j_{sx}(t_* + 1) - j_{sx}(t_*) &= -\left(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8}\rho_\tau^2\right)j_{sx} + \sqrt{\frac{1}{\tau^3}\frac{\rho_\tau}{4}\left(1 - \frac{\rho_\tau}{4}\right)} (\eta_1^{in} - \eta_1^{out} - \eta_3^{in} + \eta_3^{out}) \\ &\quad + \sqrt{\frac{1}{\tau^2}\frac{q}{8}\rho_\tau^3\left(1 - \frac{\rho_\tau}{4}\right)} \eta_{q_x}. \end{aligned} \quad (6.31)$$

Enfin, en utilisant le fait que les variables aléatoires η_1^{in} , η_1^{out} , η_3^{in} , η_3^{out} et η_{q_x} sont indépendantes, on réécrit l'équation précédente sous la forme plus compacte

$$j_{sx}(t_* + 1) - j_{sx}(t_*) = -\left(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8}\rho_\tau^2\right)j_{sx} + \sqrt{\frac{1}{\tau^2}\rho_\tau\left(1 - \frac{\rho_\tau}{4}\right)\left(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8}\rho_\tau^2\right)} \eta_x \quad (6.32)$$

où η_x est une variable aléatoire Normale. L'équation (6.32) est une équation de Langevin linéaire⁵ qui a été très étudiée. En particulier, il a été montré que l'équivalent du flux coarse-grainé

$$j_{\tau x}(t) = \frac{1}{\tau} \sum_{0 \leq t_* - \frac{t}{\tau} < \tau} j_{sx}(t_*), \quad (6.33)$$

lorsque $\tau \rightarrow \infty$ était une variable aléatoire Gaussienne [Touchette, 2018] de moyenne nulle et de fluctuation typique

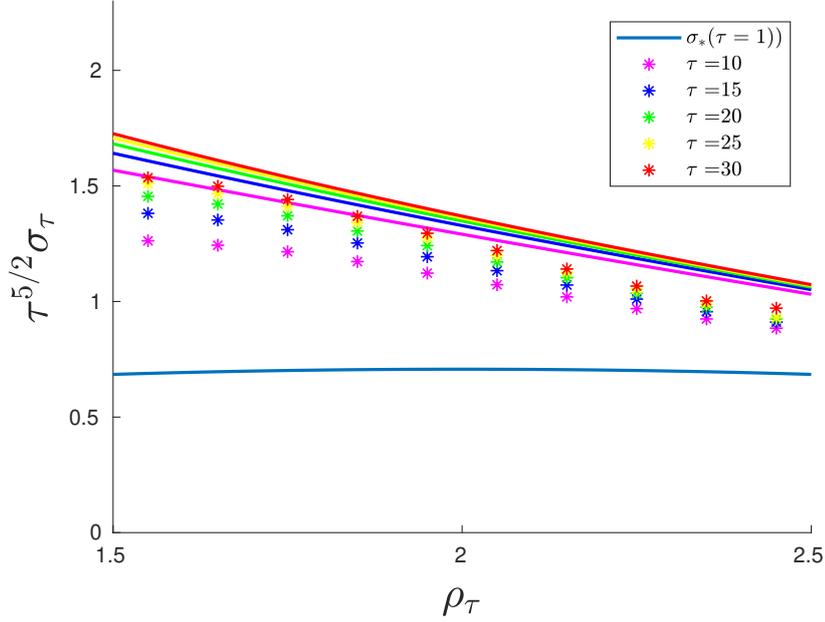
$$\sqrt{\frac{\rho_\tau(1 - \frac{\rho_\tau}{4})}{\tau^3(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8}\rho_\tau^2)}}. \quad (6.34)$$

On suppose que $v_{\tau\alpha}$ fluctue comme $j_{\tau\alpha}/\tau$, ce qui revient à utiliser

$$\sigma_\tau = \sqrt{\frac{\rho_\tau(1 - \frac{\rho_\tau}{4})}{\tau^5(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8}\rho_\tau^2)}} \quad (6.35)$$

5. Aussi appelé processus d'Ornstein-Uhlenbeck.

FIGURE 6.8 – Écart-type σ_τ multipliée par $\tau^{5/2}$ en fonction de la densité coarse-grainée pour différentes valeurs de τ . Le modèle (6.35) et l'écart-type du flux microscopique (6.8) sont comparés aux résultats numériques (indiqués par des étoiles).



dans notre modèle sous-maille. On compare la relation (6.35) aux résultats numériques en figure 6.8. On observe un bon accord qualitatif entre le modèle et les résultats numériques. En particulier, le modèle permet d'expliquer pourquoi les fluctuations sont plus importantes à basse densité qu'à haute densité.

En moyennant l'équation (6.32), l'évolution de $\langle j_{sx} \rangle$ peut s'écrire

$$\langle j_{sx} \rangle(t_* + 1) = a \langle j_{sx} \rangle(t_*), \quad a \equiv 1 - \left(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8} \rho_\tau^2 \right). \quad (6.36)$$

On en déduit que

$$\langle j_{sx} \rangle(t'_*) = \langle j_{sx} \rangle(t_*) a^{t'_* - t_*} \quad \forall t_*, t'_* \in \mathbb{N}. \quad (6.37)$$

En utilisant cette relation avec (6.33), on montre que

$$\langle j_{\tau x} \rangle(t + \tau\epsilon) = a^\tau \langle j_{\tau x} \rangle(t) \quad (6.38)$$

$$\Rightarrow \langle v_{\tau x} \rangle \equiv \frac{\langle j_{\tau x} \rangle(t + \tau\epsilon) - \langle j_{\tau x} \rangle(t)}{\tau} = -\frac{1 - a^\tau}{\tau} \langle j_{\tau x} \rangle(t). \quad (6.39)$$

Cette équation suggère de choisir le temps de relaxation

$$r_\tau = \frac{\tau}{1 - a^\tau} = \frac{\tau}{1 - \left(1 - \left(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8} \rho_\tau^2 \right) \right)^\tau} \quad (6.40)$$

pour notre modèle sous-maille. On compare cette relation aux résultats numériques en figure 6.9. Le temps de relaxation est plus élevé à faible densité qu'à haute densité. Cette tendance

s'explique facilement par le fait que les collisions à 3 particules, qui dissipent le flux, sont plus nombreuses à haute densité. Notre modèle explique qualitativement cet effet.

Ce travail fait l'objet d'un article publié dans la revue *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, disponible dans sa version définitive à l'adresse suivante :

<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/aba577>.

6.4 Manuscrit accepté pour publication

Sub-grid modelling for a diffusive lattice gas

V Labarre^{1,2}, B Dubrulle¹ and D Paillard²

¹ SPEC, CEA, CNRS, Université Paris-Saclay, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

² Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement, UMR 8212 CEA-CNRS-UVSQ, IPSL and Université Paris-Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

E-mail: vincent.labarre@lsce.ipsl.fr, berengere.dubrulle@cea.fr

Abstract. We address the sub-grid modeling problem of a simple two-dimensional diffusive lattice gas. We observe that the temporal variation of the coarse-grained current knowing the values of the coarse-grained density, its gradient, and the coarse-grained current is a Gaussian random variable in the low current limit. For this limit, we propose a simple sub-grid model based on a stochastic relaxation equation for the coarse-grained current that takes into account the size of the meshes. The method employed here may be suitable to other systems where we need to represent the small-scale dynamics, as far as the locality of the coarse-grained dynamics is verified.

Keywords: Lattice Gas, Statistical Physics, Sub-Grid Modelling

Submitted to: *J. Phys. A: Math. Gen.*

1. Introduction

Turbulent flows are ubiquitous in natural and industrial flows. Despite their large variety, they all share common characteristics, such as chaotic dynamics (i.e. sensitivity to initial condition) and huge range of scales. The combination of the two properties forbids the prediction of their evolution in a deterministic way, and claims for a statistical description [1]. On the other hand, the smallest scales of the flow are irrelevant for practical purposes, while their resolution represents the most important part of the computational cost. This justifies procedures where only the evolution of the coarse-grained fields is considered, while sub-grid scales are modelled. There is still no universal approach to represent the effect of unresolved scales on the resolved ones. The problem couples the dynamics and the coarse-graining procedure. All methods need, at some point, to introduce empirical parameters (eddy viscosity models [2]) and/or idealized physical hypotheses (see for example [3]). This may lead to unwanted drawbacks, like non-conservation of energy or uncontrolled dependence of the empirical parameters with the coarse graining (in the Smagorinski model for example [4], the size of the mesh in the numerical grid is introduced for dimensional consistency).

Arbitrariness of the modelling could be decreased using systematic and well controlled procedure, that includes coarse-graining. One major difficulty relies on the non-equilibrium nature of the turbulence, in which all physical quantities (mass, momentum, energy, tracers) flow into a system due to an external forcing. While there is presently no systematic out-of-equilibrium theory for turbulence, there has been huge progress in characterization of out-of-equilibrium properties of simplified statistical models. Those models fall into two categories. First, Lattice Gas Cellular Automata (LGCA) are a discrete space-time models version of kinetic theory of gas [5, 6, 7, 8]. It was shown, by using classical tools of kinetic theory, that they are able to represent real flow under reasonable approximations. Second, Stochastic Lattice Gases (SLG) have been introduced in several contexts (DNA modelling, traffic flows, paradigmatic non-equilibrium systems) [9]. They have the particularity to be conceptually simple enough to allow detailed computations and complicated enough to represent some interesting features like phase transitions. For example, the detailed statistics of density and current has been derived for some one-dimensional models using the Matrix Ansatz [10], or the Bethe Ansatz [11]. It was also shown that we can compute the probability of observing atypical density and current profiles directly at the macroscopic level (i.e. computing the large deviation functional of the density and current) in the stationary state using the Macroscopic Fluctuation Theory [12, 13, 14, 15]. Both LGCA and SLG represent ideal bench test for conceptual ideas on sub-grid modelling because they are conceptually far more simple than a real fluid and are easily simulated. The main difference between LGCA and SLG is that LGCA are not solvable analytically (except in the lattice Boltzmann approximation in some case [16]).

The goal of the present study is to look for an improved understanding of basic sub-grid modelling, by using a simplified model of diffusion based upon a two-dimensional diffusive LGCA. In classical turbulence theory, such systems would be naturally modelled using an eddy viscosity. Here, we show that the model is actually more involved, while still conceptually simple. Our procedure relies upon numerical analysis of the typical behaviour of the coarse-grained current in a two-dimensional diffusive LGCA as a function of the coarse-grained density, its gradient, and the size of the cubic spatio-temporal coarse-graining window. We show that the temporal variation of the coarse-grained current, at fixed coarse-grained density and its gradient, is a Gaussian random variable whose average is given by a relaxation to the hydrodynamic current at a given rate and root mean square that are strongly influenced by the coarse-graining. Using these observations, we propose a simple sub-grid model to describe the evolution of the coarse-grained current.

The outline of the paper is as follows. In a first part, we present our model (part 2). In a second part, we present our numerical results for the conditional PDF of the temporal variation of the coarse-grained current (part 3) and we propose a simple stochastic sub-grid model for the coarse-grained current. We discuss our results and perspectives in part 4. The derivation of the evolution equation of the average density is given in the Appendix A.

2. Model

2.1. Microscopic dynamics

We study a variant of the model introduced by Hardy, de Pazzis and Pomeau [17, 18] (HPP model). It consists on a square lattice \mathcal{L} of $L \times L$ nodes (see figure 1). Each node consists in four channels which correspond to the velocities of the model ($c_1 = (1, 0)$, $c_2 = (0, 1)$, $c_3 = (-1, 0)$, $c_4 = (0, -1)$). Occupation of the channel i at discrete time t_* and discrete position $r_* = (x_*, y_*)$ is noted $n_i(r_*, t_*)$. A channel can be occupied by one particle of unit mass or can be empty (exclusion principle), such that $n(t_*) = (n_i(r_*, t_*), i = 1, \dots, 4, r_* \in \mathcal{L})$ is the Boolean field that gives the configuration of the system at time t_* . At each discrete time step, particles at a same node are collided and propagated to nearest nodes according to their velocities. Collision changes a pre-collision state $s = (s_i, i = 1, \dots, 4)$ to a post-collision state $s' = (s'_i, i = 1, \dots, 4)$ with probability $A_{s's}$ where s_i is the occupation of channel i (Boolean variable). Here, we consider two types of collisions. Frontal collision occurs with a probability p when there is two particles with opposite velocities at the node. This collision conserves mass and momentum. Three particles collision occurs with a probability q . It consists to flip the velocity of the particle which does not face another one. This collision conserves mass but not momentum. It induces a tendency of particles to turn round more frequently when going in high density regions (where three particles collisions occurs more frequently).

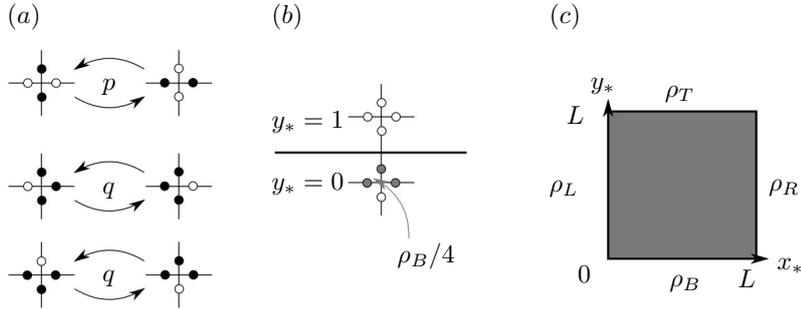


Figure 1. (a) Collision rules of the model. The two particles collision occurs with a probability p , and three particles collision occurs with a probability q . (b) Bottom boundary condition: at $y_* = 0$, channels 1, 2 and 3 are filled randomly with probability $\rho_B/4$ and particle in cell 4 come from the bulk so ρ_B represents the density of the bottom reservoir. Similar conditions are applied on the other boundaries with different densities for the reservoirs. (c) View of the lattice of $L \times L$ nodes between reservoirs at densities ρ_L ($x_* = 0$), ρ_B ($y_* = 0$), ρ_R ($x_* = L$) and ρ_T ($y_* = L$).

This collision destroys spurious invariants like the particles-holes symmetry (duality) and obviously the conservation of horizontal (vertical) current along horizontal (vertical) lines. The three particle collision is the main difference between our model and the HPP model. These collision rules respect the detailed balance ($A_{s's} = A_{s's'} \forall s, s'$), and hence semi-detailed balance:

$$\sum_{s'} A_{ss'} = \sum_{s'} A_{s's} = 1, \quad \forall s, \quad (1)$$

Since only the number of particles is conserved by collisions, we observe a diffusive behaviour at large scales. Propagation consists to move particles to neighbouring nodes according to their velocity $n_i(r_*) \rightarrow n_i(r_* + c_i)$. If $p = q = 1$ then the evolution of the system inside the bulk is deterministic. At the boundaries, particles are injected in vacant channels (i.e. those that are not filled by particles propagated from the bulk) with a probability equal to the density of the reservoir divided by four (the number of channels per node). We introduce the microscopic observables

$$\rho_*(r_*, t_*) = \sum_{i=1}^4 n_i(r_*, t_*) = 0, 1, 2, 3, 4, \quad (2)$$

$$j_{*\alpha}(r_*, t_*) = \sum_{i=1}^4 n_i(r_*, t_*) c_{i\alpha} = -1, 0, 1, \quad (3)$$

which are the microscopic density and the microscopic current of particles in the α 's direction.

To obtain the macroscopic evolution of Lattice gas [5, 7, 8], we introduce an ensemble average procedure $\langle \cdot \rangle$ that connects the discrete, microscopic state with the

macrostate which is assumed to vary slowly (at least in the limit of large lattice size and large time). We introduce

$$N_i = \langle n_i \rangle, \quad \rho = \langle \rho_* \rangle, \quad j_\alpha = \langle j_{*\alpha} \rangle, \quad (4)$$

that are the average population of particle with speed c_i , the average density, and the α 's component of the average current of particles.

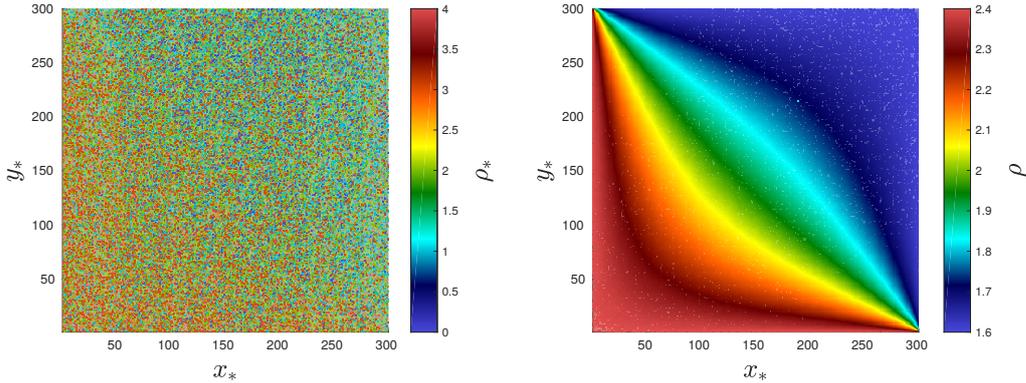


Figure 2. Simulation for $L = 300$, $p = q = 1$, $\rho_L = \rho_B = 2.4$ and $\rho_R = \rho_T = 1.6$. Left: instantaneous microscopic density field in stationary state. Right: average density field measured in stationary state over 10^6 time steps.

We introduce the following macroscopic space and time variables

$$x = \epsilon x_*, \quad y = \epsilon y_*, \quad t = \epsilon t_* \quad (5)$$

where $\epsilon = 1/L$. This convective scaling is more relevant to study the coarse-grained dynamics than the diffusive scaling used in the appendix. It can be shown (see Appendix A), that we have the following evolution equation for the average density:

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha j_\alpha = 0, \quad (6)$$

with average current (changed by a factor ϵ compared to the appendix due to the convective scaling).

$$j_\alpha(\rho, \partial_\alpha \rho) = \left(\frac{1}{4} - \frac{4}{q\rho^2} \right) \epsilon \partial_\alpha \rho. \quad (7)$$

We note the presence of an anti-diffusive term $\frac{\epsilon}{4} \partial_\alpha \rho$ in the expression of the current. This is a spurious term that always appears in the transports coefficients of lattice gas models due to the discrete nature of the dynamics (see, for example, equation 7.4 of [5]). This term is not problematic here since the lattice gas is viewed as a dynamical system that allows illustration of the sub-grid modeling problem while keeping numerical and theoretical analysis simple. The important relevant characteristic of our system is its non-equilibrium nature. We show in figure 2 the microscopic and average density field in stationary state for our simulation: $L = 300$, $p = q = 1$, $\rho_L = \rho_B = 2.4$ and

$\rho_R = \rho_T = 1.6$ and 10^6 time steps in the statistically stationary state. It is also possible to show that the variance of the microscopic current depends on the average density:

$$\langle (j_{*x} - \langle j_{*x} \rangle)^2 \rangle = \frac{\rho}{2} \left(1 - \frac{\rho}{4} \right) \equiv \sigma_*^2(\rho). \quad (8)$$

2.2. Coarse-grained dynamics

We coarse grain space and time in cubic mesocells of τ time steps and $\tau \times \tau$ nodes where τ is called the coarse graining factor. It is therefore possible to define the coarse-grained density ρ_τ and the coarse-grained current j_τ as the average values of the microscopic density and the microscopic current over the mesocell $\mathcal{M}_\tau(r, t) = \{(x_*, y_*, t_*) \mid 0 \leq x_* - Lx < \tau, 0 \leq y_* - Ly < \tau, 0 \leq t_* - Lt < \tau\}$ at position $r = (x, y)$ and time t :

$$\tau^3 \rho_\tau(r, t) = \sum_{(r_*, t_*) \in \mathcal{M}_\tau(r, t)} \sum_{i=1}^4 n_i(r_*, t_*) \quad (9)$$

$$\tau^3 j_{\tau\alpha}(r, t) = \sum_{(r_*, t_*) \in \mathcal{M}_\tau(r, t)} \sum_{i=1}^4 n_i(r_*, t_*) c_{i\alpha}. \quad (10)$$

An instantaneous coarse-grained density field for our simulation with $\tau = 5$ is shown in figure 3. Since there is no net separation of scales (i.e. τ cannot be considered infinite), the fluctuations of the coarse-grained density field are still important.

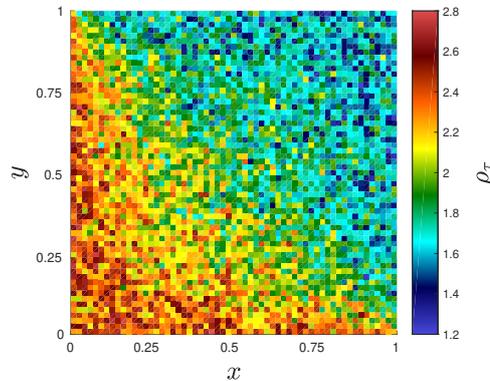


Figure 3. Instantaneous coarse-grained density field for our simulation with a coarse graining factor $\tau = 5$.

To simulate the evolution of the coarse-grained field directly, we need a relation that gives the coarse-grained current as a function of the coarse-grained density, its gradient and the coarse graining factor to close the continuity equation

$$\partial_t \rho_\tau + \partial_\alpha j_{\tau\alpha} = 0. \quad (11)$$

Since the collisions are local (i.e. involve only particles at one node at each time step), the information does not travel faster than the particles which propagate at a fixed speed 1. It follows that what happens in a mesocell at position (x, y) and a given time t

only depends on the configurations of the neighbouring mesocells $(x \pm 0, \epsilon\tau, y \pm 0, \epsilon\tau)$ at times $t - \epsilon\tau$. It means that the law governing the evolution of the coarse-grained density is local. Because there is no scale separation, we expect to observe a lag between the coarse-grained current response and the applied coarse-grained density (this rheological property is shared by turbulence and viscoelastic fluids). We therefore have to model the temporal variations of the coarse-grained current. In general, these variations are expected to vary with the coarse-grained density, its gradient, the coarse graining factor, but also the dynamics (i.e. p and q). Assuming that the temporal variation of one component of the current does not depend on the coarse-grained gradient in the transverse direction, we search a constitutive relation for the current as:

$$\partial_t j_{\tau\alpha} = \mathcal{F}_{\tau\alpha}(\rho_\tau, \partial_\alpha \rho_\tau, p, q, \eta) \quad (12)$$

where η is the noise representing the sub-mesocell variability.

To this end, we save for each mesocell of the simulation: the coarse-grained current at two successive times and the coarse-grained density measured in the mesocell, and the coarse-grained density of the eight neighbouring mesocells. It allows to compute the quantities

$$v_{\tau\alpha}(r, t) \equiv \frac{j_{\tau\alpha}(r, t + \epsilon\tau) - j_{\tau\alpha}(r, t)}{\tau} \quad \alpha = x, y, \quad (13)$$

$$g_{\tau x}(r, t) \equiv \frac{\rho_\tau(x + \epsilon\tau, y, t) - \rho_\tau(x - \epsilon\tau, y, t)}{2\tau}, \quad (14)$$

$$g_{\tau y}(r, t) \equiv \frac{\rho_\tau(x, y + \epsilon\tau, t) - \rho_\tau(x, y - \epsilon\tau, t)}{2\tau}, \quad (15)$$

which are respectively the first-order approximation of the temporal derivative of the coarse-grained current and the second-order approximation of the spatial derivatives of the coarse-grained density in the microscopic unit. It follows that $v_{\tau\alpha}/\epsilon$ and $g_{\tau\alpha}/\epsilon$ are the finite differences approximations of the spatial derivative in the macroscopic scale estimated with the coarse-grained fields. These are the quantities that need to be modeled in order to perform simulation of the coarse-grained field directly.

3. Results

3.1. Conditional probability distribution of the current

We define $p_{\tau\alpha}(\hat{v}|\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g})$ the conditional PDFs of observing $v_{\tau\alpha} \in [\hat{v} - \frac{d\hat{v}}{2}, \hat{v} + \frac{d\hat{v}}{2}]$ knowing that $j_{\tau\alpha} \in [\hat{j} - \frac{d\hat{j}}{2}, \hat{j} + \frac{d\hat{j}}{2}]$, $\rho_\tau \in [\hat{\rho} - \frac{d\hat{\rho}}{2}, \hat{\rho} + \frac{d\hat{\rho}}{2}]$, and $g_{\tau\alpha} \in [\hat{g} - \frac{d\hat{g}}{2}, \hat{g} + \frac{d\hat{g}}{2}]$. In order to identify the structure of these PDFs, it is quite useful to work with normalized random variables. Therefore, we introduce the following random variables:

$$\delta_{\tau\alpha}(\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g}) = \frac{v_{\tau\alpha} - \langle v_{\tau\alpha} \rangle_{\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g}}}{\sqrt{\langle (v_{\tau\alpha} - \langle v_{\tau\alpha} \rangle_{\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g}})^2 \rangle_{\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g}}}} \quad \alpha = x, y, \quad \tau > 1 \quad (16)$$

where

$$\langle v_{\tau\alpha}^n \rangle_{\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g}} = \int \hat{v}^n p_{\tau\alpha}(\hat{v} | \hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g}) d\hat{v} \quad (17)$$

is the conditional n^{th} moment of the variation of the coarse-grained current knowing the coarse-grained density and its gradient.

In figure 4, we have represented the PDFs of $\delta_{\tau\alpha}(\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g})$ for various values of $\hat{\rho}$, \hat{g} , $\tau = 10, 15, 20, 25, 30$ and $\alpha = x, y$. We emphasize that the analysis relies on the numerical simulation in the statistically stationary steady-state for $\rho_L = \rho_B = 2.4$, $\rho_R = \rho_T = 1.6$, and $p = q = 1$. The histograms are computed dividing \hat{j} into 19 windows between -0.04 and 0.04 , $\hat{\rho}$ divided into 16 windows between 1.2 and 2.8 , and \hat{g} divided into 19 windows between -0.03 and 0.03 . The distributions are colored differently depending on \hat{j} . We have only retained the samples of size > 2000 to compute the empirical PDFs in order to limit noise.

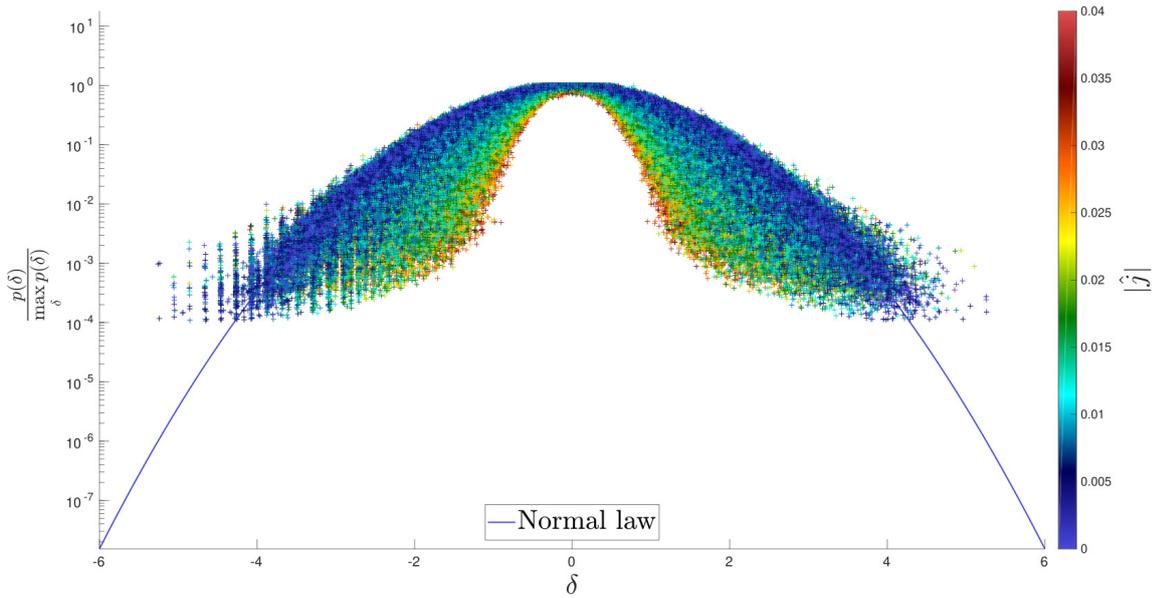


Figure 4. Empirical PDFs of the variables $\delta_{\tau\alpha}$ computed in our simulation for various $\hat{j}, \hat{\rho}, \hat{g}, \tau = 10, 15, 20, 25, 30$ and $\alpha = x, y$. The Normal law behaviour is indicated by a blue thick line.

For small values of the current $|\hat{j}| \ll 1$ (in blue in figure 4), one observes a universal Normal behavior meaning that $v_{\tau\alpha}$ is a Gaussian random variable fully determined by its mean value and its root mean square (that a priori both depend on the coarse-grained density, its gradient, and the coarse-graining factor) in the limit of low current (or equivalently the low mean speed of particles). We also observe that higher values of the coarse-grained current (in red in figure 4) are associated with a non-Gaussian behavior. This non-Gaussian behavior for high-values of the current is of secondary importance for two reasons. The first is that lattice gas is usually studied in the low-speed limit,

in particular, to ensure the isotropy of the macroscopic dynamics. The second reason is that the high values of the current are atypical. When we compute the empirical conditional probability distributions of observing $v_{\tau\alpha}$ only knowing ρ_τ and $g_{\tau\alpha}$ (but not $j_{\tau\alpha}$), we recover a Gaussian behavior. Then, it is of prime importance to model the coarse-grained dynamics in the low current limit.

The Gaussian behavior leads us to assume that $v_{\tau\alpha}$ can be modelled by the following equation

$$v_{\tau\alpha} = -\frac{j_{\tau\alpha} - \mu_{\tau\alpha}}{r_\tau} + \sigma_\tau \eta_\alpha, \quad (18)$$

where $\mu_{\tau\alpha}$ is the relaxed current (i.e. in stationary state in the absence of fluctuations), r_τ is the relaxation time, σ_τ is the root mean square of $v_{\tau\alpha}$, and η_α $\alpha = x, y$ are decorrelated normal random variables. Both $\mu_{\tau\alpha}$, r_τ and σ_τ have to be modelled to construct the sub-grid model. If they are considered as constant, the Gaussian behavior will follow. Note however that if we allow σ_τ and r_τ to be statistical variables, we could get a non-Gaussian solution of equation (18) as a superstatistics [19]. In the sequel, however, we concentrate on low-current modeling and assume that σ_τ and r_τ are deterministic functions that need to be modeled. For a given value of ρ_τ and $g_{\tau\alpha}$, the linear regression for the points $v_{\tau\alpha}$ vs $j_{\tau\alpha}$ has a slope $-1/r_\tau$, an intercept $\mu_{\tau\alpha}/r_\tau$ and an error term σ_τ . This is how we estimate $\mu_{\tau\alpha}$, r_τ and σ_τ numerically. In the following, we discuss the behaviour of these functions with ρ_τ , $g_{\tau\alpha}$, q and τ .

3.2. Relaxed current $\mu_{\tau\alpha}$

The figure 5 shows $\mu_{\tau\alpha}$ for $\tau = 10$ in our simulation and the average current predicted in the hydrodynamic limit with a convective scaling (given by equation (7)). We do not show the results for other values of τ because our statistics are not sufficient to provide a converged estimate of $\mu_{\tau\alpha}$ for large values of $g_{\tau\alpha}$. Quite remarkably, we observe that the coarse-grained current tends to relax to the average current (obtained in the hydrodynamic limit) estimated by the local coarse-grained density and its gradient. It means that the relaxed current is invariant under the effect of coarse graining. This suggests that the relaxed coarse-grained current obeys the same functional relation as a function of the (coarse-grained) gradient density than the microscopic gradient, a property that can be viewed as a kind of Germano identity [20]. In turbulence, such identity is used via a hypothesis of scale invariance of the turbulence in the inertial range, resulting in a Reynolds stress that keeps the same shape above and below the cut-off. In our case, the Germano identity amounts to take

$$\mu_{\tau\alpha}(\rho_\tau, g_{\tau\alpha}, q) = \left(\frac{1}{4} - \frac{4}{q\rho_\tau^2} \right) g_{\tau\alpha} \quad (19)$$

for our sub-grid model.

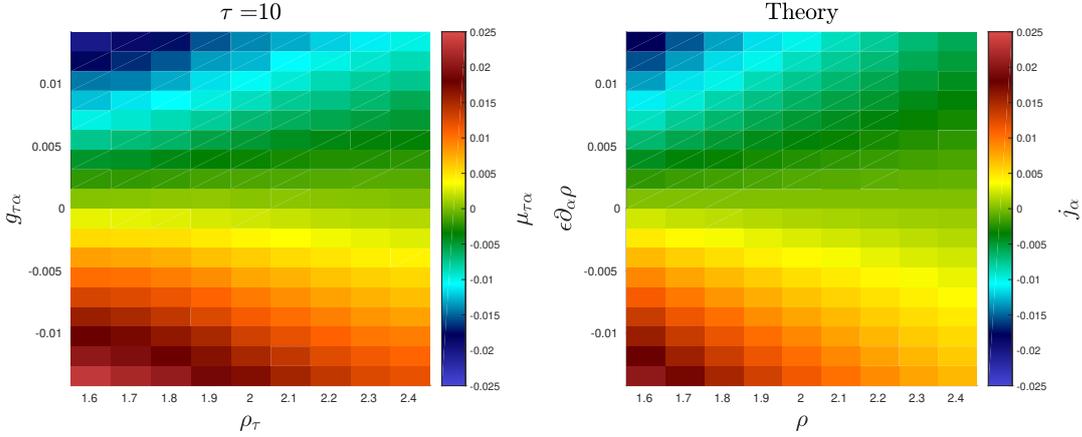


Figure 5. Left: relaxed coarse-grained current $\mu_{\tau\alpha}$ as a function of the coarse-grained density and its gradient for $\tau = 10$ in our simulation. Right: theoretical relation obtained by the Chapman-Enskog expansion for the averaged observables.

3.3. Relaxation time r_τ and typical fluctuations σ_τ

We show on figure 6 the relaxation time (divided by the coarse graining factor) and the root mean square of $v_{\tau\alpha}$ as a function of the coarse-grained density and its gradient for $\tau = 10$.

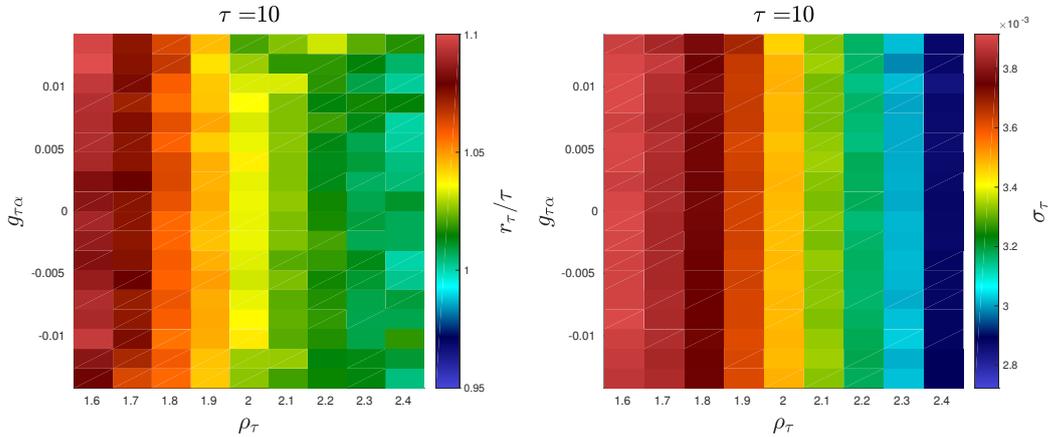


Figure 6. Relaxation time r_τ divided by the coarse graining factor (left) and the root mean square of the variation of the coarse-grained current σ_τ (right) as functions of the coarse-grained density and its gradient for $\tau = 10$ in our simulation.

We observe that both r_τ and σ_τ depend little on the gradient of the coarse-grained density (at least for the range of parameter we have investigated), suggesting that the relaxation and the fluctuations of $v_{\tau\alpha}$ can be modelled by the equilibrium fluctuations at the coarse-grained size at a first approximation. We propose a simple model where we simplify the dynamics by considering that at each discrete time step, the mesocell

Table 1. Our model for the gain/loss $X = -1, 0, 1$ of particle with speed c_1 at a given time at each node in the mesocell for the population N_{s1} .

Source/Sink	nodes	probability distribution
entry (left boundary)	τ	$\begin{cases} P(X = -1) = 0, \\ P(X = 0) = 1 - \rho_\tau/4, \\ P(X = 1) = \rho_\tau/4. \end{cases}$
exit (right boundary)	τ	$\begin{cases} P(X = -1) = N_{s1}, \\ P(X = 0) = 1 - N_{s1}, \\ P(X = 1) = 0. \end{cases}$
2 particules collision	τ^2	$\begin{cases} P(X = -1) = N_{s1}(1 - N_{s2})N_{s3}(1 - N_{s4})p, \\ P(X = 0) = 1 - P(X = -1) - P(X = 1), \\ P(X = 1) = (1 - N_{s1})N_{s2}(1 - N_{s3})N_{s4}p. \end{cases}$
3 particules collision	τ^2	$\begin{cases} P(X = -1) = N_{s1}N_{s2}(1 - N_{s3})N_{s4}q, \\ P(X = 0) = 1 - P(X = -1) - P(X = 1), \\ P(X = 1) = (1 - N_{s1})N_{s2}N_{s3}N_{s4}q. \end{cases}$

is spatially statistically homogeneous (i.e. we neglect the spatial inhomogeneities at all time step of the mesocell). This crude approximation allows to describe the state of the box at each time step by the mean occupations of channels in the mesocell, noted $N_{si}(t_*)$, $i = 1, \dots, 4$. It implicitly assumes an instantaneous mixing of particles at each discrete time step inside the bulk of the mesocell. To write the evolution equation for the N_{si} 's, one must distinguish the surface effects (rate at which particles enter/leave the box), and the volume effect due to collisions. Naturally, the scalings of these processes are different since they do not involve the same number of nodes. We model the variations of the populations at each time step by considering the different sources and sinks as stochastic processes. For a given population i , particles enter at a boundary with a rate $\rho_\tau/4$ at each node. They exit the mesocells at the opposite boundary with a rate N_{si} at each node. By doing so, we implicitly neglect the collision step at boundaries. Particles populations are mixed by collisions that occur in the all bulk. It is taken into account by considering the effect of collisions of the mean population at one node. For example, the sources/sinks for N_{s1} are given in table 1.

Considering τ to be sufficiently large, we can approximate the random change of populations with Gaussian random variables using the central limit theorem. For example, the resulting stochastic equation describing the evolution of N_{s1} is

$$\begin{aligned} \tau^2 (N_{s1}(t_* + 1) - N_{s1}(t_*)) = & \tau \frac{\rho_\tau}{4} + \sqrt{\tau \frac{\rho_\tau}{4} \left(1 - \frac{\rho_\tau}{4}\right)} \eta_1^{in} - \tau N_{s1} - \sqrt{\tau N_{s1}(1 - N_{s1})} \eta_1^{out} \\ & + \tau^2 p N_p + \sqrt{\tau^2 \sigma_p^2} \eta_p + \tau^2 q N_{qx} + \sqrt{\tau^2 \sigma_{qx}^2} \eta_{qx} \end{aligned} \quad (20)$$

where η_1^{in} , η_1^{out} , η_p and η_{qx} are all independents, identically distributed normal random

variables, and

$$N_p = (1 - N_{s1})N_{s2}(1 - N_{s3})N_{s4} - N_{s1}(1 - N_{s2})N_{s3}(1 - N_{s4}), \quad (21)$$

$$\sigma_p^2 = (1 - N_{s1})N_{s2}(1 - N_{s3})N_{s4}p + N_{s1}(1 - N_{s2})N_{s3}(1 - N_{s4})p - (pN_p)^2, \quad (22)$$

$$N_{q_x} = (1 - N_{s1})N_{s2}N_{s3}N_{s4}q - N_{s1}N_{s2}(1 - N_{s3})N_{s4}, \quad (23)$$

$$\sigma_{q_x}^2 = (1 - N_{s1})N_{s2}N_{s3}N_{s4}q + N_{s1}N_{s2}(1 - N_{s3})N_{s4}q - (qN_{q_x})^2. \quad (24)$$

Similarly, one can write down the equation for N_{s3}

$$\begin{aligned} \tau^2 (N_{s3}(t_* + 1) - N_{s3}(t_*)) &= \tau \frac{\rho_\tau}{4} + \sqrt{\tau \frac{\rho_\tau}{4} \left(1 - \frac{\rho_\tau}{4}\right)} \eta_3^{in} - \tau N_{s3} - \sqrt{\tau N_{s3}(1 - N_{s3})} \eta_3^{out} \\ &\quad + \tau^2 p N_p + \sqrt{\tau^2 \sigma_p^2} \eta_p - \tau^2 q N_{q_x} - \sqrt{\tau^2 \sigma_{q_x}^2} \eta_{q_x}. \end{aligned} \quad (25)$$

We point out that η_3^{in} and η_3^{out} are also identically distributed normal random variables, and that η_p and η_{q_x} are the same random variables involved in (20) due to the conservation of the number of particles in the mesocell during the collision step.

Now, we introduce the spatially coarse-grained current (over a square mesocell) in the x direction $j_{sx} \equiv N_{s1} - N_{s3}$. One obtains the evolution equation for j_{sx} by taking the difference of (20) and (25), divided by τ^2 :

$$\begin{aligned} j_{sx}(t_* + 1) - j_{sx}(t_*) &= -\frac{1}{\tau} j_{sx} + 2q N_{q_x} + \sqrt{\frac{1}{\tau^3} \frac{\rho_\tau}{4} \left(1 - \frac{\rho_\tau}{4}\right)} (\eta_1^{in} - \eta_3^{in}) \\ &\quad - \sqrt{\frac{1}{\tau^3} N_{s1}(1 - N_{s1})} \eta_1^{out} + \sqrt{\frac{1}{\tau^3} N_{s3}(1 - N_{s3})} \eta_3^{out} + 2\sqrt{\frac{1}{\tau^2} \sigma_{q_x}^2} \eta_{q_x}. \end{aligned} \quad (26)$$

To simplify the last equation, we linearise N_{q_x} around the mean occupation of channels $\rho_\tau/4$: $N_{si}(t_*) \simeq \rho_\tau/4 + \delta N_{si}(t_*)$, $i = 1, \dots, 4$ with $\delta N_{si}(t_*) \ll 1$. Moreover, we consider only the additive part of the noises. We therefore evaluate

$$N_{q_x} \simeq \frac{\rho_\tau^2}{16} (\delta N_{s3} - \delta N_{s1}) = -\frac{\rho_\tau^2}{16} j_{sx}, \quad (27)$$

$$\sqrt{N_{si}(1 - N_{si})} \simeq \sqrt{\frac{\rho_\tau}{4} \left(1 - \frac{\rho_\tau}{4}\right)}, \quad i = 1, \dots, 4 \quad (28)$$

$$\sigma_{q_x}^2 \simeq 2q \left(\frac{\rho_\tau}{4}\right)^3 \left(1 - \frac{\rho_\tau}{4}\right). \quad (29)$$

It follows that

$$\begin{aligned} j_{sx}(t_* + 1) - j_{sx}(t_*) &= -\left(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8}\rho_\tau^2\right) j_{sx} + \sqrt{\frac{1}{\tau^3} \frac{\rho_\tau}{4} \left(1 - \frac{\rho_\tau}{4}\right)} (\eta_1^{in} - \eta_1^{out} - \eta_3^{in} + \eta_3^{out}) \\ &\quad + \sqrt{\frac{1}{\tau^2} \frac{q}{8}\rho_\tau^3 \left(1 - \frac{\rho_\tau}{4}\right)} \eta_{q_x}. \end{aligned} \quad (30)$$

Now, we use basic properties of independent Gaussian random variables to write this equation in a more compact form:

$$j_{sx}(t_* + 1) - j_{sx}(t_*) = -\left(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8}\rho_\tau^2\right) j_{sx} + \sqrt{\frac{1}{\tau^2} \rho_\tau \left(1 - \frac{\rho_\tau}{4}\right)} \left(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8}\rho_\tau^2\right) \eta_x \quad (31)$$

where η_x is a normal random variable. The equation (31) is a Langevin equation that arise in many contexts in Physics (see for example [21] for an introduction to stochastic

methods). The large deviation function of the equivalent of the time integrated current in our model, given by the limit for $\tau \rightarrow \infty$ of

$$j_{\tau x}(t) = \frac{1}{\tau} \sum_{t \leq ct_* < t + \epsilon\tau} j_{sx}(t_*), \quad (32)$$

has already been computed for this process (see, for example, the last section of [22]). One can deduce from these results that the distribution of $j_{\tau x}$ satisfies a large deviation principle

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} -\frac{1}{\tau} \ln P(j_{\tau x} = j) = I(j) \quad (33)$$

where the rate function is given by

$$I(j) = \frac{1}{2} \frac{(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8}\rho_\tau^2)^2}{\frac{1}{\tau^2}\rho_\tau(1 - \frac{\rho_\tau}{4})(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8}\rho_\tau^2)} j^2 = \frac{\tau^2}{2} \frac{(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8}\rho_\tau^2)}{\rho_\tau(1 - \frac{\rho_\tau}{4})} j^2. \quad (34)$$

Therefore, our model states that $j_{\tau\alpha}$ is a Gaussian random variable with mean zero and root mean square $\sqrt{\frac{\rho_\tau(1 - \frac{\rho_\tau}{4})}{\tau^3(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8}\rho_\tau^2)}}$. We suggest that $v_{\tau\alpha}$ fluctuates like $j_{\tau\alpha}/\tau$. It is equivalent to choose

$$\sigma_\tau(\rho_\tau, q) = \sqrt{\frac{\rho_\tau(1 - \frac{\rho_\tau}{4})}{\tau^5(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8}\rho_\tau^2)}} \quad (35)$$

for our sub-grid model. In figure 7, we compare this model to the numerical results. The

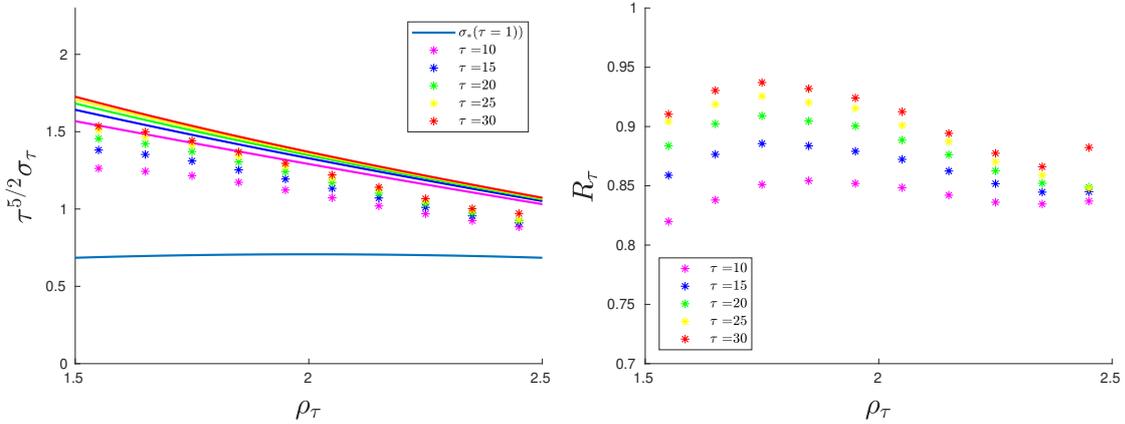


Figure 7. Left: σ_τ multiplied by $\tau^{5/2}$ as a function of the coarse-grained density. The model (35) (in full lines) and the root mean square of the microscopic current (in light blue full line) are compared to the numerical results (in stars) for various values of τ . Right: Ratio between the numerical value of σ_τ and our model R_τ .

numerical results show that as far as we coarse grain, we change the shape and the scaling of the fluctuations of the coarse-grained current as a function of the coarse-grained density. Strikingly, σ_τ is no more symmetric around the density $\rho_\tau = 2$. It goes from $\sqrt{\frac{\rho}{2}(1 - \frac{\rho}{4})}$ for the microscopic fluctuations (corresponding to $\tau = 1$) to a limit function that we have not attained with our limited simulation. Our model provides the correct

variation of $\sigma_\tau(\rho)$ with respect to $(\rho \simeq 2)$. To quantify the relative error, we compute the ratio between the numerical value of σ_τ and our theoretical prediction noted R_τ . It is provided in figure 7. We observe that the variations of R_τ with ρ_τ are rather mild, and that the deviations between the simulation result and the model remain within about 10% for sufficiently large τ (in the regime of $1.5 < \rho_r < 2.0$). This suggests that observed deviations from our theoretical modeling are finite-size effects.

Averaging the equation (31), the evolution of $\langle j_{sx} \rangle$ in the mesocell can be written

$$\langle j_{sx} \rangle(t_* + 1) = a \langle j_{sx} \rangle(t_*), \quad a = 1 - \left(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8} \rho_\tau^2 \right). \quad (36)$$

It yields to the relation

$$\langle j_{sx} \rangle(t'_*) = \langle j_{sx} \rangle(t_*) a^{t'_* - t_*} \quad \forall t_*, t'_* \in \mathbb{N}. \quad (37)$$

Using the last relation in the average of equation (32), we show that

$$\langle j_{\tau x} \rangle(t + \epsilon\tau) = a^\tau \langle j_{\tau x} \rangle(t). \quad (38)$$

It follows that

$$\frac{\langle j_{\tau x} \rangle(t + \epsilon\tau) - \langle j_{\tau x} \rangle(t)}{\tau} = -\frac{1 - a^\tau}{\tau} \langle j_{\tau x} \rangle(t). \quad (39)$$

This equation suggests that the relaxation time for the coarse-grained current is

$$r_\tau(\rho_\tau, q) = \frac{\tau}{1 - a^\tau} = \frac{\tau}{1 - \left(1 - \left(\frac{1}{\tau} + \frac{q}{8} \rho_\tau^2\right)^\tau\right)}. \quad (40)$$

Since $-1 - \frac{1}{\tau} = a(\rho_\tau = 4) \leq a \leq a(\rho_\tau = 0) = 1 - \frac{1}{\tau}$, we expect that in normal conditions (ρ_τ not too close from 4) $|a| < 1$ so $a^\tau \rightarrow 0$ when $\tau \rightarrow \infty$. We observe on figure 8 that this model correctly predicts that the relaxation time converges to τ as τ increases. The agreement between the prediction and the model is better than 10 percent.

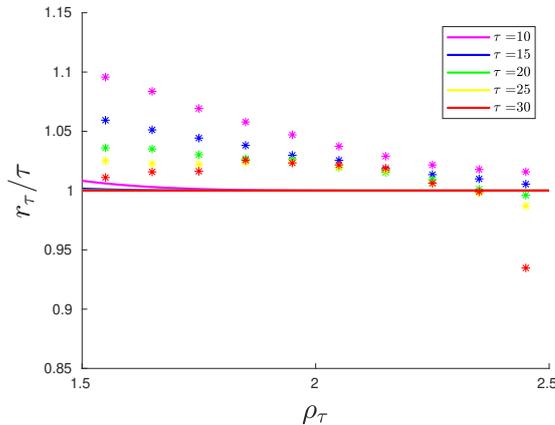


Figure 8. Relaxation time r_τ divided by τ for our simulation with various values of τ (represented with stars) compared to our model (40) (represented with full lines).

4. Discussion and conclusion

In this study, we have addressed the question of sub-grid modelling in a simple diffusive Lattice Gas. In the low current limit, we observed that the first order approximation of the temporal derivative of the coarse-grained current, knowing the coarse-grained density and its gradient, is a Gaussian random variable whose mean and root mean square depend only on the size of the mesocell, the coarse-grained density, its gradient, and eventually on the dynamical parameters of the model. We have proposed a simple model where the temporal variation of the coarse-grained current is modelled as the sum of an average relaxation to a relaxed current at a given relaxation time, and a Gaussian noise. Observing the fact that the root mean square and the relaxation time depend little on the gradient of density, we have constructed a simple equilibrium model where the spatial inhomogeneities inside a mesocell are neglected to determine the variations of the root mean square of the grained current and the relaxation time. Our model agrees quantitatively with the numerical results, providing a agreement better than 20 percent for the fluctuations, and better than 10 percent for the relaxation time. In particular, it explains the variations of the relaxation time and the root mean square as a function of the coarse-grained density. The relaxed current is simply given by taking the hydrodynamic limit.

LGCA and SLG have been studied extensively as simplified model of kinetic theory [8] or paradigmatic models of non-equilibrium physics [9]. However, up to our knowledge, these models are not used as conceptual object to learn about sub-grid modelling (we can note one attempt to compute a turbulent viscosity with such model [23]). Yet, deriving sub-grid models for Lattice Gases seems to be an interesting problem to deal with before addressing more difficult problems like the turbulence modelling. In particular to understand the non-trivial variations of the coefficients that are introduced empirically in turbulence models. As an example, our simple model for the fluctuations of the current shows that the shape of the root mean square of the coarse-grained current (as a function of the density) is changed when we coarse grain.

Our model for the evolution of the coarse-grained density is finally

$$\partial_t \rho_\tau + \partial_\alpha j_{\tau\alpha} = 0, \quad (41)$$

$$\epsilon \partial_t j_{\tau\alpha} = -\frac{j_{\tau\alpha} - \mu_{\tau\alpha}}{r_\tau} + \sigma_\tau \eta_\alpha, \quad (42)$$

where $\epsilon = 1/L$ is the ratio between the microscopic scale and the size of the system, η_α is a Gaussian white noise and $\mu_{\tau\alpha}$, r_τ and σ_τ are specified in equations (19), (40) and (35).

For this diffusive lattice gas, there remains the question of the non-Gaussian fluctuations observed for the atypical large values of the coarse-grained current. We expect that a refined sub-grid model (that takes into account the spatial inhomogeneities inside the mesocell) can be constructed by extending recent works on SLG (like for the

Zero Range Process [24]) to compute the statistics of coarse-grained observables, taking into account fluctuations at boundaries of the mesocell. Alternatively, one could use the superstatistics formalism to derive more elaborate sub-grid models [19, 25, 26]. It would also be interesting to perform simulations with different boundary conditions, for different values of the dynamical parameters p and q , and for transient simulation to test the robustness of the sub-grid model to various conditions.

An important question is whether one can employ such a method to other systems of practical interest, like turbulent flows. For example, does a relaxation equation similar to the one used here could be used to model the Reynolds stress tensor using the analysis of the coarse-grained velocity field? To our knowledge, such Eulerian model has not been tested for other systems.

Acknowledgments

This work has been supported by the ANR EXPLOIT, grant agreement no. ANR-16-CE06-0006-01. We thank the anonymous referees for their useful comments that have helped to improve significantly the article.

Appendix A. Hydrodynamic limit and microscopic fluctuations of the current

Appendix A.1. Average current

For a LGCA (i.e. for a given lattice and collision rules), one can derive the macroscopic behaviour of observables at large scales via the equation verified by the average quantities (here ρ and j) in the limit of infinite lattice size. The most popular way to it is to apply the multi-scale analysis used in the continuous kinetic theory (the so-called Chapman-Enskog expansion) to the discrete lattice gas. Here, a simple diffusive scaling is sufficient to derive the macroscopic equation for the evolution of the average density. To do this, we start with the local micro-dynamic equation for the Boolean field which is given by the Chapman-Kolmogorov equation [5, 8]. For our simple model with only four velocities, we can explicitly write it:

$$n_1(x_* + 1, y_*, t_* + 1) = n_1(x_*, y_*, t_*) + \zeta_p n_p(x_*, y_*, t_*) + \zeta_{q_x} n_{q_x}(x_*, y_*, t_*), \quad (\text{A.1})$$

$$n_2(x_*, y_* + 1, t_* + 1) = n_2(x_*, y_*, t_*) - \zeta_p n_p(x_*, y_*, t_*) + \zeta_{q_y} n_{q_y}(x_*, y_*, t_*), \quad (\text{A.2})$$

$$n_3(x_* - 1, y_*, t_* + 1) = n_3(x_*, y_*, t_*) + \zeta_p n_p(x_*, y_*, t_*) - \zeta_{q_x} n_{q_x}(x_*, y_*, t_*), \quad (\text{A.3})$$

$$n_4(x_*, y_* - 1, t_* + 1) = n_4(x_*, y_*, t_*) - \zeta_p n_p(x_*, y_*, t_*) - \zeta_{q_y} n_{q_y}(x_*, y_*, t_*), \quad (\text{A.4})$$

with

$$n_p = (1 - n_1)n_2(1 - n_3)n_4 - n_1(1 - n_2)n_3(1 - n_4), \quad (\text{A.5})$$

$$n_{q_x} = (1 - n_1)n_2n_3n_4 - n_1n_2(1 - n_3)n_4, \quad (\text{A.6})$$

$$n_{q_y} = n_1(1 - n_2)n_3n_4 - n_1n_2n_3(1 - n_4), \quad (\text{A.7})$$

where ζ_p (ζ_{q_x} or ζ_{q_y}) represents a Bernoulli random variables with mean p (q), that are decorrelated in space and time, and with the n_i 's. We have omitted the spatio-temporal dependence ($\zeta(x_*, y_*, t_*) \rightarrow \zeta$ and $n_i(x_*, y_*, t_*) \rightarrow n_i$) in the three last equations for brevity.

We now use three assumptions:

- (i) The lattice Boltzmann (Mean Field) approximation: the correlations between particles before collisions are neglected. This allows to write

$$\left\langle \prod_{i \in I} n_i(r_*, t_*) \right\rangle = \prod_{i \in I} \langle n_i(r_*, t_*) \rangle \quad \forall r_* \in \mathcal{L}, t_* \in \mathbb{N}, \quad (\text{A.8})$$

where I is any set of non repeated indices of the channels.

(ii) The Hydrodynamic limit consists to introduce the (dimensionless) variables

$$t = t_*/T, \quad x = x_*/L, \quad y = y_*/L, \quad (\text{A.9})$$

where $T \rightarrow \infty$ and $L \rightarrow \infty$ are the macroscopic time and space (typically the time of the simulation and the size of the Lattice), such that $t, r = (x, y)$ are considered as continuous variables. We then introduce a macroscopic population that varies continuously in space and time

$$f_i(r, t) = \langle n_i(r_*, t_*) \rangle = N_i(r_*, t_*). \quad (\text{A.10})$$

We keep the same notation for the continuous density and current. In the following, we will consider the diffusive scaling $T = L^2$ and introduce the Knudsen number $\epsilon = 1/L \rightarrow 0$.

(iii) We can show that the equilibrium solution (i.e. the solution in stationary state without perturbation) of the system is $f_i^{(0)} = \rho/4$ (we can invoke the Universality Theorem for lattice gases, valid in case of semi-detailed balance and no spurious invariant, in the simple case where only mass is conserved by collisions [5, 8]). We assume small perturbations around this equilibrium such that

$$f_i = \frac{\rho}{4} + \epsilon f'_i, \quad \sum_{i=1}^4 f'_i = 0. \quad (\text{A.11})$$

Averaging (A.1-A.4), using (A.8), substituting (A.11) in (A.5-A.7) and replacing the finite difference by derivatives up to second order in ϵ with the diffusive scaling, we obtain

$$\begin{aligned} \left(\epsilon \partial_x + \epsilon^2 \partial_t + \epsilon^2 \frac{1}{2} \partial_x^2 \right) \left(\frac{\rho}{4} + \epsilon f'_1 \right) &= \epsilon p \frac{\rho}{4} \left(1 - \frac{\rho}{4} \right) (f'_2 + f'_4 - f'_1 - f'_3) \\ &+ \epsilon^2 p \left(1 - \frac{\rho}{2} \right) (f'_2 f'_4 - f'_1 f'_3) \\ &+ \epsilon q (f'_3 - f'_1) \frac{\rho^2}{16} \\ &+ \epsilon^2 q \frac{\rho}{4} (f'_3 - f'_1) (f'_2 + f'_4) + O(\epsilon^3), \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

$$\begin{aligned} \left(-\epsilon \partial_x + \epsilon^2 \partial_t + \epsilon^2 \frac{1}{2} \partial_x^2 \right) \left(\frac{\rho}{4} + \epsilon f'_3 \right) &= \epsilon p \frac{\rho}{4} \left(1 - \frac{\rho}{4} \right) (f'_2 + f'_4 - f'_1 - f'_3) \\ &+ \epsilon^2 p \left(1 - \frac{\rho}{2} \right) (f'_2 f'_4 - f'_1 f'_3) \\ &- \epsilon q (f'_3 - f'_1) \frac{\rho^2}{16} \\ &- \epsilon^2 q \frac{\rho}{4} (f'_3 - f'_1) (f'_2 + f'_4) + O(\epsilon^3). \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Here and in the following, we only treat f'_1 and f'_3 , similar equations hold f'_2 and f'_4 . Recasting the terms of the same order in ϵ , one has

ϵ^1 :

$$\partial_x \frac{\rho}{4} = p \frac{\rho}{4} \left(1 - \frac{\rho}{4} \right) (f'_2 + f'_4 - f'_1 - f'_3) + q (f'_3 - f'_1) \frac{\rho^2}{16}, \quad (\text{A.14})$$

$$-\partial_x \frac{\rho}{4} = p \frac{\rho}{4} \left(1 - \frac{\rho}{4}\right) (f'_2 + f'_4 - f'_1 - f'_3) - q (f'_3 - f'_1) \frac{\rho^2}{16}. \quad (\text{A.15})$$

ϵ^2 :

$$\partial_t \frac{\rho}{4} + \partial_x^2 \frac{\rho}{8} + \partial_x f'_1 = p \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) (f'_2 f'_4 - f'_1 f'_3) + q \frac{\rho}{4} (f'_2 + f'_4) (f'_3 - f'_1), \quad (\text{A.16})$$

$$\partial_t \frac{\rho}{4} + \partial_x^2 \frac{\rho}{8} - \partial_x f'_3 = p \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) (f'_2 f'_4 - f'_1 f'_3) - q \frac{\rho}{4} (f'_2 + f'_4) (f'_3 - f'_1). \quad (\text{A.17})$$

Using (A.14) and (A.15) with (A.11), we show that

$$f'_1 = -f'_3 = -\frac{2}{q\rho^2} \partial_x \rho = \partial_x \left(\frac{2}{q\rho}\right). \quad (\text{A.18})$$

With the same procedure,

$$f'_2 = -f'_4 = -\frac{2}{q\rho^2} \partial_y \rho = \partial_y \left(\frac{2}{q\rho}\right). \quad (\text{A.19})$$

Substituting (A.18) in (A.16), we obtain

$$\partial_t \frac{\rho}{4} + \partial_x^2 \frac{\rho}{8} + \partial_x f'_1 = p \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) (-f_2'^2 + f_1'^2) \quad (\text{A.20})$$

and, similarly,

$$\partial_t \frac{\rho}{4} + \partial_y^2 \frac{\rho}{8} + \partial_y f'_2 = -p \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) (-f_2'^2 + f_1'^2). \quad (\text{A.21})$$

Summing the two last equation and replacing f_1' and f_2' by their expressions in term of density, one obtains the evolution equation for the average density

$$\partial_t \rho + \Delta \left(\frac{\rho}{4} + \frac{4}{q\rho}\right) = 0. \quad (\text{A.22})$$

The stationary solution of the density field can be obtained by solving the Laplace equation for $\rho/4 + 4/q\rho$. We compare this solution to the results of the simulation with $\rho_L = \rho_B = 2.4$, $\rho_R = \rho_T = 1.6$ and deterministic collisions $p = q = 1$ (see figure A1).

We naturally observe that the errors are more important near the corners where density of boundary reservoir is discontinuous. The equation (A.22) corresponds to a non-linear diffusion equation

$$\partial_t \rho = \nabla (D(\rho) \nabla \rho), \quad (\text{A.23})$$

with diffusivity

$$D(\rho) = -\frac{1}{4} + \frac{4}{q\rho^2}, \quad \geq 0 \quad \forall \rho \in]0 : 4], \quad q \in]0 : 1] \quad (\text{A.24})$$

The diffusivity has two contributions. The factor $-1/4$ is a spurious (anti-diffusive) term called propagation diffusivity [27] which emerges from the discrete nature of the velocity set. The term $\frac{4}{q\rho^2}$ will be dominant for $q \left(\frac{\rho}{4}\right)^2 \ll 1$ and is due to the three particles collisions. The hydrodynamic current of particles is then

$$j_\alpha = -D(\rho) \partial_\alpha \rho. \quad (\text{A.25})$$

The last equation has been checked numerically (see figure A2). The points that don't fit well with the theoretical relation correspond to the nodes near the boundaries.

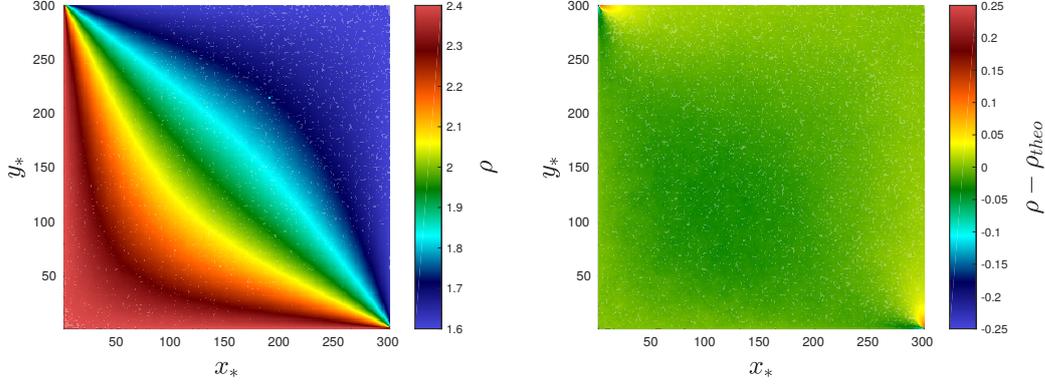


Figure A1. Comparison between the stationary density field solution obtained by a Laplace solver ρ_{theo} and the average density field from simulation ρ . Left: the average density computed over 10^6 time steps. Right: difference with the solution obtained by solving the Laplace equation ρ_{theo} .

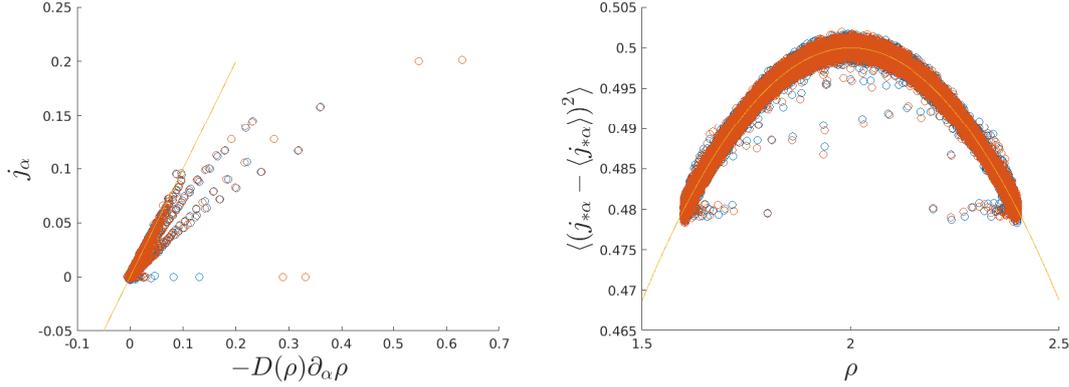


Figure A2. Left: Relation between the average current j_α and its theoretical prediction (A.25): $-D(\rho)\partial_\alpha\rho$. The line $j_\alpha = -D(\rho)\partial_\alpha\rho$ is shown in yellow. Right: Relation between the variance of the microscopic current and local average density. The theoretical relation (A.30): $\sigma_*^2(\rho) = \frac{\ell}{2}(1 - \frac{\ell}{4})$ is shown in yellow. Blue circles represent $\alpha = x$ and orange circles represent $\alpha = y$.

Appendix A.2. Microscopic fluctuations of the current

Using the Boltzmann approximation (A.8), it is easy to write the probability to observe a local state $s = (s_i, i = 1, \dots, 4)$ at node r_* and time t_* using the definition of the mean occupation of channels $N_i(r_*, t_*)$:

$$\mathcal{P}(s) = \prod_{i=1}^4 N_i^{s_i} (1 - N_i)^{(1-s_i)}. \quad (\text{A.26})$$

We can then write the fluctuations of the two components of the current

$$\langle (j_{*x} - \langle j_{*x} \rangle)^2 \rangle = N_1(1 - N_3) + (1 - N_1)N_3 - (N_1 - N_3)^2, \quad (\text{A.27})$$

$$\langle (j_{*y} - \langle j_{*y} \rangle)^2 \rangle = N_2(1 - N_4) + (1 - N_2)N_4 - (N_2 - N_4)^2. \quad (\text{A.28})$$

$$(\text{A.29})$$

Using the small perturbation hypothesis (A.11) and keeping only the zero'th order in ϵ , we obtain

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle (j_{*x} - \langle j_{*x} \rangle)^2 \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle (j_{*y} - \langle j_{*y} \rangle)^2 \rangle \equiv \sigma_*^2(\rho) = \frac{\rho}{2} \left(1 - \frac{\rho}{4} \right). \quad (\text{A.30})$$

We point out that the fluctuation function σ is the same as the one computed in the Simple Symmetric Exclusion Process (SSEP) (see [14]) and is typical for models with exclusion. Numerically, the current verifies the relation (A.30) well (see figure A2). As for the mean current, the points that don't fit well with the theoretical relation correspond to the boundary nodes.

Appendix A.3. Violation of the Boltzmann hypothesis

In practice, the particles can be correlated before collision. To quantify these correlations, we look at the local observables

$$n_p = n_2 n_4 (1 - n_1)(1 - n_3) - n_1 n_3 (1 - n_2)(1 - n_4), \quad (\text{A.31})$$

$$n_{q_x} = -(n_3 - n_1)n_2 n_4, \quad (\text{A.32})$$

$$n_{q_y} = -(n_4 - n_2)n_1 n_3, \quad (\text{A.33})$$

$$n_{xy} = (n_1 - n_3)(n_2 - n_4). \quad (\text{A.34})$$

n_p (n_{q_x} or n_{q_y}) represent the effect of two particles collision (three particles collision along x or y). n_{xy} is related to the correlation between the horizontal et vertical currents. We note N_p (N_{q_x} , N_{q_y} or N_{xy}) the value of $\langle n_p \rangle$ ($\langle n_{q_x} \rangle$, $\langle n_{q_y} \rangle$ or $\langle n_{xy} \rangle$) evaluated in the lattice Boltzmann approximation. So, we evaluate the violation of the Boltzmann approximation by computing the coefficients

$$re_p = \frac{\langle n_p \rangle - N_p}{N_p}, \quad (\text{A.35})$$

$$re_{q_x} = \frac{\langle n_{q_x} \rangle - N_{q_x}}{N_{q_x}}, \quad (\text{A.36})$$

$$re_{q_y} = \frac{\langle n_{q_y} \rangle - N_{q_y}}{N_{q_y}}, \quad (\text{A.37})$$

$$re_{xy} = \frac{\langle n_{xy} \rangle - N_{xy}}{N_{xy}}, \quad (\text{A.38})$$

which are the relative errors (compared to the Lattice Boltzmann Approximation) of n_p (n_{q_x} , n_{q_y} and $j_{*x}j_{*y}$). These coefficients are evaluated at each node (see figure A3). For re_p and re_{q_x} the fluctuations are important. The statistics of re_p are homogeneous inside the system, except near the boundaries where there is a discontinuity of density of the reservoirs. It is globally positive. However, the statistics of re_{q_x} are not homogeneous and we observe important fluctuations near the top and bottom boundaries. These correlations between particles are not significantly modified when we change the size of the lattice. A similar behaviour is observed for re_{q_y} .

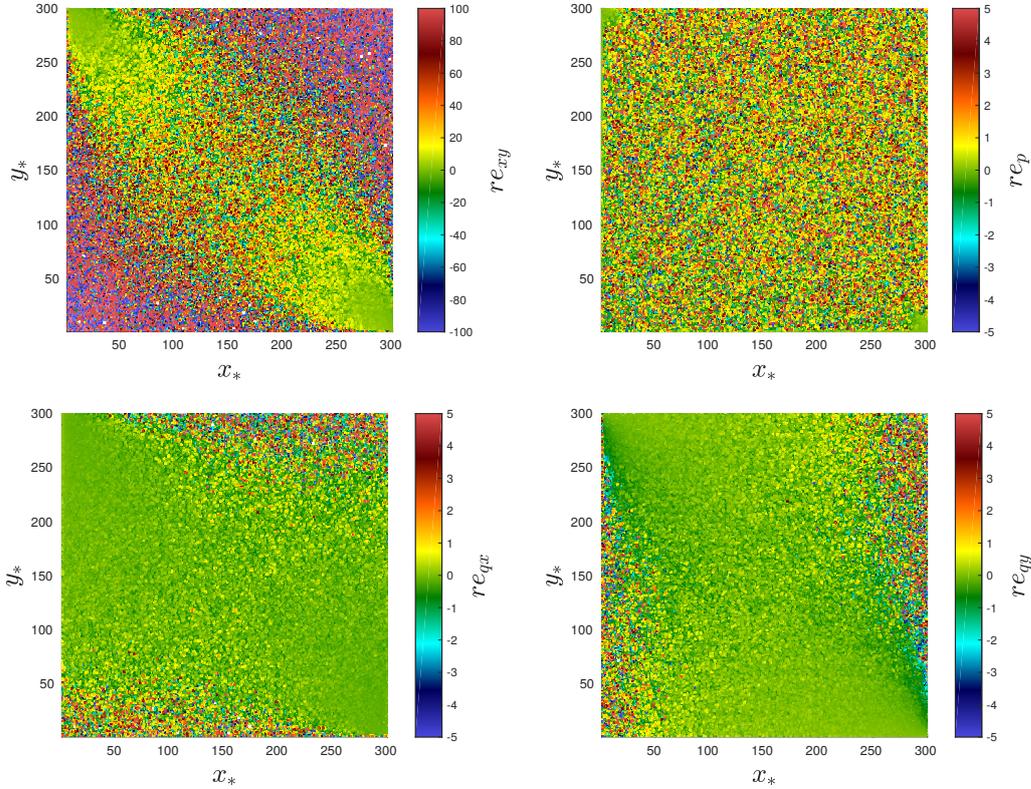


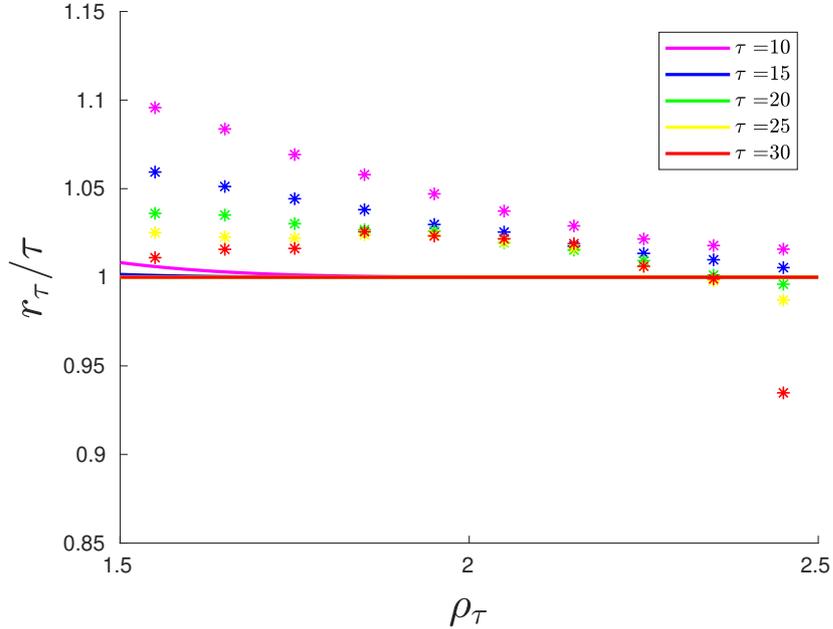
Figure A3. Relative error coefficients defined in (A.35-A.38) that quantify the departure from the Lattice Boltzmann Approximation for our simulation. The fields presented here are smoothed by a Gaussian filter.

References

- [1] Stephen B Pope. Turbulent flows. *Measurement Science and Technology*, 12(11):2020–2021, oct 2001.
- [2] M Lesieur and O Metais. New trends in large-eddy simulations of turbulence. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 28(1):45–82, 1996.
- [3] Pierre-Henri Chavanis. A parametrization of two-dimensional turbulence based on a maximum entropy production principle with a local conservation of energy. *Fluid Dynamics Research*, 46(6):061409, oct 2014.
- [4] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations. *Monthly Weather Review*, 91(3):99–164, 1963.
- [5] U. Frisch, D. d’Humières, B. Hasslacher, P. Lallemand, Y. Pomeau, and J. P. Rivet. Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions. *Complex Syst.*, 1:649–707, 1987.
- [6] P Grosfils, JP Boon, and P Lallemand. Spontaneous fluctuation correlations in thermal lattice-gas automata. *Physical review letters*, 68(7):10771080, February 1992.
- [7] Dieter A Wolf-Gladrow. Lattice-gas cellular automata and lattice boltzmann models - an introduction. *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models*, 1725, 01 2000.
- [8] J.-P. Rivet and J. P. Boon. *Lattice Gas Hydrodynamics*. September 2005.
- [9] Kirone Mallick. The exclusion process: A paradigm for non-equilibrium behaviour. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 418:17 – 48, 2015. Proceedings of the 13th International Summer School on Fundamental Problems in Statistical Physics.

- [10] B. Derrida, E. Domany, and D. Mukamel. An exact solution of a one-dimensional asymmetric exclusion model with open boundaries. *Journal of Statistical Physics*, 69(3):667–687, Nov 1992.
- [11] Alexandre Lazarescu. The physicist’s companion to current fluctuations: one-dimensional bulk-driven lattice gases. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 48(50):503001, nov 2015.
- [12] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim. Macroscopic fluctuation theory for stationary non-equilibrium states. *Journal of Statistical Physics*, 107(3):635–675, May 2002.
- [13] Bernard Derrida. Non-equilibrium steady states: fluctuations and large deviations of the density and of the current. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2007(07):P07023–P07023, jul 2007.
- [14] Bernard Derrida. Microscopic versus macroscopic approaches to non-equilibrium systems. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2011(01):P01030, jan 2011.
- [15] Lorenzo Bertini, Alberto De Sole, Davide Gabrielli, Giovanni Jona-Lasinio, and Claudio Landim. Macroscopic fluctuation theory. *Reviews of Modern Physics*, 87, 04 2014.
- [16] Qisu Zou, Shuling Hou, and Gary D. Doolen. Analytical solutions of the lattice boltzmann bgk model. *Journal of Statistical Physics*, 81(1):319–334, Oct 1995.
- [17] J Hardy, Yves Pomeau, and O de Pazzis. Time evolution of a two-dimensional classical lattice system. *Physical Review Letters - PHYS REV LETT*, 31:276–279, 07 1973.
- [18] J Hardy, O de Pazzis, and Yves Pomeau. Molecular dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation functions. *Phys. Rev. A*, 13, 05 1976.
- [19] C. Beck and E.G.D. Cohen. Superstatistics. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 322:267 – 275, 2003.
- [20] Massimo Germano, Ugo Piomelli, Parviz Moin, and William H. Cabot. A dynamic subgridscale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 3(7):1760–1765, 1991.
- [21] C. Gardiner. *Stochastic Methods: A Handbook for the Natural and Social Sciences*. Springer Series in Synergetics. Springer Berlin Heidelberg, 2009.
- [22] Hugo Touchette. Introduction to dynamical large deviations of markov processes. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 504:5 – 19, 2018. Lecture Notes of the 14th International Summer School on Fundamental Problems in Statistical Physics.
- [23] Jean Pierre Boon, Eric Vanden Eijnden, and David Hanon. A lattice gas automaton approach to ‘turbulent diffusion’. *Chaos, Solitons & Fractals*, 11(1):187 – 192, 2000.
- [24] M R Evans and T Hanney. Nonequilibrium statistical mechanics of the zero-range process and related models. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 38(19):R195R240, Apr 2005.
- [25] C. Beck. Superstatistics: theory and applications. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 16(3):293–304, Mar 2004.
- [26] Christian Beck. Generalized statistical mechanics for superstatistical systems. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 369(1935):453–465, 2011.
- [27] Michel Hénon. Viscosity of a lattice gas. *Complex Systems*, 1, 1987.

FIGURE 6.9 – Temps de relaxation de notre modèle (6.40) divisé par τ comparé aux résultats numériques (indiqués par des étoiles) pour différentes valeurs de τ .



6.5 Conclusions et perspectives

Dans ce chapitre, nous avons étudié le problème de modélisation sous-maille sur un système simple : un gaz sur réseau diffusif. Les gaz sur réseaux ont été largement étudiés en tant que modèles discrets de théorie cinétique des gaz [Rivet and Boon, 2005] ou comme modèle conceptuels de physique hors-équilibre [Mallick, 2015]. À notre connaissance, les seules tentatives d'utilisation de ces modèles pour étudier le problème de modélisation sous-maille sont [Boon et al., 2000, Dolapchiev et al., 2013, Achatz et al., 2013]. La dérivation de modèles sous-maille pour ces systèmes simples et facilement simulables nous semble être un problème conceptuellement intéressant dont la résolution pourrait servir la résolution du même problème sur des systèmes d'intérêts comme les écoulements turbulents. Nous avons construit un modèle représentant qualitativement l'évolution du champ de densité coarse-grainée en essayant de nous baser sur l'analyse des champs issus d'une simulation numérique directe. La démarche se résume en quatre étapes

1. On fait la liste de toutes les variables dont peut dépendre la dérivée temporelle du flux coarse-grainé 6.13. Ces variables sont de trois types : les variables dynamiques (ici la densité, le flux et leurs gradients), les paramètres dynamiques (ici les probabilités de collisions), et les paramètres de coarse-graining. Étant donné que la forme de la maille est fixée ici, le seul paramètre de coarse-graining est le facteur de coarse-graining τ .
2. Le problème contient, même pour notre système simple, trop de variables pour pouvoir conduire une analyse statistique comme le calcul des corrélations partielles (ce qui serait utile pour déterminer les variables les plus pertinentes). On essaye alors de sélectionner les variables les plus pertinentes que l'on note X (ici le flux, la densité et son gradient).

Cela revient à faire des premières hypothèses sur la rhéologie du modèle sous-maille.

3. On introduit les distributions de probabilités conditionnelles de la dérivée temporelle du flux coarse-grainé (plus précisément de son approximation au premier ordre) $v_{\tau\alpha}$ sachant X notée $p_{\tau\alpha}(\hat{v}|\hat{X})$, puis les variables centrées réduites

$$\delta_{\tau\alpha}(X) = \frac{v_{\tau\alpha} - \langle v_{\tau\alpha} \rangle_X}{\sqrt{\langle (v_{\tau\alpha} - \langle v_{\tau\alpha} \rangle_X)^2 \rangle_X}}. \quad (6.41)$$

On analyse les statistiques de ces variables pour différentes tailles de maille, selon les différentes directions, et différentes valeurs de X , à partir des simulations directes afin d'observer si elles ont un comportement universel. Si c'est le cas, on peut modéliser uniquement les deux premiers moments de $v_{\tau\alpha}$ en fonction de X .

4. On modélise les premiers moments en choisissant un modèle rhéologique (ici l'équation de relaxation stochastique (6.19)). Il est utile de regarder la dépendance des différents termes introduits (ici le flux de relaxation, le temps de relaxation et les fluctuations) par rapport à X avant de les modéliser afin d'identifier des simplifications (ici, on a vu que le temps de relaxation et la fluctuation-typique ne dépendaient pas du gradient de densité, et que l'on pouvait donc utiliser un modèle d'équilibre pour les déterminer).

Notre modèle pour l'évolution de la densité coarse-grainée (par un facteur τ par rapport à la dynamique microscopique) s'écrit

$$\partial_t \rho_\tau + \nabla \mathbf{j}_\tau = 0, \quad (6.42)$$

$$\epsilon \partial_t \mathbf{j}_{\tau\alpha} = -\frac{j_{\tau\alpha} - \mu_{\tau\alpha}(\rho_\tau, \partial_\alpha \rho_\tau, q)}{r_\tau(\rho_\tau, q)} + \sigma_\tau(\rho_\tau, q) \eta_\alpha, \quad (6.43)$$

où η_α est un bruit blanc Gaussien et $\mu_{\tau\alpha}$, r_τ and σ_τ sont donnés par les équations (6.20), (6.40) et (6.35).

Notre modèle est en bon accord qualitatif avec les résultats numériques. Cependant, plusieurs questions peuvent être soulevées. Du point de vue de l'analyse, le code permet de faire varier les probabilités de collision p et q , or on a étudié leur influence que d'un point de vue théorique (nous avons analysé une seule simulation pour laquelle $p = q = 1$). Il pourrait être intéressant de vérifier la robustesse du modèle sous-maille pour différentes conditions aux limites : on pourrait par exemple changer la géométrie, varier les densités des réservoirs en fonction de la position et du temps, faire varier les probabilités de collisions, ajouter un champ de force (une asymétrie dans les collisions), ... On pourrait aussi considérer des gaz sur réseaux plus complexes. Du point de vue théorique, notre modèle sous-maille devrait être amélioré. On pourrait par exemple utiliser la Macroscopic Fluctuations Theory [Bertini et al., 2014] ou les Superstatistiques [Beck and Cohen, 2003] pour construire un modèle de relaxation où l'on ne néglige pas les inhomogénéités spatiales dans la maille à chaque pas de temps microscopique et l'additivité du bruit.

Nous pouvons tirer deux conclusions concernant la modélisation sous-maille pour des systèmes pour lesquels on ne peut pas invoquer une séparation d'échelle. La première conclusion est que l'inertie du flux coarse-grainé (ou quantité équivalente) doit être considérée : le flux coarse-grainé est une variable dynamique. Cette idée correspond à un modèle de turbulence du second ordre (voir par exemple [Rotta, 1951], [Hanjalić and Launder, 1972] ou [Pope, 2001]). La seconde conclusion est que l'indétermination de l'état microscopique des mailles empêche la description

de l'évolution de façon déterministe, et qu'il faut donc opter pour une modélisation stochastique.

Les modèles du second ordre sont déjà utilisés pour modéliser les écoulements géophysiques dans les GCM [Mellor and Yamada, 1982]. Pour l'instant, les modèles du second ordre stochastiques sont plutôt limités aux modèles météorologiques [Kober and Craig, 2016] mais, comme souligné par [Palmer, 2019], leur intérêt s'étend certainement à l'étude du climat. Dans ce contexte, on note que la relaxation stochastique du flux coarse-grainé utilisée ici l'avantage de conserver la quantité transportée (la température, l'humidité, ...), ce qui n'est pas le cas de toutes les paramétrisations utilisées actuellement. Les modèles stochastiques du second ordre ne sont pas utilisés dans les EBM à notre connaissance. Construire un modèle de ce type en utilisant une équation de relaxation stochastique pour le flux d'énergie pourrait être une idée d'amélioration simple de ces modèles. En fait, l'équation de relaxation utilisée dans ce chapitre rappelle fortement l'hypothèse de quasi-équilibre introduite par [Betts, 1986, Betts and Miller, 1986], à la différence qu'on fait une relaxation sur le flux, et non sur la quantité transportée. D'un point de vue pratique, un modèle du second ordre ajoute une équation au dérivée partielle au problème, ce qui rend la résolution numérique plus lourde. Cela justifie l'utilisation d'approches simplificatrices comme l'hypothèse MEP présentée en première partie.

Le dernier point, mais pas le moindre, est que l'on ne dispose pas de simulation numérique (ou données expérimentales) suffisamment résolue pour permettre l'analyse des écoulements d'intérêt pour la modélisation du climat. Au prochain chapitre, on s'intéresse donc à l'étude d'un écoulement expérimental de mécanique des fluides.

Chapitre 7

Vers une extension aux écoulements turbulents

7.1 L'écoulement de Von-Karman

Descriptif de l'expérience

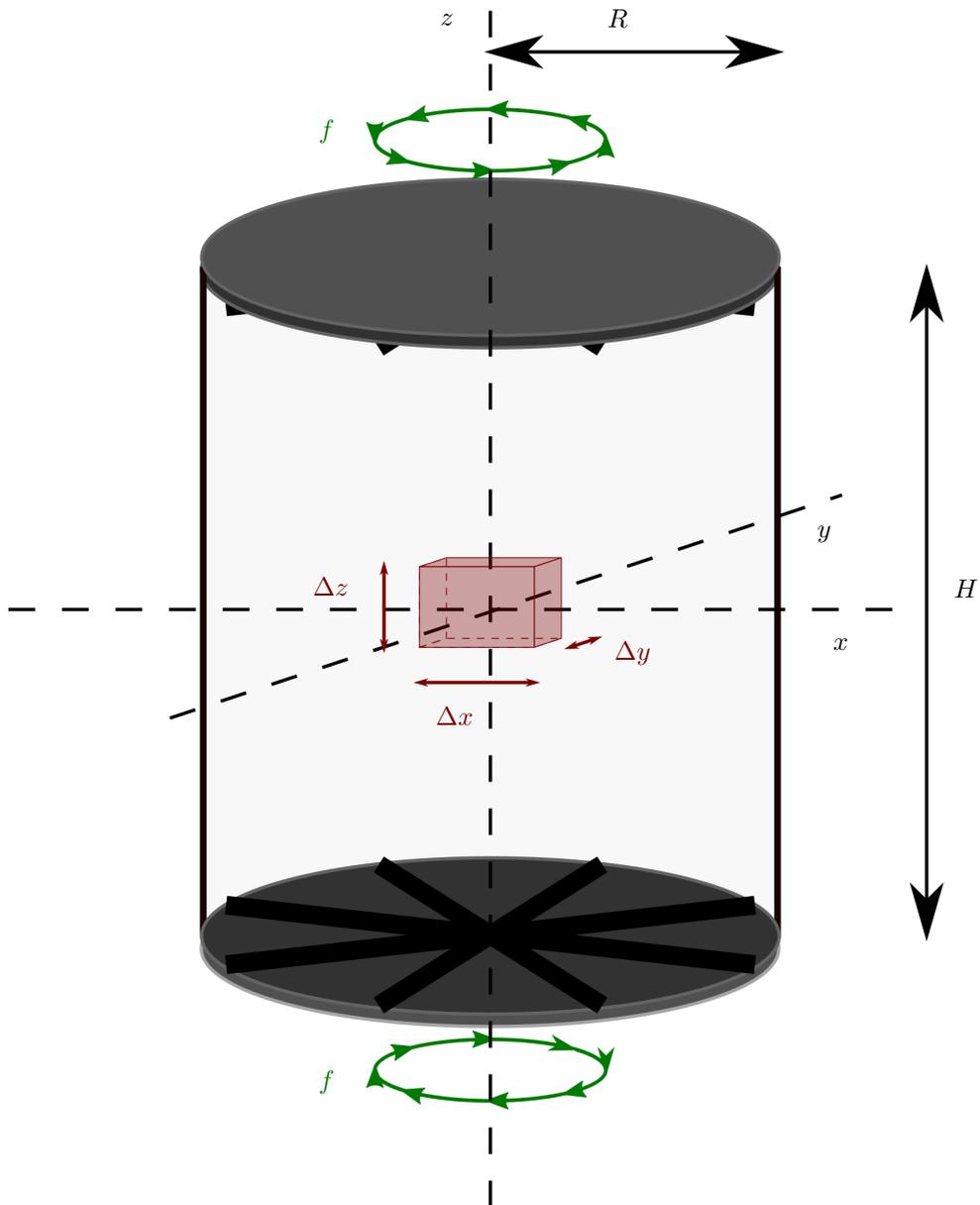
Dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'écoulement de Von-Karman du SPEC. Il s'agit de l'écoulement d'un fluide contenu dans une cuve cylindrique, généré par la mise en rotation de deux turbines munies de 8 pales disposées aux surfaces supérieure et inférieure de la cuve et coaxiales à l'axe du cylindre. L'écoulement est caractérisé par la distance entre les pales H , le rayon du cylindre R , les fréquences de rotations des pales f_1 et f_2 et la forme des turbines (figure 7.1). On analysera les résultats de l'expérience construite par [Debue, 2019], pour laquelle les turbines sont identiques et tournent dans des sens opposés à la même fréquence de rotation $f_1 = f_2 = f$. Si l'on ne tient pas compte de la forme des pales, l'écoulement est invariant par rotation autour de l'axe de la cuve qui correspond à l'axe vertical. L'écoulement est aussi invariant par rotation d'un angle π autour de n'importe quel axe horizontal qui passe par le centre du cylindre. Le fluide utilisé dans l'expérience est un mélange d'eau liquide et de glycérol (Voir chapitre 3 de [Debue, 2019] pour un descriptif détaillé de l'expérience).

L'écoulement de Von-Karman est un écoulement expérimental utilisé pour étudier la turbulence, au même titre que les écoulements de Poiseuille, de Couette, ou de Rayleigh-Bénard. Il s'agit d'un système hors équilibre où l'on impose un gradient de moment cinétique entre le haut et le bas de la cuve. L'écoulement agit alors de façon à redistribuer le moment cinétique au sein du fluide. Bien que l'écoulement soit plus simple (référentiel terrestre supposé Galiléen, pas d'effets thermiques ou de compressibilité, ...), il agit de façon assez semblable aux écoulements atmosphérique et océanique qui redistribuent l'énergie sous l'effet du gradient d'énergie imposé par le forçage radiatif. L'écoulement de Von-Karman représente donc un bon système modèle pour comprendre certains processus des écoulements géophysiques.

Équations d'évolution et paramètre de contrôle

Pour les fréquences de rotation f utilisées, les vitesses dans l'écoulement restent faibles devant la vitesse du son dans le liquide (i.e. le nombre de Mach est faible). L'évolution du champ de vitesse

FIGURE 7.1 – Vue schématique de l'expérience de Von-Karman. La forme des pales ne représente pas celle utilisée dans l'expérience qui sont courbées. Le parallélépipède rouge au centre du cylindre représente le volume sur lequel le champ de vitesse a été mesuré par TPIV.



est donc gouvernée par les équations de Navier-Stokes pour un fluide Newtonien incompressible

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (7.1)$$

$$\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \mathbf{g} + \nu \Delta \mathbf{v}, \quad (7.2)$$

où \mathbf{v} est le champ de vitesse, ρ est la masse volumique du fluide, p est le champ de pression, \mathbf{g} est l'accélération de pesanteur et ν est la viscosité cinématique du fluide. Nous utiliserons les variables adimensionnées

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r}/R, \quad (7.3)$$

$$t' = 2\pi f t, \quad (7.4)$$

$$\mathbf{v}' = \frac{1}{2\pi R f} \mathbf{v}, \quad (7.5)$$

$$p' = \frac{p - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}}{\rho (2\pi R f)^2}, \quad (7.6)$$

on peut réécrire l'équation (7.2) sous la forme

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (7.7)$$

$$\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \Delta \mathbf{v}, \quad (7.8)$$

où on a introduit le nombre de Reynolds

$$Re = \frac{2\pi R^2 f}{\nu}. \quad (7.9)$$

Dans les équations précédentes et dans la suite, nous omettrons l'indice '. Le nombre de Reynolds quantifie l'importance du terme d'inertie $\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}$ par rapport au terme visqueux $\nu \Delta \mathbf{v}$. Lorsque $Re \ll 1$, l'écoulement est dominé par la viscosité : on parle d'écoulement laminaire. À l'inverse, lorsque $Re \gg 1$, la convection est très importante et on observe la présence de mouvements à de nombreuses échelles : on parle d'écoulement turbulent. Depuis la théorie de Kolmogorov [Kolmogorov, 1941], il est souvent admis que les plus petites échelles d'espace et de temps de l'écoulement sont données par les échelles de Kolmogorov l_K et t_K . Pour l'écoulement de Von-Karman présenté ici, ces échelles sont données par les relations

$$\frac{l_K}{R} = Re^{-3/4} \quad \text{et} \quad 2\pi f t_K = Re^{-1/2}. \quad (7.10)$$

D'un point de vue pratique, cela signifie que si l'on veut effectuer une simulation numérique directe d'un écoulement turbulent, il faut discrétiser chaque dimension spatiale en un nombre $\propto Re^{3/4}$ et avoir un nombre de pas de temps $\propto Re^{1/2}$. De même, pour obtenir des mesures expérimentales résolues, il faut avoir des appareils de mesures qui sont capables de mesurer en dessous des échelles d'espace et de temps de Kolmogorov.

Paramètres de l'expérience et mesure des champs de vitesse

Le champ de vitesse a été mesuré sur un parallélépipède centré au milieu de la cuve, de taille $\Delta x \times \Delta y \times \Delta z$, appelé volume de mesure. Ce volume est divisé en $n_x \times n_y \times n_z$ volumes "microscopiques" répartis de façon homogène sur lesquelles on mesure la vitesse. Les résolutions spatiales

TABLE 7.1 – Récapitulatif des paramètres de l'expérience.

Quantité	Notation	Valeur	Unité
Rayon de la cuve	R	0,10	m
Hauteur de la cuve	H	0,18	m
Fréquence de rotation	f	0,10	Hz
Viscosité cinématique	ν	$1,0 \cdot 10^{-6}$	$m^2 \cdot s^{-1}$
Nombre de Reynolds	$Re = 2\pi R^2 f / \nu$	$6,3 \cdot 10^3$	$S.U$
Taille du volume de mesure	Δx	0,4	$S.U$
	Δy	0,4	$S.U$
	Δz	0,07	$S.U$
Temps de mesure	$\Delta t = 3226 dt$	20	$S.U$
Fréquence d'acquisition	f_{acq}	200	Hz
Discretisation	n_x	190	$S.U$
	n_y	190	$S.U$
	n_z	33	$S.U$
Résolution spatiale	$dx = \Delta x / n_x$	$2,1 \cdot 10^{-3}$	$S.U$
	$dy = \Delta y / n_y$	$2,1 \cdot 10^{-3}$	$S.U$
	$dz = \Delta z / n_z$	$2,1 \cdot 10^{-3}$	$S.U$
Résolution temporelle	$dt = 2\pi f / f_{acq}$	$3,1 \cdot 10^{-3}$	$S.U$
Echelles de Kolmogorov	$l_K / R = Re^{-3/4}$	$1,4 \cdot 10^{-3}$	$S.U$
	$2\pi f t_K = Re^{-1/2}$	$1,3 \cdot 10^{-2}$	$S.U$

(i.e. les dimensions des volumes microscopiques) sont donc les mêmes selon toutes les directions. Elles sont notées dx , dy et dz . On repère les positions des volumes microscopiques par la variable discrète \mathbf{r}_* . La fréquence d'acquisition des images utilisée pour mesurer les champs de vitesse est notée f_{acq} . La résolution temporelle correspondante est $dt = 2\pi f / f_{acq}$. On repère les pas de temps discrets par la variable t_* . Chaque ensemble de mesures est composé de 3226 champs de vitesses, ce qui représente un temps de mesure $\Delta t = 3226 dt$. On dispose de 40 ensembles de mesures indépendantes. Cela correspond donc à $3226 \times 40 = 129040$ champs microscopiques de taille $190 \times 190 \times 33$ que l'on peut utiliser pour les analyses. Les valeurs des paramètres importants de l'expérience sont données dans le tableau 7.1. Pour l'expérience étudiée, la résolution spatiale est de l'ordre de $3/2$ échelle de Kolmogorov et la résolution temporelle est de l'ordre de $1/4$ échelle de Kolmogorov. Par conséquent, les mesures expérimentales permettent d'avoir accès au champ "microscopique" à priori. En pratique, il faut quand même vérifier que les champs mesurés sont suffisamment lisses.

Le dispositif de mesure des champs de vitesse est décrit au chapitre 4 de [Debue, 2019]. Nous donnons ici un bref aperçu de la méthode utilisée, appelée TPIV (pour Tomographic Particle Image Velocimetry en anglais) [Scarano, 2012]. Un montage de TPIV est composé des éléments suivants :

- Des particules sont mélangées au fluide. On considère qu'elles suivent parfaitement l'écoulement sans le perturber ;
- Un montage laser est utilisé pour éclairer le volume de mesure. Ce montage doit permettre d'obtenir un bon contraste sur les images prises par les caméras afin de distinguer les particules dans le fluide ;
- Plusieurs caméras prennent des photos du volume de mesure simultanément sous plusieurs angles à une fréquence donnée f_{acq} . La fréquence doit être choisie de façon à pouvoir suivre les mouvements des particules ;
- Une méthode de reconstruction tomographique, c'est-à-dire une technique de reconstruction d'un objet 3D à partir d'un ensemble de projections 2D (i.e. des photos) sous plusieurs angles. La tomographie est un problème mal posé : il y a plus d'inconnues que d'équations en général. Cela impose de choisir un modèle pour fixer les degrés de liberté restants. La reconstruction tomographique s'accompagne donc d'erreurs ;
- Une méthode de traitement d'image qui sert à améliorer le repérage des particules sur les photos, et ainsi faciliter la construction du champ de vitesse.

La mesure du champ de vitesse se fait en 3 ou 4 étapes :

1. L'acquisition des images ;
2. Le traitement des images. Cette étape est optionnelle ;
3. Pour chaque pas de temps, on reconstruit le champ 3D d'intensité lumineuse à partir des images en appliquant la méthode de reconstruction tomographique. Les pics lumineux correspondent aux positions des particules prédites par le modèle tomographique ;
4. Pour un pas de temps, le champ d'intensité lumineuse est décomposé en volumes d'interrogations qui contiennent généralement plusieurs pics. En trouvant la position du maximum de corrélation du champ lumineux sur un volume d'interrogation sur le champ de luminosité au prochain pas de temps, on obtient le déplacement des particules dans le volume d'interrogation pendant un pas de temps. On en déduit la vitesse du fluide.

En pratique, il est difficile d'avoir une bonne estimation de l'incertitude commise sur la mesure du champ de vitesse, car elle dépend des nombreux éléments du montage expérimental (particules utilisées et leur concentration, propriétés et montage des lasers, résolution et montage des caméras, qualité de la reconstruction par tomographie, ...). On note que cette incertitude peut fausser les résultats des analyses : les statistiques des quantités mesurées avec les champs de vitesse pourront être impactées par l'ajout des fluctuations de nature expérimentale. Étant donné que ce problème ne fait pas l'objet de cette thèse, et que les travaux présentés dans ce chapitre sont en développement, nous ne considérons pas ce problème.

7.2 Équation de la vorticit 

Si on applique l'opérateur de divergence à l'équation (7.8) en utilisant la condition d'incompressibilité (7.7), on montre que le champ de pression est solution de l'équation de Poisson

$$\Delta p = -(\partial_\alpha v_\beta)(\partial_\beta v_\alpha) \quad (7.11)$$

à chaque instant. Cette condition rend la réponse du champ de vitesse non-locale. Il est nécessaire de connaître le champ de pression pour déterminer l'évolution du champ de vitesse, or il n'est pas mesuré en pratique et on ne peut pas l'obtenir si on ne peut pas résoudre l'équation de Poisson (qui requiert de connaître le champ de vitesse sur tout le domaine). Par conséquent, nous nous intéresserons dans un premier temps à la dynamique de la vorticit 

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{v}. \quad (7.12)$$

Physiquement, la vorticit  repr sente le double de la vitesse angulaire de la particule fluide. L' quation de la vorticit  exprime donc le bilan de moment cin tique. En appliquant l'op rateur rotationnel   l' quation (7.8) et la propri t  $\nabla \times \nabla p = \mathbf{0}$, on obtient

$$\partial_t \boldsymbol{\omega} + \nabla \times (\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}) = \frac{1}{Re} \Delta \boldsymbol{\omega}. \quad (7.13)$$

En utilisant la relation $\nabla \times (\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}) = \mathbf{v} \cdot \nabla (\nabla \times \mathbf{v}) - (\nabla \times \mathbf{v}) \cdot \nabla \mathbf{v}$ et la d finition de la vorticit , l' quation pr c dente se r crit

$$\partial_t \boldsymbol{\omega} + \mathbf{v} \cdot \nabla \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla \mathbf{v} = \frac{1}{Re} \Delta \boldsymbol{\omega}. \quad (7.14)$$

Il est possible de simplifier cette  quation   l'aide des relations $\nabla \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}) = \mathbf{v} \cdot \nabla \boldsymbol{\omega} - \mathbf{v} \nabla \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla \mathbf{v} + \boldsymbol{\omega} \nabla \cdot \mathbf{v}$, $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ et $\nabla \cdot \boldsymbol{\omega} = 0$. On obtient alors

$$\partial_t \boldsymbol{\omega} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \boldsymbol{\omega}) + \frac{1}{Re} \Delta \boldsymbol{\omega}. \quad (7.15)$$

Enfin, en utilisant la relation $\nabla \times (\nabla \times \boldsymbol{\omega}) = \nabla (\nabla \cdot \boldsymbol{\omega}) - \Delta \boldsymbol{\omega} = -\Delta \boldsymbol{\omega}$, on peut  crire l' quation d' volution de vorticit  de la fa on suivante :

$$\partial_t \boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{F}, \quad (7.16)$$

$$\mathbf{F} = \mathbf{v} \times \boldsymbol{\omega} - \frac{1}{Re} \nabla \times \boldsymbol{\omega}. \quad (7.17)$$

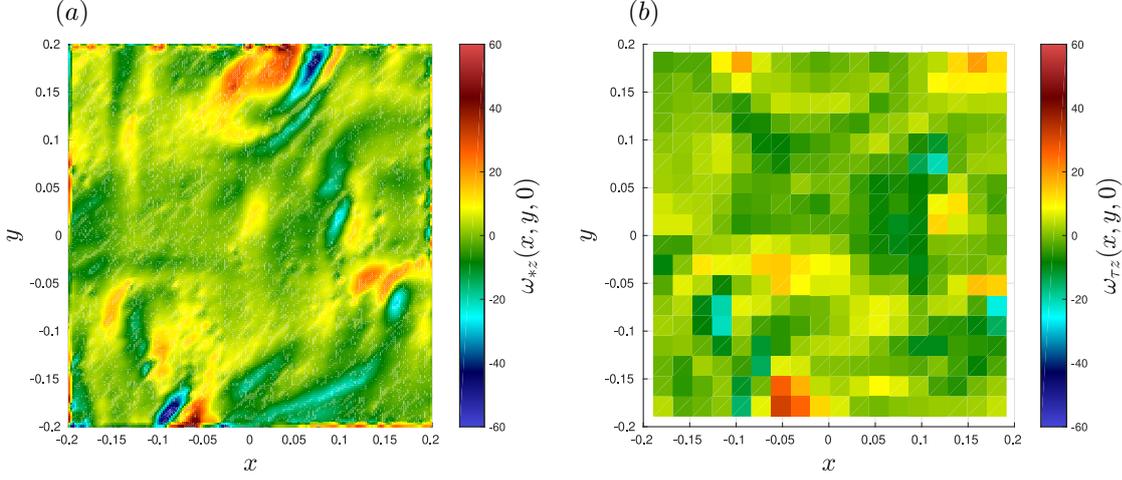
Comme on dispose des mesures du champ de vitesse, on peut en d duire la vorticit , son rotationnel et le vecteur \mathbf{F} . Le vecteur \mathbf{F} sera appel  ici acc l ration potentielle : c'est la diff rence du vecteur de Lenz $\mathbf{v} \times \boldsymbol{\omega}$ et du terme diffusif $\frac{1}{Re} \nabla \times \boldsymbol{\omega}$. Nous pouvons donc  tudier le probl me de mod lisation sous-maille sur la dynamique de la vorticit . En th orie, les champs $\boldsymbol{\omega}$ et \mathbf{F} repr sentent les variables microscopiques dont l' volution est donn e par les  quations d' volution microscopiques (7.16-7.17). En pratique, on peut seulement observer les quantit s $\boldsymbol{\omega}_*(\mathbf{r}_*, t_*)$, $\mathbf{F}_*(\mathbf{r}_*, t_*)$ qui sont les valeurs des champs sur chaque volume microscopique du volume de mesure. On peut d finir les observables coarse-grain es sur une maille hypercubique de $\tau \times \tau \times \tau$ volumes microscopiques et τ pas de temps $\mathcal{M}_\tau(\mathbf{r}, t)$ centr e autour de (\mathbf{r}, t) . On d finit

$$\boldsymbol{\omega}_\tau(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\tau^4} \sum_{(\mathbf{r}_*, t_*) \in \mathcal{M}_\tau(\mathbf{r}, t)} \boldsymbol{\omega}_*(\mathbf{r}_*, t_*), \quad (7.18)$$

$$\mathbf{F}_\tau(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\tau^4} \sum_{(\mathbf{r}_*, t_*) \in \mathcal{M}_\tau(\mathbf{r}, t)} \mathbf{F}_*(\mathbf{r}_*, t_*), \quad (7.19)$$

qui sont la vorticit  coarse-grain e et l'acc l ration potentielle coarse-grain e   la position \mathbf{r} au temps t , et τ est le facteur de coarse-graining. Le probl me consiste donc   analyser puis

FIGURE 7.2 – Coupes horizontales ($z = 0$) de champs instantanés de vorticité verticale microscopique (a) et coarse-grainée avec $\tau = 10$ (b) mesurés dans l'expérience. Le problème de modélisation sous-maille consiste à trouver un modèle pour simuler directement l'évolution du champ coarse-grainé.



à modéliser la dynamique de ces variables. Ici, nous sommes limités à choisir des valeurs de τ modérées à cause de la faible résolution en verticale ($n_z = 33$). Des coupes horizontales des champs de vorticité verticale microscopique et de vorticité verticale coarse-grainée sont présentées en figure 7.2.

7.3 Analyse

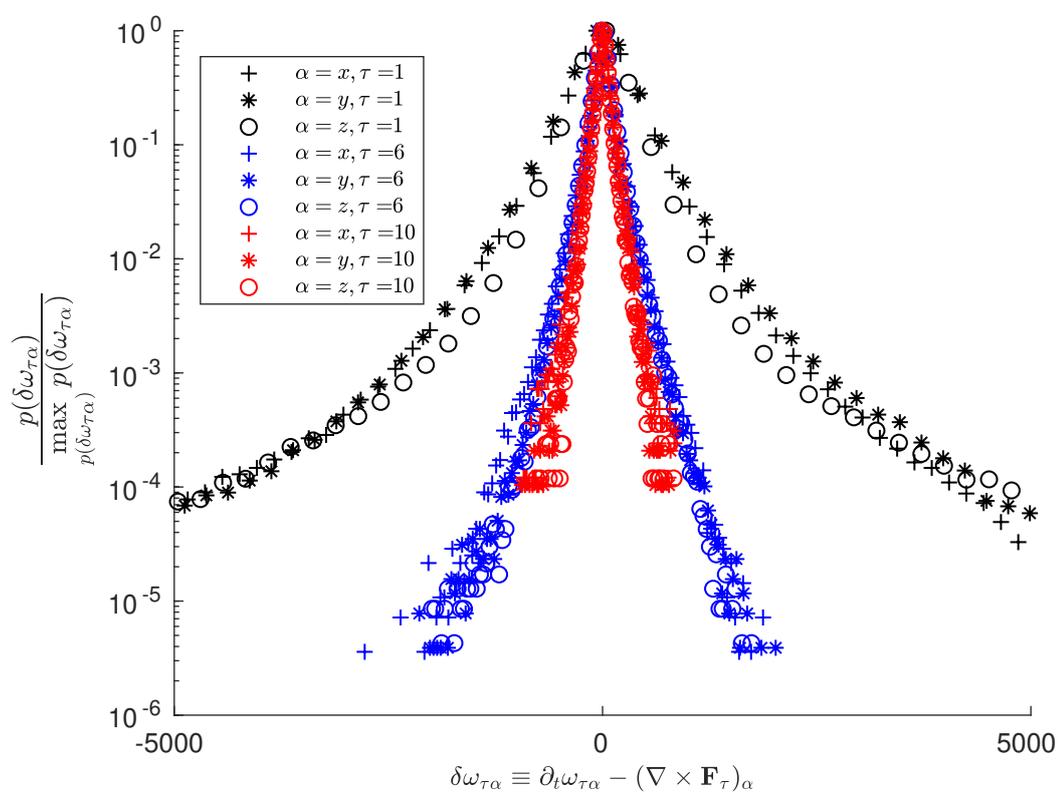
L'évolution de la vorticité coarse-grainée obéit à l'équation

$$\partial_t \omega_\tau = \nabla \times \mathbf{F}_\tau. \quad (7.20)$$

On peut s'assurer que la dynamique de la vorticité obéit à cette équation en calculant numériquement les distributions de probabilité empiriques des variables $\delta\omega_{\tau\alpha} \equiv \partial_t \omega_{\tau\alpha} - (\nabla \times \mathbf{F}_\tau)_\alpha$. Ces distributions sont représentées sur la figure 7.3. On observe que l'équation de vorticité est vérifiée en moyenne (i.e. $\langle \delta\omega_{\tau\alpha} \rangle = 0$) seulement. En effet, à cause des erreurs de mesure, des erreurs d'arrondis numérique dans l'estimation de $\delta\omega_{\tau\alpha}$, et des phénomènes dynamiques non pris en compte, l'équation de la vorticité coarse-grainée n'est pas rigoureusement vérifiée. On observe que les fluctuations deviennent de plus en plus faibles (i.e. l'équation de la vorticité coarse-grainée est de plus en plus respectée) lorsqu'on augmente le facteur de coarse-graining.

Contrairement au gaz sur réseau étudié au chapitre précédent, la dynamique d'un fluide incompressible est non locale, à cause de la réponse du champ de pression (7.11). Cependant, la majorité des fermetures turbulentes (qui correspondent aux modèles sous-maille pour un écoulement) font l'hypothèse d'une réponse locale. Par exemple, l'hypothèse de viscosité turbulente relie le tenseur de Reynolds au gradient de vitesse. Nous ferons ici la même hypothèse. On peut alors appliquer la même approche que celle employée sur le gaz sur réseau. Comme il n'y a pas de séparation d'échelle, on doit modéliser la variation temporelle de l'accélération potentielle

FIGURE 7.3 – Distributions de probabilités empiriques des variables $\delta\omega_{\tau\alpha} \equiv \partial_t\omega_{\tau\alpha} - (\nabla \times \mathbf{F}_\tau)_\alpha$ mesurées pour l'expérience (divisées par leurs valeurs maximales).



coarse-grainée plutôt que l'accélération potentielle elle-même. L'absence de représentation des plus petites échelles de la dynamique chaotique entraîne l'imprédictibilité (au sens déterministe) du champ coarse-grainé qu'il faut modéliser avec un modèle stochastique. On cherche donc une relation de la forme

$$\partial_t \mathbf{F}_\tau = \mathcal{F}(\boldsymbol{\omega}_\tau, \nabla \boldsymbol{\omega}_\tau, \mathbf{F}_\tau, \nabla \mathbf{F}_\tau, Re, \tau, \boldsymbol{\eta}) \quad (7.21)$$

où $\boldsymbol{\eta}$ est une variable aléatoire qui représente la variabilité des échelles sous-maille et dont la nature est encore indéterminée (Nous rappelons que cette équation n'a pas de sens mathématique.). La fermeture fait apparaître trois types de variables : les variables dynamiques (vorticité, accélération potentielle et leurs gradients), les paramètres dynamiques (le nombre de Reynolds) et les paramètres liés au coarse-graining (le facteur de coarse-graining). La relation de fermeture \mathcal{F} fait intervenir $3+9+3+9+1+1 = 26$ variables. Il faut donc commencer à faire des hypothèses sur la rhéologie du modèle sous-maille.

Hypothèse : La variation temporelle de l'accélération potentielle selon la direction α , $\partial_t F_{\tau\alpha}$, ne dépend que de $F_{\tau\alpha}, \omega_{\tau\alpha}, (\nabla \times \boldsymbol{\omega}_\tau)_\alpha, \tau, Re$ et les trois composantes de $\partial_t \mathbf{F}_\tau$ sont décorrélées.

D'un point de vue pratique, on estime les dérivées partielles par des différences finies. On introduit donc les quantités

$$\partial_t F_{\tau\alpha}(\mathbf{r}, t) \simeq \frac{F_{\tau\alpha}(\mathbf{r}, t + \tau dt) - F_{\tau\alpha}(\mathbf{r}, t)}{\tau dt} \equiv v_{\tau\alpha}, \quad (7.22)$$

et $c_{\tau\alpha}$ qui est l'approximation en différence finie de $(\nabla \times \boldsymbol{\omega}_\tau)_\alpha$. Au cours de l'expérience, l'écoulement va explorer un grand nombre d'états, générant un grand nombre d'états des mailles et de leurs voisinages (i.e. des valeurs du quadruplet $(v_{\tau\alpha}, F_{\tau\alpha}, \omega_{\tau\alpha}, c_{\tau\alpha})$).

On s'intéresse à la probabilité d'observer une variation temporelle de l'accélération potentielle $v_{\tau\alpha}$, sachant que l'on observe $(F_{\tau\alpha}, \omega_{\tau\alpha}, c_{\tau\alpha})$. On définit la densité de probabilité conditionnelle $p_{\tau\alpha}(\hat{v}|\hat{F}, \hat{\omega}, \hat{c})$ telle que la probabilité d'observer $v_{\tau\alpha} \in [\hat{v} - \frac{d\hat{v}}{2}, \hat{v} + \frac{d\hat{v}}{2}]$ sachant que $F_{\tau\alpha} \in [\hat{F} - \frac{d\hat{F}}{2}, \hat{F} + \frac{d\hat{F}}{2}]$, $\omega_{\tau\alpha} \in [\hat{\omega} - \frac{d\hat{\omega}}{2}, \hat{\omega} + \frac{d\hat{\omega}}{2}]$ et $c_{\tau\alpha} \in [\hat{c} - \frac{d\hat{c}}{2}, \hat{c} + \frac{d\hat{c}}{2}]$ est $p_{\tau\alpha}(\hat{v}|\hat{F}, \hat{\omega}, \hat{c}) d\hat{v} d\hat{F} d\hat{\omega} d\hat{c}$. Ces densités de probabilités peuvent être mesurées pour différentes valeurs de τ , et $\alpha = x, y, z$, en faisant les statistiques sur toutes les mailles de l'expérience. On commence par s'intéresser aux variables aléatoires normalisées

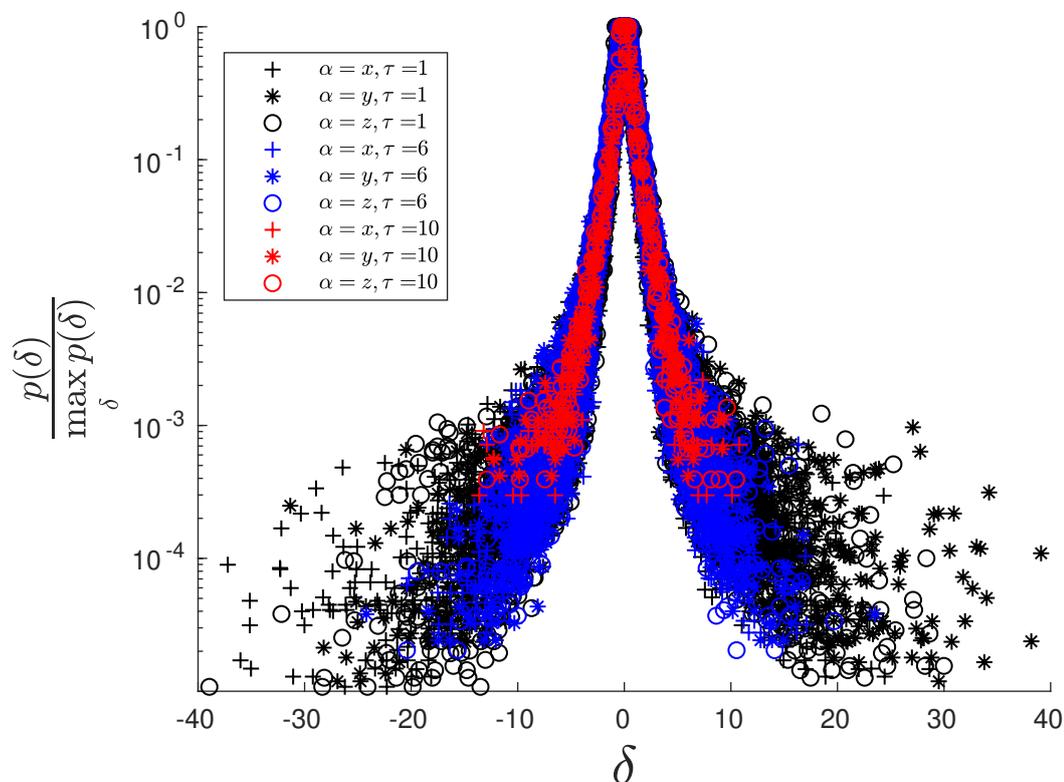
$$\delta_{\tau\alpha}(\hat{F}, \hat{\omega}, \hat{c}) = \frac{v_{\tau\alpha} - \langle v_{\tau\alpha} \rangle_{\hat{F}, \hat{\omega}, \hat{c}}}{\sqrt{\langle (v_{\tau\alpha} - \langle v_{\tau\alpha} \rangle_{\hat{F}, \hat{\omega}, \hat{c}})^2 \rangle_{\hat{F}, \hat{\omega}, \hat{c}}}} \quad \alpha = x, y, z, \quad (7.23)$$

où

$$\langle v_{\tau\alpha}^n \rangle_{\hat{F}, \hat{\omega}, \hat{c}} = \int \hat{v}^n p_{\tau\alpha}(\hat{v}|\hat{F}, \hat{\omega}, \hat{c}) d\hat{v} \quad (7.24)$$

Les densités de probabilités empiriques des variables aléatoires $\delta_{\tau\alpha}(\hat{F}, \hat{\omega}, \hat{c})$ sont montrées sur la figure 7.4 pour $\tau = 1, 6, 10$ et $\alpha = x, y, z$. Les statistiques sont faites pour \hat{F} divisé en 9 créneaux entre -10 et 10 , $\hat{\omega}$ divisé en 9 créneaux entre -20 et 20 , et \hat{c} divisé en 9 créneaux entre -1000 et 1000 . Nous ne gardons que les échantillons de taille supérieure à 2000 pour limiter le bruit. On observe que les distributions de $\delta_{\tau\alpha}(\hat{F}, \hat{\omega}, \hat{c})$ ne dépendent pas significativement du facteur de coarse-graining τ et de la direction $\alpha = x, y, z$, au moins pour les fluctuations typiques. Les distributions ne dépendent pas significativement de la vorticité coarse-grainée et de son rotationnel, ni de l'accélération potentielle. Les fluctuations sont non-Gaussiennes, et sont identiques aux fluctuations microscopiques (i.e. pour $\tau = 1$). Cependant, compte tenu des erreurs expérimentales qui ne sont pas estimées ici, et des limitations sur les valeurs du facteur

FIGURE 7.4 – Distributions de probabilités empiriques des variables $\delta_{\tau\alpha}(\hat{F}, \hat{\omega}, \hat{c})$ mesurées pour l'expérience (divisées par leurs valeurs maximales).



de coarse-graining (τ ne dépasse pas 10), il n'est pas certain que les fluctuations ne soient pas dûes aux erreurs expérimentales.

7.4 Modélisation sous-maille

Hypothèse : On suppose que l'évolution de l'accélération potentielle coarse-grainée peut être représentée par une équation de relaxation stochastique. Cela revient à utiliser

$$v_{\tau\alpha} = -\frac{F_{\tau\alpha} - \mu_{\tau\alpha}}{r_{\tau}} + \sigma_{\tau} \eta_{\alpha}, \quad (7.25)$$

où $\mu_{\tau\alpha}$ est appelée accélération potentielle de relaxation, r_{τ} est le temps de relaxation, σ_{τ} est l'écart-type, et η_{α} est une variable aléatoire décorrélée en espace, en temps, et selon les trois directions. Les termes de cette équation se déterminent en faisant la régression linéaire de $v_{\tau\alpha}$ par rapport à $F_{\tau\alpha}$ avec les autres variables fixées.

Accélération potentielle de relaxation $\mu_{\tau\alpha}$: La figure 7.5 montre $\mu_{\tau\alpha}$ mesurée pour $\tau = 6$ et $\tau = 10$. Pour $\tau = 10$, certaines valeurs de $\omega_{\tau\alpha}$ et $c_{\tau\alpha}$ sont peu, ou pas mesurées durant l'expérience, car les fluctuations des variables coarse-grainées diminuent avec τ . On remarque

FIGURE 7.5 – Accélération potentielle de relaxation $\mu_{\tau\alpha}$ en fonction de la vorticité coarse-grainée et de son rotationnel mesurée pour l'expérience avec $\tau = 6$ et $\tau = 10$.

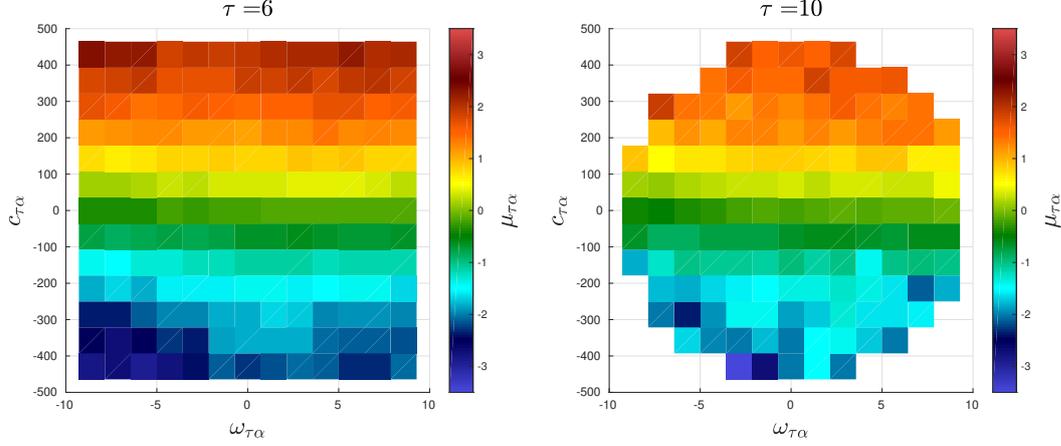


TABLE 7.2 – Viscosité effective et coefficient de régression de la régression linéaire de $\mu_{\tau}(c_{\tau\alpha})$ pour différentes valeurs du coefficient de coarse-graining.

τ	ν_{eff}/ν	Coefficient de regression R^2
1	-7,6	0,94
6	$-2,6 \cdot 10^1$	0,98
10	$-2,7 \cdot 10^1$	0,99

que lorsque μ_{τ} peut être mesuré, il semble peu dépendre de τ et $\omega_{\tau\alpha}$. Si l'on suppose que $\mu_{\tau\alpha}$ ne dépend pas de $\omega_{\tau\alpha}$, on mesure $\mu_{\tau\alpha}$ en fonction de $c_{\tau\alpha}$ uniquement (figures 7.6). Si l'on fait l'hypothèse que c'est une fonction linéaire, i.e.

$$\mu_{\tau\alpha} = -\frac{1}{Re_{eff}}(\nabla \times \omega_{\tau})_{\alpha}, \quad (7.26)$$

on peut facilement mesurer le coefficient Re_{eff} (7.2). En l'absence de la non-linéarité $\mathbf{v} \times \omega$ dans les équations dynamiques, l'accélération potentielle coarse-grainée s'écrirait simplement

$$\mathbf{F}_{\tau} = -\frac{1}{Re} \nabla \times \omega_{\tau}. \quad (7.27)$$

L'hypothèse $\mu_{\tau} = -\frac{1}{Re_{eff}} \nabla \times \omega_{\tau}$ correspond donc à un rappel vers un régime diffusif avec un nombre de Reynolds effectif Re_{eff} (ou une viscosité effective $\nu_{eff} = \nu Re / Re_{eff}$). On remarque que $\nu_{eff} < 0$, ce qui correspond à une antidiffusion de la vorticité (voir tableau 7.2). ν_{eff} augmente et semble converger lorsque τ augmente.

Temps de relaxation r_{τ} et écart-type σ_{τ} : On montre sur les figures 7.7 et 7.8 le temps de relaxation et l'écart-type mesuré pour $\tau = 6$ et $\tau = 10$. On observe moins bien les tendances du

FIGURE 7.6 – Accélération potentielle de relaxation $\mu_{\tau\alpha}$ en fonction du rotationnel de la vorticité mesurée pour l'expérience avec différentes valeurs de τ . Les régressions linéaires sont indiquées en traits continus.

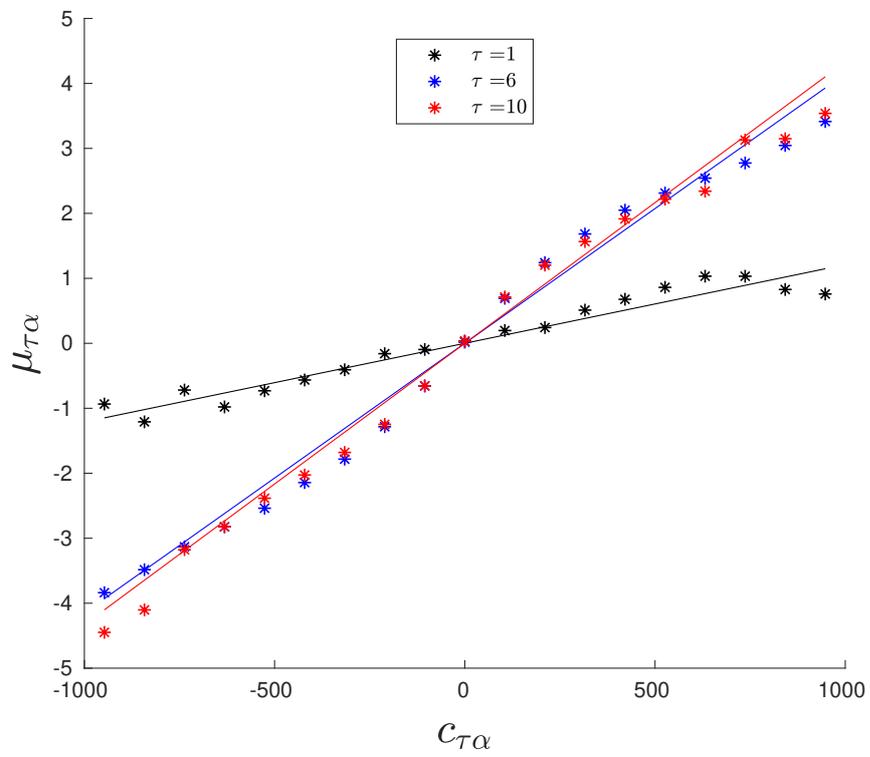
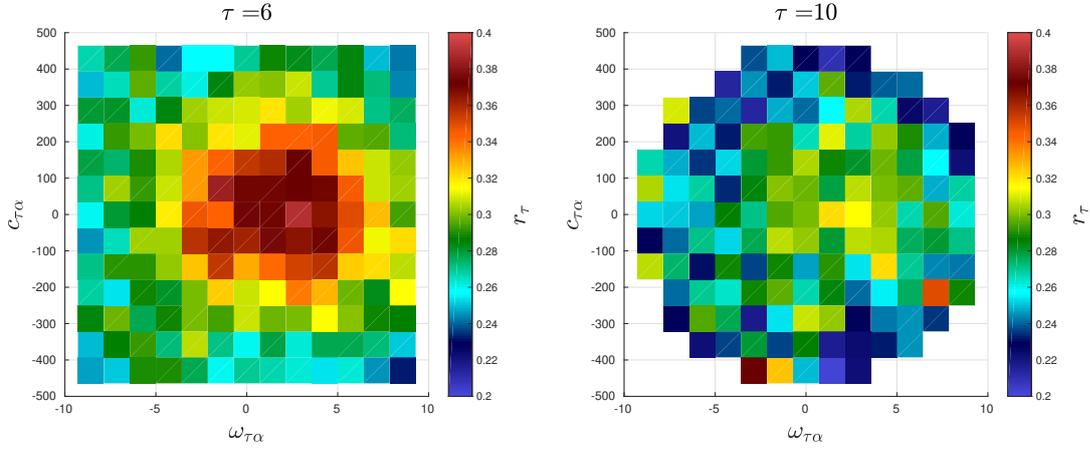
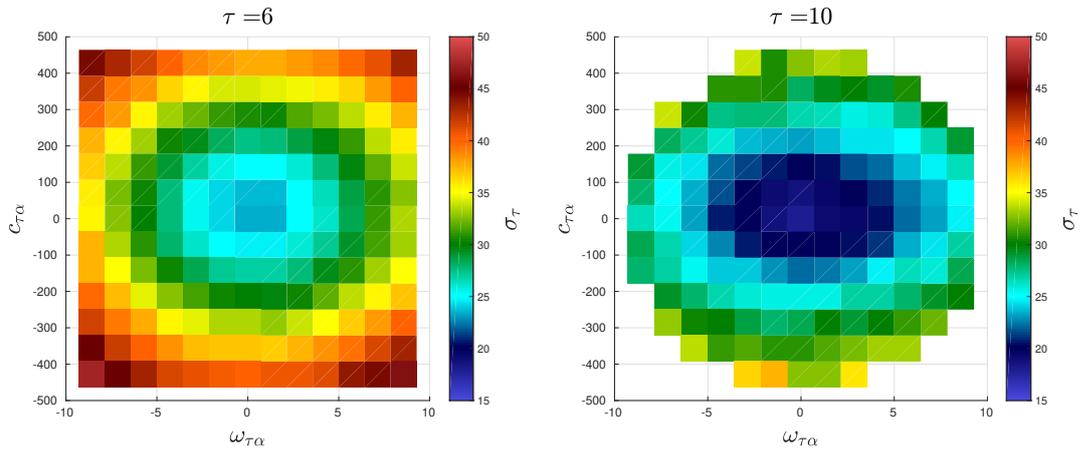


FIGURE 7.7 – Temps de relaxation r_τ en fonction de la vorticité coarse-grainée et de son rotationnel mesuré pour l'expérience avec $\tau = 6$ et $\tau = 10$.



temps de relaxation que celles de l'accélération potentielle de relaxation ou que l'écart-type. En s'appuyant sur les mesures faites pour $\tau = 6$, il semble que le temps de relaxation diminue avec vorticité coarse-grainée et son rotationnel. L'écart-type des fluctuations autour de la relaxation moyenne croît avec la vorticité coarse-grainée, son rotationnel, mais diminue avec τ .

FIGURE 7.8 – Écart-type σ_τ en fonction de la vorticité coarse-grainée et de son rotationnel mesuré pour l'expérience avec $\tau = 6$ et $\tau = 10$. Les échelles de couleurs ne sont pas les mêmes sur les deux figures.



7.5 Conclusions et perspectives

Nous avons appliqué la méthode d'analyse utilisée au chapitre précédent aux mesures expérimentales du champ de vitesse dans l'écoulement de Von Karman pour étudier la dynamique de la vortacité coarse-grainée. On observe que l'équation de la vortacité coarse-grainée

$$\partial_t \omega_{\tau\alpha} = (\nabla \times \mathbf{F}_\tau)_\alpha \quad (7.28)$$

où \mathbf{F}_τ est appelée accélération potentielle coarse-grainée, est vérifiée en moyenne. Les violations de cette équation correspondent à des erreurs de mesure, des erreurs numériques, ou d'autres phénomènes non pris en compte. Nous proposons une équation de relaxation stochastique comme relation de fermeture, qui s'écrit de façon informelle

$$\partial_t F_{\tau\alpha} = -\frac{F_{\tau\alpha} - \mu_{\tau\alpha}(\omega_{\tau\alpha}, (\nabla \times \boldsymbol{\omega}_\tau)_\alpha)}{r_\tau(\omega_{\tau\alpha}, (\nabla \times \boldsymbol{\omega}_\tau)_\alpha)} + \sigma_\tau \eta_\alpha \quad (7.29)$$

où $\mu_{\tau\alpha}$ est l'accélération potentielle de relaxation, r_τ est le temps de relaxation, σ_τ est l'écart-type, et η un bruit blanc dont la nature n'est pas déterminée (nous observons seulement qu'il n'est pas Gaussien). La dépendance en nombre de Reynolds n'est pas étudiée. L'accélération potentielle de relaxation ne dépend pas significativement de la vortacité coarse-grainée pour l'expérience que nous avons étudiée. Le temps de relaxation n'est pas négligeable et dépend de la vortacité coarse-grainée et de son rotationnel. Cela justifie le fait de devoir représenter la relaxation de l'accélération potentielle. On note que le temps de relaxation est assez mal mesuré (i.e. on n'observe pas de dépendances nettes). Il est donc possible qu'il dépende d'autres variables non prise en compte ici comme les fluctuations typiques de la vortacité dans la maille.

La construction du modèle sous-maille pour la dynamique de la vortacité coarse-grainée reste inachevée. Pour continuer l'étude de la dynamique de la vortacité coarse-grainée, il est nécessaire de distinguer les erreurs expérimentales (qui ne doivent pas être prises en compte dans le modèle sous-maille) des fluctuations liées au coarse-graining des observables (représentées par σ_τ dans le modèle sous-maille). D'autre part, le facteur de coarse-graining maximal utilisé ($\tau = 10$) reste assez faible, et il serait donc important d'avoir plus de données afin de valider le modèle sous-maille pour des facteurs de coarse-graining plus élevés. Pour cela, il serait possible d'analyser les données de simulations numériques directes.

Chapitre 8

Conclusion

Dans cette thèse, nous avons étudié deux types de méthodes de modélisation des processus sous-maille. Comme précisé en introduction, un modèle dépend du système étudié, mais aussi de l'objectif et des moyens dont on dispose. Bien que le système d'intérêt (le système climatique) soit resté le même dans les deux parties de cette thèse, les moyens que requièrent les outils utilisés ne sont pas identiques. La maximisation de la production a plutôt été envisagée comme une approche à utiliser dans des modèles simplifiés, peu gourmands en ressources numériques et en calibration de paramètres. Les modèles sous-maille stochastiques du second ordre seront certainement plus précis, mais auront tendance à complexifier les modèles de climat en introduisant des équations aux dérivées partielles et des paramètres supplémentaires. On peut donc considérer que les deux approches sont complémentaires.

La première se base sur une vision macroscopique du système. On utilise le bilan d'énergie et la maximisation de production d'entropie (MEP) comme hypothèse de fermeture non locale. En tant que "principe" variationnel, cette hypothèse présente l'avantage d'éviter l'introduction de paramètres, parfois difficiles à calibrer. L'hypothèse MEP constitue une alternative aux paramétrisations usuelles (du type viscosité turbulente ou bulk aerodynamic formula). En rapprochant l'hypothèse MEP de l'hypothèse de maximum d'entropie utilisée en physique statistique, on peut voir l'hypothèse MEP comme un principe de sélection arbitraire des degrés de libertés non résolus par le modèle, tout en respectant les contraintes imposées sur les variables résolues. De ce point de vue, la question qui se pose est l'identification des "contraintes" les plus importantes pour la bonne représentation du problème. À notre connaissance, les modèles de ce type ne donnaient pas de description appropriée des échanges d'énergie en terme de transport convectif, et l'hypothèse n'était pas étendue avec succès aux problèmes dépendant du temps. Ce sont deux limitations que nous avons tenté de lever ici. Au chapitre 3, nous avons construit un modèle radiatif-convectif décrivant le transport d'énergie en terme de transport de masse (i.e. en prescrivant un schéma convectif) et en tenant compte des différentes formes d'énergies (sensible, géopotentielle et latente). Les résultats obtenus sont plus réalistes que pour les modèles précédents : on retrouve le gradient de température adiabatique et une stratosphère si l'on tient compte de l'énergie géopotentielle. Cela montre l'importance d'avoir une représentation du transport d'énergie plus réaliste dans ces modèles. Au chapitre 4, nous nous sommes intéressé à un modèle conceptuel dans lequel le forçage dépend du temps. Il apparaît qu'il est nécessaire de distinguer les processus turbulents qui peuvent potentiellement être représentés avec l'hypothèse MEP, des processus non-turbulents comme le forçage radiatif ou le stockage d'énergie par diffusion qui doivent être représentés de façon usuelle. Nous proposons donc d'optimiser la pro-

duction d'entropie due aux échanges d'énergie turbulents, uniquement par rapport aux variables qui interviennent directement dans les processus turbulents. Au vu de ces résultats, on propose de construire un modèle basé sur l'hypothèse MEP de la façon suivante

1. On sépare les processus turbulents (comme la convection ou les flux de surface) optimisés par MEP, des autres processus (comme le forçage radiatif et la diffusion) qui sont représentés explicitement. Le bilan d'énergie s'écrit alors

$$\partial_t e + \nabla \cdot \mathbf{J} = Q \quad (8.1)$$

où $-\nabla \cdot \mathbf{J}$ est la convergence des flux d'énergie turbulents et Q est la convergence des flux d'énergie dûs aux autres processus.

2. Q est modélisé de façon usuelle. On décrit les éléments essentiels de la dynamique des processus turbulents. Il faut spécifier les termes d'énergie que l'on considère. Pour la représentation de la turbulence atmosphérique, les flux d'énergie sont représentés en terme d'échange de masse (i.e. on choisit un schéma convectif). On a donc les "contraintes dynamiques" suivantes :

$$e = e[T], \quad (8.2)$$

$$\mathbf{J} = m \nabla e, \quad (8.3)$$

$$m \geq 0. \quad (8.4)$$

où m est un ensemble de coefficients de mélange de masse, qui doivent être positifs.

3. On maximise la production d'entropie qui résulte du transport d'énergie par les processus turbulents

$$\Sigma = \int_0^{\tau} \int_V \frac{-\nabla \cdot \mathbf{J}}{T} \, \mathrm{d}\mathbf{r} \, \mathrm{d}t \quad (8.5)$$

par rapport aux coefficients de mélange m , en respectant l'équation de bilan d'énergie (8.1) et les contraintes dynamiques (8.2-8.4).

Il reste de nombreuses pistes d'améliorations assez directes comme l'introduction du cycle de l'eau, la représentation plus réaliste du cycle saisonnier ou l'utilisation d'un schéma de convection à plusieurs dimensions spatiales. Il serait aussi intéressant d'étudier la possibilité de représenter l'effet de la rotation (force centrifuge et Coriolis) sur les flux d'énergie dans ces modèles. Ce travail est par exemple abordé dans [Karkar and Paillard, 2015]. On peut aussi envisager des développements techniques, relatifs à la résolution des problèmes d'optimisations posés par ces modèles. Pour conclure, l'objectif à long terme est de proposer des modèles de climat "minimaux" qui pourraient être utilisés pour étudier des problèmes où la calibration des paramètres représentant la turbulence est impossible, ou simplement pas nécessaire.

La deuxième approche consiste à s'appuyer sur l'analyse des données de simulations numériques directes et/ou des mesures à haute résolution en vue de construire des modèles sous-mailles pour les écoulements (i.e. un modèle de turbulence). Les modèles de turbulence usuels ont été développés dans un contexte où l'on n'avait pas accès aux petites échelles, ni expérimentalement, ni numériquement. Ainsi, la modélisation (et les paramétrisations associées) sans observation directe était inévitable pour représenter l'effet des échelles non-résolues. L'accès récent à ces fines échelles (grâce à l'augmentation de la capacité de calcul et l'amélioration des procédés expérimentaux) conduit à la possibilité d'observer l'effet des échelles sous-mailles avant de les modéliser. Cela constitue un progrès important pour l'étude de la turbulence. Dans cette thèse,

nous nous sommes d'abord intéressé à un modèle de gaz sur réseau diffusif, puis à l'écoulement de Von Karman dans le régime turbulent en utilisant la même méthode pour les deux systèmes. Elle se décompose en plusieurs étapes :

1. Écrire les équations d'évolutions des champs d'observables coarse-grainées notés q_τ en faisant apparaître les termes non résolus notés J_τ (comme le flux coarse-grainé, l'accélération potentielle coarse-grainée, ou le tenseur des contraintes résiduelles coarse-grainé) ;
2. Il est alors nécessaire de modéliser le comportement des observables coarse-grainées non-résolues J_τ . Pour des systèmes où l'on ne peut pas supposer de séparation d'échelle, il faut représenter la dérivée temporelle (ou la dérivée Lagrangienne) des variables non-résolues, notée v_τ , qui est imprédictible d'un point de vue déterministe. En modélisation de la turbulence, on parle usuellement de modèle du second ordre stochastique. On liste les quantités influençant cette variation temporelle notée X_τ . Elles sont de trois types : les variables dynamiques (quantités q_τ et leurs gradients), les paramètres dynamiques (comme les probabilités de collision, ou le nombre de Reynolds), les paramètres de coarse-graining (type et taille des mailles utilisées). Il est en général nécessaire d'introduire des hypothèses simplificatrices qui permettent de réduire le nombre de variables du problème et rendre ainsi l'analyse possible. Cela revient à faire des hypothèses sur la rhéologie du modèle sous-maille. En particulier, nous nous sommes restreints à des rhéologies locales et isotropes ;
3. On procède au coarse-graining des champs microscopiques. Du point de vue pratique, il faut approximer les dérivées partielles par des différences finies et choisir le maillage. L'écoulement génère un grand nombre d'états des mailles (i.e. des réalisations du vecteur (v_τ, X_τ)) qui sont les données à analyser ;
4. On introduit les distributions de probabilités conditionnelles des variables v_τ , sachant les autres observables locales X_τ notée $p_\tau(\hat{v}|\hat{X})$ telles que la probabilité d'observer $v_\tau \in [\hat{v} - \frac{d\hat{v}}{2}; \hat{v} + \frac{d\hat{v}}{2}]$ sachant que $X_\tau \in [\hat{X} - \frac{d\hat{X}}{2}; \hat{X} + \frac{d\hat{X}}{2}]$ est $p_\tau(\hat{v}|\hat{X})d\hat{v}d\hat{X}$.
5. Nous regardons les distributions des variables centrées réduites

$$\delta_\tau(\hat{X}) = \frac{v_\tau - \langle v_\tau \rangle_{\hat{X}}}{\sqrt{\langle (v_\tau - \langle v_\tau \rangle_{\hat{X}})^2 \rangle_{\hat{X}}}} \quad (8.6)$$

où

$$\langle v_\tau^n \rangle_{\hat{X}} = \int \hat{v}^n p_\tau(\hat{v}|\hat{X}) d\hat{v} \quad (8.7)$$

pour les différentes valeurs de τ et \hat{X} afin de vérifier si on observe un comportement universel. Sinon, on essaye de lever des hypothèses ;

6. Si les variables $\delta_\tau(\hat{X})$ ont un comportement universel, il suffit de modéliser les deux premiers moments de v_τ en fonction de X . On peut par exemple utiliser une équation de relaxation stochastique (ou équation de Langevin) de la forme

$$v_\tau = \frac{J_\tau - \mu_\tau(X_\tau)}{r_\tau(X_\tau)} + \sigma_\tau(X_\tau) \cdot \eta \quad (8.8)$$

où μ_τ correspond à un comportement vers lequel tend à évoluer J_τ , r_τ est le temps de relaxation, et $\sigma_\tau \eta$ décrit les fluctuations autour de la relaxation moyenne. À cette étape, on essaye de mettre en évidence les dépendances des différents termes à modéliser afin d'éviter d'ajouter des paramètres supplémentaires, et faire des hypothèses cohérentes avec les observations. Par exemple, pour le gaz sur réseau, on a vu que les fluctuations et le

temps de relaxation pouvaient être décrits avec un modèle d'équilibre. Plus généralement, les outils de physique statistique hors équilibre et les résultats théoriques obtenus en théorie de la turbulence depuis la fin du 19^{ème} siècle peuvent être employés.

Il est important de noter que la modélisation sous-maille dans les modèles de climat est un problème bien plus large que la représentation des écoulements turbulents forcés aux bords. Il faut par exemple représenter l'effet d'un forçage volumique, les flux de surface d'évaporation ou d'évapotranspiration, la topographie, la chimie, la végétation, ... qui jouent un rôle important dans l'évolution du système climatique. De plus, nous ne disposons pas de simulations numériques directes et/ou de mesures suffisamment résolues pour appliquer la méthode directement sur des données du système climatique. En vue d'appliquer cette méthode à la modélisation du climat de façon indirecte, on pourrait commencer à s'intéresser à des simulations d'écoulements idéalisés (i.e. des écoulements de fluides incompressibles de laboratoire) avant d'introduire progressivement les processus importants dans l'étude du climat (comme la convection, la rotation, la compressibilité, les changements de phase).

Bibliographie

- [A. McClatchey et al., 1972] A. McClatchey, R., W. Fenn, R., E. A. Selby, J., E. Volz, F., and S. Garing, J. (1972). Optical properties of the atmosphere (third edition). *Environ. Res. Pap.*, 32 :113.
- [A Wolf-Gladrow, 2000] A Wolf-Gladrow, D. (2000). Lattice-gas cellular automata and lattice boltzmann models - an introduction. *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models*, 1725.
- [Achatz et al., 2013] Achatz, U., Dolaptchiev, S., and Timofeyev, I. (2013). Subgrid-scale closure for the inviscid burgers-hopf equation.
- [Adcroft et al., 2004] Adcroft, A., Campin, J.-M., Hill, C., and Marshall, J. (2004). Implementation of an atmosphere–ocean general circulation model on the expanded spherical cube. *Monthly Weather Review*, 132(12) :2845–2863.
- [Alves et al., 2019] Alves, M., Music, B., Nadeau, D. F., and Anctil, F. (2019). Comparing the performance of the maximum entropy production model with a land surface scheme in simulating surface energy fluxes. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 124(6) :3279–3300.
- [Basdevant, 2010] Basdevant, J.-L. (2010). *Variational Principles in Physics*. Springer Publishing Company, Incorporated, 1st edition.
- [Beck and Cohen, 2003] Beck, C. and Cohen, E. (2003). Superstatistics. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 322 :267 – 275.
- [Berner et al., 2017] Berner, J., Achatz, U., Batté, L., Bengtsson, L., Cámara, A. d. l., Christensen, H. M., Colangeli, M., Coleman, D. R. B., Crommelin, D., Dolaptchiev, S. I., Franzke, C. L. E., Friederichs, P., Imkeller, P., Järvinen, H., Juricke, S., Kitsios, V., Lott, F., Lucarini, V., Mahajan, S., Palmer, T. N., Penland, C., Sakradzija, M., von Storch, J.-S., Weisheimer, A., Weniger, M., Williams, P. D., and Yano, J.-I. (2017). Stochastic parameterization : Toward a new view of weather and climate models. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 98(3) :565–588.
- [Bertini et al., 2014] Bertini, L., De Sole, A., Gabrielli, D., Jona-Lasinio, G., and Landim, C. (2014). Macroscopic fluctuation theory. *Reviews of Modern Physics*, 87.
- [Betts, 1986] Betts, A. K. (1986). A new convective adjustment scheme. part i : Observational and theoretical basis. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 112(473) :677–691.
- [Betts and Ball, 1995] Betts, A. K. and Ball, J. H. (1995). The five surface diurnal cycle climate. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 100(D12) :25679–25693.
- [Betts and Miller, 1986] Betts, A. K. and Miller, M. J. (1986). A new convective adjustment scheme. part ii : Single column tests using gate wave, bomex, atex and arctic air-mass data sets. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 112(473) :693–709.

- [Bolton, 1980] Bolton, D. (1980). The computation of equivalent potential temperature. *Monthly Weather Review*, 108(7) :1046–1053.
- [Boon et al., 2000] Boon, J. P., Eijnden, E. V., and Hanon, D. (2000). A lattice gas automaton approach to "turbulent diffusion". *Chaos, Solitons & Fractals*, 11(1) :187 – 192.
- [Bouchet and Barré, 2005] Bouchet, F. and Barré, J. (2005). Classification of Phase Transitions and Ensemble Inequivalence, in Systems with Long Range Interactions. *Journal of Statistical Physics*, 118(5-6) :1073–1105.
- [Bouchet and Venaille, 2012] Bouchet, F. and Venaille, A. (2012). Statistical mechanics of two-dimensional and geophysical flows. *Physics Reports*, 515(5) :227 – 295. Statistical mechanics of two-dimensional and geophysical flows.
- [Boussinesq, 1877] Boussinesq, J. (1877). Essai sur la théorie des eaux courantes. *Impr. nationale (Paris)*, XXII(4) :680–61.
- [Boyd and Vandenberghe, 2004] Boyd, S. and Vandenberghe, L. (2004). *Convex Optimization*. Cambridge University Press.
- [Bruers, 2007] Bruers, S. (2007). A discussion on maximum entropy production and information theory. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 40(27) :7441–7450.
- [Budyko, 1969] Budyko, M. I. (1969). The effect of solar radiation variations on the climate of the earth. *Tellus*, 21(5) :611–619.
- [Burda et al., 2009] Burda, Z., Duda, J., Luck, J. M., and Waclaw, B. (2009). Localization of the maximal entropy random walk. *Phys. Rev. Lett.*, 102 :160602.
- [Caldeira, 2007] Caldeira, K. (2007). The maximum entropy principle : A critical discussion. *Climatic Change*, 85(3-4) :267–269.
- [Campa et al., 2014] Campa, A., Dauxois, T., Fanelli, D., and Ruffo, S. (2014). *Physics of long-range interacting systems*. Oxford University Press, Oxford.
- [Campa et al., 2009] Campa, A., Dauxois, T., and Ruffo, S. (2009). Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions. *Physics Reports*, 480(3) :57 – 159.
- [Carati and Cabot, 1996] Carati, D. and Cabot, W. H. (1996). Anisotropic eddy viscosity models.
- [Chen et al., 2004] Chen, H., Orszag, S. A., Staroselsky, I., and Succi, S. (2004). Expanded analogy between boltzmann kinetic theory of fluids and turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 519 :301–314.
- [Chýlek and Coakley, 1975] Chýlek, P. and Coakley, J. A. (1975). Analytical analysis of a budyko-type climate model. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 32(4) :675–679.
- [Ciliberto et al., 2004] Ciliberto, S., Garnier, N., Hernandez, S., Lacpatia, C., Pinton, J.-F., and Chavarria, G. R. (2004). Experimental test of the gallavotti–cohen fluctuation theorem in turbulent flows. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 340(1) :240 – 250. News and Expectations in Thermostatistics.
- [Ciliberto et al., 2011] Ciliberto, S., Joubaud, S., and Petrosyan, A. (2011). Fluctuations in out of equilibrium systems : from theory to experiment. *JSTAT*, P12003 :10. Submitted to JSTAT.
- [Crooks, 1999] Crooks, G. E. (1999). Entropy production fluctuation theorem and the nonequilibrium work relation for free energy differences. *Phys. Rev. E*, 60 :2721–2726.
- [Crucifix et al., 2002] Crucifix, M., Loutre, M.-F., Tulkens, P., Fichet, T., and Berger, A. (2002). Climate evolution during the holocene : a study with an earth system model of intermediate complexity. *Climate Dynamics*, 19(1) :43–60.

- [Debue, 2019] Debue, P. (2019). *Experimental approach to the problem of the Navier-Stokes singularities*. Theses, Université Paris-Saclay.
- [Debussche et al., 2012] Debussche, A., Glatt-Holtz, N., Temam, R., and Ziane, M. (2012). Global existence and regularity for the 3d stochastic primitive equations of the ocean and atmosphere with multiplicative white noise. *Nonlinearity*, 25(7) :2093–2118.
- [DeCosmo et al., 1996] DeCosmo, J., Katsaros, K. B., Smith, S. D., Anderson, R. J., Oost, W. A., Bumke, K., and Chadwick, H. (1996). Air-sea exchange of water vapor and sensible heat : The humidity exchange over the sea (hexos) results. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 101(C5) :12001–12016.
- [Detering and Etling, 1985] Detering, H. W. and Etling, D. (1985). Application of the k- ϵ turbulence model to the atmospheric boundary layer. *Boundary-Layer Meteorology*, 33 :113–133.
- [Dewar, 2003] Dewar, R. (2003). Information theory explanation of the fluctuation theorem, maximum entropy production and self-organized criticality in non-equilibrium stationary states. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 36(3) :631–641.
- [Dewar, 2005] Dewar, R. C. (2005). Maximum entropy production and the fluctuation theorem. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 38(21) :L371–L381.
- [Dewar, 2009] Dewar, R. C. (2009). Maximum entropy production as an inference algorithm that translates physical assumptions into macroscopic predictions : Don't shoot the messenger. *Entropy*, 11(4) :931–944.
- [Dixit et al., 2018] Dixit, P. D., Wagoner, J., Weistuch, C., Pressé, S., Ghosh, K., and Dill, K. A. (2018). Perspective : Maximum caliber is a general variational principle for dynamical systems. *The Journal of Chemical Physics*, 148(1) :010901.
- [Dolaptchiev et al., 2013] Dolaptchiev, S. I., Achatz, U., and Timofeyev, I. (2013). Stochastic closure for local averages in the finite-difference discretization of the forced burgers equation. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 27(3) :297–317.
- [Dufresne et al., 2013] Dufresne, J.-L., Foujols, M.-A., Denvil, S., Caubel, A., Marti, O., Aumont, O., Balkanski, Y., Bekki, S., Bellenger, H., Benshila, R., Bony, S., Bopp, L., Braconnot, P., Brockmann, P., Cadule, P., Cheruy, F., Codron, F., Cozic, A., Cugnet, D., and Vuichard, N. (2013). Climate change projections using the ipsl-cm5 earth system model : from cmip3 to cmip5. *Climate Dynamics*, 40 :2123–2165.
- [Dufresne et al., 2005] Dufresne, J.-L., Fournier, R., Hourdin, C., and Hourdin, F. (2005). Net exchange reformulation of radiative transfer in the co2 15- μ m band on mars. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 62(9) :3303–3319.
- [Ernst and Das, 1992] Ernst, M. H. and Das, S. P. (1992). Thermal cellular automata fluids. *Journal of Statistical Physics*, 66(1) :465–483.
- [Essex, 1984] Essex, C. (1984). Radiation and the irreversible thermodynamics of climate. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 41(12) :1985–1991.
- [Evans and Searles, 2002] Evans, D. J. and Searles, D. J. (2002). The fluctuation theorem. *Advances in Physics*, 51(7) :1529–1585.
- [Eymard et al., 2000] Eymard, R., Gallouët, T., and Herbin, R. (2000). Finite volume methods. In *Solution of Equation in \mathbb{R}^n (Part 3), Techniques of Scientific Computing (Part 3)*, volume 7 of *Handbook of Numerical Analysis*, pages 713 – 1018. Elsevier.
- [Faegre, 1972] Faegre, A. (1972). An intransitive model of the earth-atmosphere-ocean system. *Journal of Applied Meteorology*, 11(1) :4–6.

- [Fairall et al., 1996] Fairall, C. W., Bradley, E. F., Rogers, D. P., Edson, J. B., and Young, G. S. (1996). Bulk parameterization of air-sea fluxes for tropical ocean-global atmosphere coupled-ocean atmosphere response experiment. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 101(C2) :3747–3764.
- [Fiacco and McCormick, 1964] Fiacco, A. V. and McCormick, G. P. (1964). The sequential unconstrained minimization technique for nonlinear programming, a primal-dual method. *Management Science*, 10(2) :360–366.
- [Filyukov and Karpov, 1967] Filyukov, A. A. and Karpov, V. Y. (1967). Method of the most probable path of evolution in the theory of stationary irreversible processes. *Journal of Engineering Physics*, 13(6) :416–419.
- [Frankignoul and Hasselmann, 1977] Frankignoul, C. and Hasselmann, K. (1977). Stochastic climate models, part ii application to sea-surface temperature anomalies and thermocline variability. *Tellus*, 29(4) :289–305.
- [Franzke et al., 2015] Franzke, C. L. E., O’Kane, T. J., Berner, J., Williams, P. D., and Lucarini, V. (2015). Stochastic climate theory and modeling. *Wiley Interdisciplinary Reviews : Climate Change*, 6(1) :63–78.
- [Friehe and Schmitt, 1976] Friehe, C. A. and Schmitt, K. F. (1976). Parameterization of air-sea interface fluxes of sensible heat and moisture by the bulk aerodynamic formulas. *Journal of Physical Oceanography*, 6(6) :801–809.
- [Frisch et al., 1987] Frisch, U., She, Z., and Sulem, P. (1987). Large-scale flow driven by the anisotropic kinetic alpha effect. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 28(3) :382 – 392.
- [Gaspard, 2004] Gaspard, P. (2004). Time-reversed dynamical entropy and irreversibility in markovian random processes. *Journal of Statistical Physics*, 117(3) :599–615.
- [Gerard et al., 1990] Gerard, J.-C., Delcourt, D., and Francois, L. M. (1990). The maximum entropy production principle in climate models : Application to the faint young sun paradox. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 116(495) :1123–1132.
- [Germano et al., 1991] Germano, M., Piomelli, U., Moin, P., and Cabot, W. H. (1991). A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 3(7) :1760–1765.
- [Goody, 2007] Goody, R. (2007). Maximum entropy production in climate theory. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 64(7) :2735–2739.
- [Goody, 1952] Goody, R. M. (1952). A statistical model for water-vapour absorption. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 78(336) :165–169.
- [Goosse et al., 2010] Goosse, H., Brovkin, V., Fichefet, T., Haarsma, R., Huybrechts, P., Jongma, J., Mouchet, A., Selten, F., Barriat, P.-Y., Campin, J.-M., Deleersnijder, E., Driesschaert, E., Goelzer, H., Janssens, I., Loutre, M.-F., Morales Maqueda, M. A., Opsteegh, T., Mathieu, P.-P., Munhoven, G., Pettersson, E. J., Renssen, H., Roche, D. M., Schaeffer, M., Tartinville, B., Timmermann, A., and Weber, S. L. (2010). Description of the earth system model of intermediate complexity loveclim version 1.2. *Geoscientific Model Development*, 3(2) :603–633.
- [Gorban, 2006] Gorban, A. N. (2006). Basic types of coarse-graining.
- [Gottwald et al., 2017] Gottwald, G. A., Croomelin, D. T., and Franzke, C. L. E. (2017). *Stochastic Climate Theory*, page 209–240. Cambridge University Press.
- [Goupil and Herbert, 2020] Goupil, C. and Herbert, E. (2020). Adapted or adaptable : How to manage entropy production? *Entropy*, 22(1).

- [Grinstein and Linsker, 2007] Grinstein, G. and Linsker, R. (2007). Comments on a derivation and application of the ‘maximum entropy production’ principle. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 40(31) :9717.
- [Grosfils et al., 1993] Grosfils, P., Boon, J.-P., Brito, R., and Ernst, M. H. (1993). Statistical hydrodynamics of lattice-gas automata. *Phys. Rev. E*, 48 :2655–2668.
- [Hanjalić and Launder, 1972] Hanjalić, K. and Launder, B. E. (1972). A reynolds stress model of turbulence and its application to thin shear flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 52(4) :609–638.
- [Hansen et al., 1997] Hansen, J., Sato, M., and Ruedy, R. (1997). Radiative forcing and climate response. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 102(D6) :6831–6864.
- [Hardy et al., 1976] Hardy, J., de Pazzis, O., and Pomeau, Y. (1976). Molecular dynamics of a classical lattice gas : Transport properties and time correlation functions. *Phys. Rev. A*, 13.
- [Hardy et al., 1973] Hardy, J., Pomeau, Y., and de Pazzis, O. (1973). Time evolution of a two-dimensional classical lattice system. *Physical Review Letters - Phys Rev Lett*, 31 :276–279.
- [Hasselmann, 1976] Hasselmann, K. (1976). Stochastic climate models part i. theory. *Tellus*, 28(6) :473–485.
- [Heikes and Randall, 1995a] Heikes, R. and Randall, D. A. (1995a). Numerical integration of the shallow-water equations on a twisted icosahedral grid. part i : Basic design and results of tests. *Monthly Weather Review*, 123(6) :1862–1880.
- [Heikes and Randall, 1995b] Heikes, R. and Randall, D. A. (1995b). Numerical integration of the shallow-water equations on a twisted icosahedral grid. part ii. a detailed description of the grid and an analysis of numerical accuracy. *Monthly Weather Review*, 123(6) :1881–1887.
- [Herbert, 2012] Herbert, C. (2012). *Applications de la mécanique statistique à la modélisation du climat : thermodynamique et dynamique de l’atmosphère*. PhD thesis. Thèse de doctorat dirigée par Paillard, Didier et Dubrulle, Bérengère Géophysique Paris 6 2012.
- [Herbert, 2014] Herbert, C. (2014). Peut-on connaitre le climat sans connaitre la météo ? Article soumis au journal ”La Météorologie” (<http://documents.irevues.inist.fr/handle/2042/14834>) au titre du prix Prud’homme 2013 (<http://meteoetclimat.fr/prix-chercheurs-et-scolaires/>).
- [Herbert et al., 2011a] Herbert, C., Paillard, D., and Dubrulle, B. (2011a). Entropy production and multiple equilibria : The case of the ice-albedo feedback. *Earth System Dynamics*, 2 :13–23.
- [Herbert et al., 2013] Herbert, C., Paillard, D., and Dubrulle, B. (2013). Vertical temperature profiles at maximum entropy production with a net exchange radiative formulation. *Journal of Climate*, 26(21) :8545–8555.
- [Herbert et al., 2011b] Herbert, C., Paillard, D., Kageyama, M., and Dubrulle, B. (2011b). Present and last glacial maximum climates as states of maximum entropy production. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 137(657) :1059–1069.
- [Hourdin et al., 2017] Hourdin, F., Mauritsen, T., Gettelman, A., Golaz, J.-C., Balaji, V., Duan, Q., Folini, D., Ji, D., Klocke, D., Qian, Y., Rauser, F., Rio, C., Tomassini, L., Watanabe, M., and Williamson, D. (2017). The art and science of climate model tuning. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 98(3) :589–602.
- [Huybers and Curry, 2006] Huybers, P. and Curry, W. S. (2006). Links between annual, milan-kovitch and continuum temperature variability. *Nature*, 441 :329–332.
- [Isaksen et al., 2009] Isaksen, I., Granier, C., Myhre, G., Berntsen, T., Dalsøren, S., Gauss, M., Klimont, Z., Benestad, R., Bousquet, P., Collins, W., Cox, T., Eyring, V., Fowler, D., Fuzzi, S.,

- Jöckel, P., Laj, P., Lohmann, U., Maione, M., Monks, P., Prevot, A., Raes, F., Richter, A., Rognnerud, B., Schulz, M., Shindell, D., Stevenson, D., Storelvmo, T., Wang, W.-C., [van Weele], M., Wild, M., and Wuebbles, D. (2009). Atmospheric composition change : Climate–chemistry interactions. *Atmospheric Environment*, 43(33) :5138 – 5192. ACCENT Synthesis.
- [Jaynes, 1957] Jaynes, E. T. (1957). Information theory and statistical mechanics. *Phys. Rev.*, 106 :620–630.
- [Jaynes, 1985] Jaynes, E. T. (1985). Macroscopic prediction. In Haken, H., editor, *Complex Systems — Operational Approaches in Neurobiology, Physics, and Computers*, pages 254–269, Berlin, Heidelberg. Springer Berlin Heidelberg.
- [Jones and Launder, 1972] Jones, W. and Launder, B. (1972). The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15(2) :301 – 314.
- [Jupp and Cox, 2010] Jupp, T. E. and Cox, P. M. (2010). Mep and planetary climates : insights from a two-box climate model containing atmospheric dynamics. *Philosophical Transactions of the Royal Society B : Biological Sciences*, 365(1545) :1355–1365.
- [Kageyama et al., 2013] Kageyama, M., Braconnot, P., Bopp, L., Caubel, A., Foujols, M.-A., Guilyardi, É., Khodri, M., Lloyd, J., Lombard, F., Mariotti, V., Marti, O., Roy, T., and Woillez, M.-N. (2013). Mid-Holocene and Last Glacial Maximum climate simulations with the IPSL model—part I : comparing IPSL_CM5A to IPSL_CM4. *Climate Dynamics*, 40 :2447–2468.
- [Kara et al., 2000] Kara, A. B., Rochford, P. A., and Hurlburt, H. E. (2000). Efficient and accurate bulk parameterizations of air–sea fluxes for use in general circulation models. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 17(10) :1421–1438.
- [Karkar and Paillard, 2015] Karkar, S. and Paillard, D. (2015). Inferring global wind energetics from a simple earth system model based on the principle of maximum entropy production. *Earth System Dynamics Discussions*, 6 :407–433.
- [Kawasaki, 1973] Kawasaki, K. (1973). Simple derivations of generalized linear and nonlinear langevin equations. *Journal of Physics A : Mathematical, Nuclear and General*, 6(9) :1289–1295.
- [Kleidon, 2009] Kleidon, A. (2009). Nonequilibrium thermodynamics and maximum entropy production in the earth system. *Naturwissenschaften*, 96(6) :1–25.
- [Kleidon et al., 2006] Kleidon, A., Fraedrich, K., Kirk, E., and Lunkeit, F. (2006). Maximum entropy production and the strength of boundary layer exchange in an atmospheric general circulation model. *Geophysical Research Letters*, 33(6).
- [Kleidon et al., 2003] Kleidon, A., Fraedrich, K., Kunz, T., and Lunkeit, F. (2003). The atmospheric circulation and states of maximum entropy production. *Geophysical Research Letters*, 30(23).
- [Kober and Craig, 2016] Kober, K. and Craig, G. C. (2016). Physically Based Stochastic Perturbations (PSP) in the Boundary Layer to Represent Uncertainty in Convective Initiation. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 73(7) :2893–2911.
- [Kolmogorov, 1941] Kolmogorov, A. (1941). The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid for Very Large Reynolds’ Numbers. *Akademiia Nauk SSSR Doklady*, 30 :301–305.
- [Kondepudi and Prigogine, 1998] Kondepudi, D. and Prigogine, I. (1998). *Modern thermodynamics : from heat engines to dissipative structures*. John Wiley.
- [Kraichnan and Montgomery, 1980] Kraichnan, R. H. and Montgomery, D. (1980). Two-dimensional turbulence. *Reports on Progress in Physics*, 43(5) :547–619.

- [Kremer, 2010] Kremer, G. (2010). *An Introduction to the Boltzmann Equation and Transport Processes in Gases*. Interaction of Mechanics and Mathematics. Springer Berlin Heidelberg.
- [Kutrib et al., 1997] Kutrib, M., Vollmar, R., and Worsch, T. (1997). Introduction to the special issue on cellular automata. *Parallel Computing*, 23(11) :1567 – 1576. Cellular automata.
- [Lacis and Hansen, 1974] Lacis, A. A. and Hansen, J. (1974). A parameterization for the absorption of solar radiation in the earth’s atmosphere. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 31(1) :118–133.
- [Large and Pond, 1981] Large, W. G. and Pond, S. (1981). Open ocean momentum flux measurements in moderate to strong winds. *Journal of Physical Oceanography*, 11(3) :324–336.
- [Large and Pond, 1982] Large, W. G. and Pond, S. (1982). Sensible and latent heat flux measurements over the ocean. *Journal of Physical Oceanography*, 12(5) :464–482.
- [Laskar, J. et al., 2004] Laskar, J., Robutel, P., Joutel, F., Gastineau, M., Correia, A. C. M., and Levrard, B. (2004). A long-term numerical solution for the insolation quantities of the earth. *A&A*, 428(1) :261–285.
- [Lauder and Spalding, 1974] Launder, B. and Spalding, D. (1974). The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 3(2) :269 – 289.
- [Lemke, 1977] Lemke, P. (1977). Stochastic climate models, part 3. application to zonally averaged energy models. *Tellus*, 29(5) :385–392.
- [Lesieur and Metais, 1996] Lesieur, M. and Metais, O. (1996). New trends in large-eddy simulations of turbulence. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 28(1) :45–82.
- [Lorenz, 1960] Lorenz, E. (1960). Dynamics of climate.
- [Lorenz, 1963] Lorenz, E. N. (1963). Deterministic nonperiodic flow. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 20(2) :130–141.
- [Lorenz, 2010] Lorenz, R. D. (2010). The two-box model of climate : limitations and applications to planetary habitability and maximum entropy production studies. *Philosophical Transactions of the Royal Society B : Biological Sciences*, 365(1545) :1349–1354.
- [Lorenz et al., 2001] Lorenz, R. D., Lunine, J. I., Withers, P. G., and McKay, C. P. (2001). Titan, mars and earth : Entropy production by latitudinal heat transport. *Geophysical Research Letters*, 28(3) :415–418.
- [Louis, 1979] Louis, J.-F. (1979). A parametric model of vertical eddy fluxes in the atmosphere. *Boundary-Layer Meteorology*, 17(2) :187–202.
- [Lynch and Richardson, 2006] Lynch, P. and Richardson, L. (2006). *The Emergence of Numerical Weather Prediction : Richardson’s Dream*. Cambridge University Press.
- [Majda et al., 2001] Majda, A. J., Timofeyev, I., and Vanden Eijnden, E. (2001). A mathematical framework for stochastic climate models. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 54(8) :891–974.
- [Majda et al., 2003] Majda, A. J., Timofeyev, I., and Vanden-Eijnden, E. (2003). Systematic strategies for stochastic mode reduction in climate. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 60(14) :1705–1722.
- [Malkus and Chandrasekhar, 1954] Malkus, W. V. R. and Chandrasekhar, S. (1954). The heat transport and spectrum of thermal turbulence. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 225(1161) :196–212.
- [Mallick, 2015] Mallick, K. (2015). The exclusion process : A paradigm for non-equilibrium behaviour. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 418 :17 – 48. Proceedings of the 13th International Summer School on Fundamental Problems in Statistical Physics.

- [Manabe and Strickler, 1964] Manabe, S. and Strickler, R. F. (1964). Thermal equilibrium of the atmosphere with a convective adjustment. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 21(4) :361–385.
- [Martyushev and Seleznev, 2006] Martyushev, L. and Seleznev, V. (2006). Maximum entropy production principle in physics, chemistry and biology. *Physics Reports*, 426(1) :1 – 45.
- [Martyushev and Seleznev, 2014] Martyushev, L. and Seleznev, V. (2014). The restrictions of the maximum entropy production principle. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 410 :17 – 21.
- [Mellor and Yamada, 1982] Mellor, G. L. and Yamada, T. (1982). Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems. *Reviews of Geophysics*, 20(4) :851–875.
- [Meneveau and Sagaut, 2006] Meneveau, C. and Sagaut, P. (2006). *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows : An Introduction*. Scientific Computation. Springer Berlin Heidelberg.
- [Mihelich et al., 2015] Mihelich, M., Faranda, D., Dubrulle, B., and Paillard, D. (2015). Statistical optimization for passive scalar transport : maximum entropy production versus maximum kolmogorov–sinai entropy. *Nonlinear Processes in Geophysics*, 22(2) :187–196.
- [Mihelich et al., 2017] Mihelich, M., Faranda, D., Paillard, D., and Dubrulle, B. (2017). Is turbulence a state of maximum energy dissipation? *Entropy*, 19(4) :154.
- [Moin and Mahesh, 1998] Moin, P. and Mahesh, K. (1998). Direct numerical simulation : A tool in turbulence research. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30(1) :539–578.
- [Monin and Obukhov, 1954] Monin, A. S. and Obukhov, A. M. (1954). Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere. *Contrib. Geophys. Inst. Acad. Sci. USSR*, 151(163) :e187.
- [Monthus, 2011] Monthus, C. (2011). Non-equilibrium steady states : maximization of the shannon entropy associated with the distribution of dynamical trajectories in the presence of constraints. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2011(03) :P03008.
- [Mori, 1965a] Mori, H. (1965a). A Continued-Fraction Representation of the Time-Correlation Functions. *Progress of Theoretical Physics*, 34(3) :399–416.
- [Mori, 1965b] Mori, H. (1965b). Transport, Collective Motion, and Brownian Motion*). *Progress of Theoretical Physics*, 33(3) :423–455.
- [North et al., 1981] North, G. R., Cahalan, R. F., and Coakley Jr., J. A. (1981). Energy balance climate models. *Reviews of Geophysics*, 19(1) :91–121.
- [O’Brien and Stephens, 1995] O’Brien, D. M. and Stephens, G. L. (1995). Entropy and climate. ii : Simple models. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 121(527) :1773–1796.
- [Oerlemans and Van Den Dool, 1978] Oerlemans, J. and Van Den Dool, H. M. (1978). Energy balance climate models : Stability experiments with a refined albedo and updated coefficients for infrared emission. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 35(3) :371–381.
- [Onsager, 1931] Onsager, L. (1931). Reciprocal relations in irreversible processes. i. *Phys. Rev.*, 37 :405–426.
- [Ozawa and Ohmura, 1997] Ozawa, H. and Ohmura, A. (1997). Thermodynamics of a Global-Mean State of the Atmosphere—A State of Maximum Entropy Increase. *Journal of Climate*, 10(3) :441–445.
- [Ozawa et al., 2003] Ozawa, H., Ohmura, A., Lorenz, R. D., and Pujol, T. (2003). The second law of thermodynamics and the global climate system : A review of the maximum entropy production principle. *Reviews of Geophysics*, 41(4).

- [Paillard, 1998] Paillard, D. (1998). The timing of Pleistocene glaciations from a simple multiple-state climate model. *nature*, 391(6665) :378–381.
- [Paillard, 2015] Paillard, D. (2015). Quaternary glaciations : from observations to theories. *Quaternary Science Reviews*, 107 :11 – 24.
- [Paillard and Herbert, 2013] Paillard, D. and Herbert, C. (2013). Maximum entropy production and time varying problems : The seasonal cycle in a conceptual climate model. *Entropy*, 15(7) :2846–2860.
- [Palmer, 2019] Palmer, T. (2019). Stochastic weather and climate models. *Nature Reviews Physics*, 1(7) :463–471.
- [Paltridge, 1975] Paltridge, G. W. (1975). Global dynamics and climate - a system of minimum entropy exchange. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 101(429) :475–484.
- [Paltridge, 1978] Paltridge, G. W. (1978). The steady-state format of global climate. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 104(442) :927–945.
- [Paltridge, 1981] Paltridge, G. W. (1981). Thermodynamic dissipation and the global climate system. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 107(453) :531–547.
- [Pascale et al., 2012] Pascale, S., Gregory, J. M., Ambaum, M. H. P., Tailleux, R., and Lucarini, V. (2012). Vertical and horizontal processes in the global atmosphere and the maximum entropy production conjecture. *Earth System Dynamics*, 3(1) :19–32.
- [Peixoto and Oort, 1992] Peixoto, J. P. and Oort, A. H. (1992). *Physics of climate*. American Institute of Physics New York.
- [Perlwitz et al., 2017] Perlwitz, J., Knutson, T., Kossin, J. P., and LeGrande, A. N. (2017). *Large-scale circulation and climate variability*, pages 161–184. U.S. Global Change Research Program, Washington, D.C.
- [Pope, 2001] Pope, S. B. (2001). Turbulent flows. *Measurement Science and Technology*, 12(11) :2020–2021.
- [Prescott and Collins, 1951] Prescott, J. A. and Collins, J. A. (1951). The lag of temperature behind solar radiation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 77(331) :121–126.
- [Pressé et al., 2013] Pressé, S., Ghosh, K., Lee, J., and Dill, K. A. (2013). Principles of maximum entropy and maximum caliber in statistical physics. *Rev. Mod. Phys.*, 85 :1115–1141.
- [Pujol, 2003] Pujol, T. (2003). Eddy heat diffusivity at maximum dissipation in a radiative-convective one-dimensional climate model. *Journal of the Meteorological Society of Japan. Ser. II*, 81(2) :305–315.
- [Pujol and Fort, 2002] Pujol, T. and Fort, J. (2002). States of maximum entropy production in a one-dimensional vertical model with convective adjustment. *Tellus A*, 54 :363 – 369.
- [Pujol and Llebot, 2000a] Pujol, T. and Llebot, J. E. (2000a). Extremal climatic states simulated by a 2-dimensional model. *Tellus A*, 52(4) :440–454.
- [Pujol and Llebot, 2000b] Pujol, T. and Llebot, J. E. (2000b). Extremal climatic states simulated by a 2-dimensional model part i : Sensitivity of the model and present state. *Tellus A : Dynamic Meteorology and Oceanography*, 52(4) :422–439.
- [Rahmstorf, 2006] Rahmstorf, S. (2006). Thermohaline ocean circulation. *Encyclopedia of Quaternary Sciences*, 1 :739–750.
- [Randall et al., 2007] Randall, D. A., Wood, R. T. A., Bony, S., Colman, R. A., Fichefet, T., Fyfe, J. C., Kattsov, V. M., Pitman, A. J., Shukla, J., Srinivasan, J., Stouffer, R. J., Sumi, A.,

- Taylor, K. E., Contributors, AchutaRao, K., Allan, R. P., Berger, A., Blatter, H., Ls, C., Boone, A., Bretherton, C. S., Broccoli, A. J., Brovkin, V., Cai, W., Claussen, M. A., Dirmeyer, P. A., Doutriaux, C. M., Drange, H., Dufresne, J.-L., Emori, S., Forster, P. M., Frei, A., Ganopolski, A., Gent, P. R., Gleckler, P. J., Goosse, H., Graham, R. N., Gregory, J. M., Gudgel, R. I., Hall, A., Hallegatte, S., Hasumi, H., Henderson-Sellers, A., Hendon, H. H., Hodges, K., Holland, M. M., Holtslag, A., Hunke, E. C., Huybrechts, P., Ingram, W., Joos, F., Kirtman, B. P., Klein, S. A., Koster, R. D., Kushner, P. J., Lanzante, J. R., Latif, M., Lau, N.-C., Meinshausen, M., Monahan, A., Murphy, J. M., Osborn, T. J., Pavlova, T., Petoukhov, V., Phillips, T., Power, S. B., Rahmstorf, S., Raper, S., Renssen, H., Rind, D., Roberts, M., Rosati, A. N., Schär, C. M., Schmittner, A., Scinocca, J. F., Seidov, D., Slater, A. F. G., Slingo, J., Smith, D., Soden, B. J., Stern, W., Stone, D. A., Sudo, K., Takemura, T., Tselioudis, G., Webb, M. J., and Wild, M. (2007). Climate models and their evaluation.
- [Reis, 2014] Reis, A. H. (2014). Use and validity of principles of extremum of entropy production in the study of complex systems. *Annals of Physics*, 346 :22 – 27.
- [Reynolds, 1883] Reynolds, O. (1883). Xxix. an experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 174 :935–982.
- [Rivet and Boon, 2005] Rivet, J.-P. and Boon, J. P. (2005). *Lattice Gas Hydrodynamics*.
- [Rodgers, 1976] Rodgers, C. D. (1976). Comments on paltridge’s ‘minimum entropy exchange’ principle. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 102(432) :455–458.
- [Rodgers and Walshaw, 1966] Rodgers, C. D. and Walshaw, C. D. (1966). The computation of infra-red cooling rate in planetary atmospheres. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 92(391) :67–92.
- [Rotta, 1951] Rotta, J. (1951). Statistische theorie nichthomogener turbulenz. *Zeitschrift für Physik*, 131(1) :51–77.
- [Scarano, 2012] Scarano, F. (2012). Tomographic PIV : principles and practice. *Measurement Science and Technology*, 24(1) :012001.
- [Schaffenberger et al., 2001] Schaffenberger, W., Hanslmeier, A., and Messerotti, M. (2001). A Lattice Gas Model for Twodimensional Boussinesq Convection. *Hvar Observatory Bulletin*, 25(1) :49–60.
- [Schmidt et al., 2014] Schmidt, G. A., Annan, J. D., Bartlein, P. J., Cook, B. I., Guilyardi, E., Hargreaves, J. C., Harrison, S. P., Kageyama, M., LeGrande, A. N., Konecky, B., Lovejoy, S., Mann, M. E., Masson-Delmotte, V., Risi, C., Thompson, D., Timmermann, A., Tremblay, L.-B., and Yiou, P. (2014). Using palaeo-climate comparisons to constrain future projections in cmip5. *Climate of the Past*, 10(1) :221–250.
- [Sellers, 1969] Sellers, W. D. (1969). A global climatic model based on the energy balance of the earth-atmosphere system. *Journal of Applied Meteorology*, 8(3) :392–400.
- [Shang et al., 2005] Shang, X., Tong, P., and Xia, K.-Q. (2005). Test of steady-state fluctuation theorem in turbulent rayleigh-benard convection. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, 72 :015301.
- [Shannon, 1948] Shannon, C. E. (1948). A mathematical theory of communication. *Bell System Technical Journal*, 27(3) :379–423.
- [Smagorinsky, 1963] Smagorinsky, J. (1963). General circulation experiments with the primitive equations. *Monthly Weather Review*, 91(3) :99–164.

- [Stevens and Bony, 2013] Stevens, B. and Bony, S. (2013). What are climate models missing? *Science*, 340(6136) :1053–1054.
- [Stine and Huybers, 2012] Stine, A. R. and Huybers, P. (2012). Changes in the seasonal cycle of temperature and atmospheric circulation. *Journal of Climate*, 25(21) :7362–7380.
- [Stine et al., 2009] Stine, A. R., Huybers, P., and Fung, I. Y. (2009). Changes in the phase of the annual cycle of surface temperature. *Nature*, 457 :435–440.
- [Suarez et al., 1983] Suarez, M. J., Arakawa, A., and Randall, D. A. (1983). The parameterization of the planetary boundary layer in the ucla general circulation model : Formulation and results. *Monthly Weather Review*, 111(11) :2224–2243.
- [Thompson and Schneider, 1979] Thompson, S. L. and Schneider, S. H. (1979). A seasonal zonal energy balance climate model with an interactive lower layer. *Journal of Geophysical Research : Oceans*, 84(C5) :2401–2414.
- [Touchette, 2009] Touchette, H. (2009). The large deviation approach to statistical mechanics. *Physics Reports*, 478(1) :1 – 69.
- [Touchette, 2018] Touchette, H. (2018). Introduction to dynamical large deviations of markov processes. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 504 :5 – 19. Lecture Notes of the 14th International Summer School on Fundamental Problems in Statistical Physics.
- [Trenberth and Caron, 2001] Trenberth, K. E. and Caron, J. M. (2001). Estimates of meridional atmosphere and ocean heat transports. *Journal of Climate*, 14(16) :3433–3443.
- [Trenberth et al., 2009] Trenberth, K. E., Fasullo, J. T., and Kiehl, J. (2009). Earth’s global energy budget. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 90(3) :311–324.
- [Vallis, 2017] Vallis, G. K. (2017). *Atmospheric and Oceanic Fluid Dynamics : Fundamentals and Large-Scale Circulation*. Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 2nd edition.
- [Vanden Eijnden, 2003] Vanden Eijnden, E. (2003). Numerical techniques for multi-scale dynamical systems with stochastic effects. *Communications in Mathematical Sciences*, 1 :385–391.
- [Wang and Bras, 2011] Wang, J. and Bras, R. L. (2011). A model of evapotranspiration based on the theory of maximum entropy production. *Water Resources Research*, 47(3).
- [Wang et al., 2007] Wang, J., Bras, R. L., Lerdaun, M., and Salvucci, G. D. (2007). A maximum hypothesis of transpiration. *Journal of Geophysical Research : Biogeosciences*, 112(G3).
- [Wolfram, 1984] Wolfram, S. (1984). Cellular automata as models of complexity. *Nature*, 311 :419–424.
- [Wouters and Lucarini, 2012] Wouters, J. and Lucarini, V. (2012). Multi-level Dynamical Systems : Connecting the Ruelle Response Theory and the Mori-Zwanzig Approach. In *AGU Fall Meeting Abstracts*, volume 2012, pages NG43B–1575.
- [Wyant et al., 1988] Wyant, P. H., Mongroo, A., and Hameed, S. (1988). Determination of the heat-transport coefficient in energy-balance climate models by extremization of entropy production. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 45(2) :189–193.
- [Yano, 2015] Yano, J.-I. (2015). *Scale separation*, chapter Chapter 3, pages 73–99.
- [Ziegler and Wehrli, 1987] Ziegler, H. and Wehrli, C. (1987). On a Principle of Maximal Rate of Entropy Production. *Journal of Non Equilibrium Thermodynamics*, 12(3) :229–244.
- [Ziman, 1956] Ziman, J. M. (1956). The general variational principle of transport theory. *Canadian Journal of Physics*, 34(12A) :1256–1273.
- [Zonta and Chibbaro, 2016] Zonta, F. and Chibbaro, S. (2016). Entropy production and fluctuation relation in turbulent thermal convection. *EPL (Europhysics Letters)*, 114(5) :50011.

- [Zwanzig, 1965] Zwanzig, R. (1965). Time-correlation functions and transport coefficients in statistical mechanics. *Annual Review of Physical Chemistry*, 16(1) :67–102.
- [Zwanzig, 2001] Zwanzig, R. (2001). *Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Oxford University Press.

Annexe A

Thermodynamique

La Thermodynamique [Kondepudi and Prigogine, 1998] est la branche de la Physique qui s'intéresse aux échanges de matière et d'énergie dans les systèmes macroscopiques, composés d'un grand nombre de constituants microscopiques.

A.1 Thermodynamique d'équilibre

Un système macroscopique à l'équilibre homogène peut être décrit par un nombre réduit de variables, appelées variables d'état (ou thermodynamiques) qui peuvent être extensives (i.e. qui s'additionnent lorsque l'on considère la réunion de plusieurs systèmes) ou intensives (i.e. qui sont le rapport entre deux variables extensives). Le nombre de variables d'état nécessaires pour déterminer l'état du système est appelé le nombre de variance. Une fonction dépendant des variables d'état est appelée fonction d'état. Le but de la Thermodynamique d'équilibre est d'obtenir les relations existantes entre les variables d'état, appelées équations d'état. On considérera un système de volume V , d'énergie interne (i.e. la somme des énergies cinétique et potentielle microscopiques) U et de quantité de composants chimiques $\{N_i\}$.

Premier postulat : conservation de l'énergie L'énergie totale d'un système isolé est conservée. Si le système subit une transformation infinitésimale, la variation d'énergie totale est

$$dE = dK + dU = \delta Q + \delta W + \sum_i \delta M_i, \quad (\text{A.1})$$

où dE est la variation d'énergie totale, dK est la variation d'énergie cinétique (macroscopique), dU est la variation d'énergie interne, δQ est la chaleur reçue par le système (i.e. l'énergie sous forme microscopique échangée avec le milieu extérieur), δW est le travail des forces extérieures, et δM est l'apport d'énergie due à la variation de quantité de matière du composant i .

Second postulat : augmentation de l'entropie Il existe une fonction d'état extensive, appelée entropie, notée S , telle que pour un système isolé

$$\frac{dS}{dt} \geq 0. \quad (\text{A.2})$$

L'entropie est une mesure du désordre dans le système. Ce postulat permet de représenter le caractère irréversible (ou spontané) de certains échanges de matière et d'énergie. L'état d'équilibre

est celui qui maximise l'entropie.

L'état d'équilibre homogène ne dépend que des variables d'états. Ainsi, on a $S(U, V, \{N_i\})$. Si l'entropie est une fonction inversible, on peut aussi exprimer l'énergie interne comme une fonction de l'entropie et des autres variables d'état $U(S, V, \{N_i\})$. En considérant que U et S sont des fonctions différentiables, on peut écrire leurs différentielles

$$dU = \frac{\partial U}{\partial S} dS + \frac{\partial U}{\partial V} dV + \sum_i \frac{\partial U}{\partial N_i} dN_i, \quad (\text{A.3})$$

$$dS = \frac{\partial S}{\partial U} dU + \frac{\partial S}{\partial V} dV + \sum_i \frac{\partial S}{\partial N_i} dN_i. \quad (\text{A.4})$$

On introduit la température T , la pression p et les potentiels chimiques $\{\mu_i\}$ tels que

$$\frac{\partial U}{\partial S} \equiv T, \quad \frac{\partial U}{\partial V} \equiv -p, \quad \frac{\partial U}{\partial N_i} \equiv \mu_i, \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{\partial S}{\partial U} \equiv \frac{1}{T}, \quad \frac{\partial S}{\partial V} \equiv \frac{p}{T}, \quad \frac{\partial S}{\partial N_i} \equiv -\frac{\mu_i}{T}. \quad (\text{A.6})$$

Les différentielles de l'énergie interne et de l'entropie pour un système à l'équilibre homogène s'écrivent donc

$$dU = T dS - p dV + \sum_i \mu_i dN_i, \quad (\text{A.7})$$

$$dS = \frac{1}{T} dU + \frac{p}{T} dV - \sum_i \frac{\mu_i}{T} dN_i. \quad (\text{A.8})$$

Si l'entropie est deux fois dérivable, on a également les relations de Maxwell

$$\frac{\partial^2 S}{\partial X \partial Y} = \frac{\partial^2 S}{\partial Y \partial X}, \quad X, Y = U, V, \{N_i\}. \quad (\text{A.9})$$

Comme l'entropie est une fonction d'état extensive, c'est une fonction homogène, i.e.

$$S(\lambda U, \lambda V, \{\lambda N_i\}) = \lambda S(U, V, \{N_i\}), \quad \forall \lambda \geq 0. \quad (\text{A.10})$$

En dérivant la relation précédente par rapport à λ , puis en évaluant pour $\lambda = 1$, on obtient la relation d'Euler

$$S = \frac{\partial S}{\partial U} U + \frac{\partial S}{\partial V} V + \sum_i \frac{\partial S}{\partial N_i} N_i \quad (\text{A.11})$$

$$= \frac{U}{T} + \frac{pV}{T} - \sum_i \frac{\mu_i N_i}{T}. \quad (\text{A.12})$$

Au cours d'une expérience, on impose certaines variables : U ou T , V ou p , et N_i ou μ_i , appelées variables externes. Les autres variables, appelées variables internes, sont obtenues par la maximisation de l'entropie. Si l'on connaît l'expression de l'entropie en fonction des variables externes, on peut en déduire les équations d'état qui fixent les variables internes. Par exemple, si l'on connaît $S(T, V, \{N_i\})$, on en déduit la pression $p = T \frac{\partial S}{\partial V}$, les potentiels chimiques $\mu_i = -T \frac{\partial S}{\partial N_i}$ et l'énergie interne $U = TS - pV + \sum_i \mu_i N_i$.

A.2 Thermodynamique hors équilibre

Lorsque le système n'a pas encore atteint son état d'équilibre, ou qu'il est maintenu hors équilibre par l'action d'un forçage extérieur (différence de densité, de charge électrique, de température, de vitesse, ...) on observe des flux internes (masse, charge électrique, chaleur, impulsion, ...). Trouver la relation entre ces flux, caractérisant la réponse du système, en fonction des forces thermodynamiques (relié aux inhomogénéités des variables d'état) permet de décrire l'évolution du système, et pas uniquement son état d'équilibre. Ce problème est l'objet de la thermodynamique hors équilibre.

L'équilibre local et l'hypothèse de milieu continu Chaque élément de volume infinitésimal du système est supposé être à l'équilibre homogène. Cela permet d'écrire que l'entropie d'un élément de volume infinitésimal est la même fonction des variables d'état locales que l'entropie d'équilibre homogène des variables d'état d'équilibre. Au lieu d'utiliser les variables extensives, on utilise la masse volumique ρ et les quantités spécifiques (i.e. par unité de masse). On note s l'entropie spécifique, u l'énergie interne spécifique, et n_i le rapport massique du composant i . Les variables d'état intensives sont supposées être des fonctions continues du temps t et de la position \mathbf{r} . On a alors

$$S = s\rho V \quad \Rightarrow \quad dS = ds \rho V + s d(\rho V), \quad (\text{A.13})$$

$$U = u\rho V \quad \Rightarrow \quad dU = du \rho V + u d(\rho V), \quad (\text{A.14})$$

$$N_i = n_i\rho V \quad \Rightarrow \quad dN_i = dn_i \rho V + n_i d(\rho V), \quad (\text{A.15})$$

et l'équation (A.7) devient

$$du \rho V + u d(\rho V) = T [ds \rho V + s d(\rho V)] \quad (\text{A.16})$$

$$- p \left[\frac{1}{\rho} d(\rho V) - \frac{V}{\rho} d\rho \right] \quad (\text{A.17})$$

$$+ \sum_i \mu_i [dn_i \rho V + n_i d(\rho V)]. \quad (\text{A.18})$$

L'équation précédente doit être valable pour toute masse ρV et toute variation $d(\rho V)$, on a donc les relations suivantes

$$u = Ts - \frac{p}{\rho} + \sum_i \mu_i n_i, \quad (\text{A.19})$$

$$du = Tds + \frac{p}{\rho^2} d\rho + \sum_i \mu_i dn_i. \quad (\text{A.20})$$

Le système est donc vu comme un ensemble de sous-systèmes caractérisés par les variables d'états locales que l'on suit dans leurs mouvements. L'hypothèse d'équilibre locale se justifie dans la limite où le volume infinitésimal est suffisamment grand pour être considéré comme un système thermodynamique, mais suffisamment petit pour que la dynamique microscopique ait le temps de maintenir l'équilibre dans le volume¹. Ces conditions sont souvent respectées en pratique.

1. L'équilibre local revient à négliger le temps de relaxation vers l'équilibre local devant l'échelle de temps macroscopique (de l'expérience).

Premier postulat : les équations de bilans Les équations de bilan de masse, d'impulsion et d'énergie interne pour un fluide monophasique sans source de masse s'écrivent

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (\text{A.21})$$

$$\rho \frac{Dv_\alpha}{Dt} = -\partial_\alpha p + \partial_\beta \Gamma_{\alpha\beta} + \rho f_\alpha, \quad \alpha = x, y, z, \quad (\text{A.22})$$

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\nabla \cdot \mathbf{q} - p \nabla \cdot \mathbf{v} + \Gamma_{\alpha\beta} \partial_\beta v_\alpha + Q, \quad (\text{A.23})$$

où Γ est le tenseur des contraintes visqueuses, \mathbf{f} l'accélération de la force volumique, \mathbf{q} est le flux diffusif d'énergie interne, et Q est la source volumique d'énergie interne.

Second postulat : augmentation de l'entropie La relation $du = Tds + \frac{p}{\rho^2}d\rho$ permet d'obtenir le bilan d'entropie pour un fluide monophasique sans source de masse

$$\rho T \frac{Ds}{Dt} = \rho \frac{Du}{Dt} - \frac{p}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} \quad (\text{A.24})$$

$$= -\nabla \cdot \mathbf{q} + \Gamma_{\alpha\beta} \partial_\beta v_\alpha + Q. \quad (\text{A.25})$$

Finalement, le bilan d'entropie d'une particule fluide est

$$\rho \frac{Ds}{Dt} = -\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \right) + \frac{Q}{T} + \mathbf{q} \cdot \nabla \left(\frac{1}{T} \right) + \frac{\Gamma_{\alpha\beta}}{T} \partial_\beta v_\alpha \quad (\text{A.26})$$

Les deux premiers termes du membre de droite correspondent à un échange. Dans le système, l'échange se fait via le flux d'énergie interne diffusif tandis que la source d'énergie représente l'échange avec le milieu extérieur. Les deux derniers termes du membre de droite correspondent à la production d'entropie interne :

$$\sigma \equiv \mathbf{q} \cdot \nabla \left(\frac{1}{T} \right) + \frac{\Gamma_{\alpha\beta}}{T} \partial_\beta v_\alpha \geq 0. \quad (\text{A.27})$$

Si on considère un fluide multiphasique avec plusieurs espèces chimiques et des sources de masses, la production d'entropie comprend plus de termes. Néanmoins, elle prend toujours la forme d'une somme de produits de flux avec leurs forces thermodynamiques associées (qui sont reliées aux gradients des variables d'état intensives à l'origine des flux). Par exemple, le flux d'énergie interne \mathbf{q} est associé à la force thermodynamique $\nabla \left(\frac{1}{T} \right)$. Le second postulat de la thermodynamique hors équilibre consiste à dire que la production d'entropie est toujours positive pour n'importe quelle particule fluide (i.e. localement). Cette inégalité permet de représenter le fait que les processus diffusifs sont irréversibles.

Remarques importantes : D'une façon générale, ces postulats consistent simplement à appliquer les postulats de la thermodynamique d'équilibre localement. Ils permettent d'exprimer la production d'entropie, mais ne donnent pas de relation entre les flux diffusifs et les forces thermodynamiques, ce qui est indispensable pour décrire l'évolution du système. On suppose généralement que la réponse du flux est locale et instantanée : les flux en un point et à un instant donné dépendent uniquement des forces en ce point au même instant. Quand un système est proche de l'équilibre, c'est-à-dire lorsque les forces thermodynamiques sont faibles, on peut considérer une relation linéaire entre les flux et les forces thermodynamiques [Onsager, 1931]. On

introduit alors les coefficients de transport comme la diffusivité, la viscosité ou les coefficients thermoélectriques, qui sont calibrés sur les résultats expérimentaux. Pour beaucoup de systèmes d'intérêts, les flux (en particulier les flux convectifs) ne peuvent pas être approximés par une relation linéaire. De plus, l'hypothèse d'ajustement instantanée des flux localement, est parfois mise en défaut, c'est par exemple le cas pour les fluides viscoélastiques.

Annexe B

Optimisation sous contrainte

Cette annexe a pour but de présenter certaines notions d'optimisation différentielle utiles pour la résolution des problèmes posés par les modèles basés sur la maximisation de la production d'entropie : la dualité Lagrangienne, les méthodes de points intérieurs et l'initialisation aléatoire de la condition initiale. Elle a été rédigée en s'appuyant sur les chapitres 4, 5 et 11 du livre [Boyd and Vandenberghe, 2004].

B.1 Introduction

Optimisation différentiable : Consiste à trouver la solution d'un problème prenant la forme suivante :

$$\begin{aligned} \text{minimiser une fonction d'objectif} & f_0(\mathbf{x}) \\ \text{avec les contraintes d'inégalités} & f_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ \text{et les contraintes d'égalités} & g_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, p, \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

où $\{f_i, i = 0, \dots, m\}$ et $\{g_j, j = 1, \dots, p\}$ sont des fonctions différentiables de $\mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n$ dans \mathbb{R} , avec $n, m, p \in \mathbb{N}$ et

$$\mathcal{D} = \bigcap_{i=0}^m \text{dom } f_i \bigcap_{j=1}^p \text{dom } g_j.$$

On note \mathbf{x}^* la solution de ce problème et $f^* = f_0(\mathbf{x}^*)$. L'ensemble des points pour lesquels les fonctions d'objectif et de contraintes sont définies est le domaine du problème d'optimisation. Un point \mathbf{x} est dit réalisable si $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$ et que \mathbf{x} satisfait toutes les contraintes. On note l'ensemble des points réalisables

$$\mathcal{X} = \{\mathbf{x} \in \mathcal{D} \mid f_i(\mathbf{x}) \leq 0, i = 1, \dots, m, g_j(\mathbf{x}) = 0, j = 1, \dots, p\}. \quad (\text{B.2})$$

Si \mathbf{x} est réalisable et que $f_i(\mathbf{x}) = 0$, on dit que la contrainte d'inégalité $f_i(\mathbf{x}) \leq 0$ est active en \mathbf{x} .

On note que minimiser une fonction revient à maximiser son opposé. De même, imposer la positivité d'une fonction revient à imposer la négativité de l'opposée de la fonction. La formulation du problème (B.1) est donc générale.

Convexité : Une fonction f définie sur un ensemble $\text{dom } f \subseteq \mathbb{R}^n$ est convexe lorsque

$$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \text{dom } f, \quad t \in [0, 1], \quad f(t\mathbf{x} + (1-t)\mathbf{y}) \leq tf(\mathbf{x}) + (1-t)f(\mathbf{y}). \quad (\text{B.3})$$

Lorsque l'inégalité est stricte, on parle de fonction strictement convexe.

Optimisation différentiable convexe/non convexe : On dit que le problème d'optimisation (B.1) est convexe si f_0, \dots, f_m sont des fonctions convexes¹ et que les fonctions de contraintes d'égalités h_1, \dots, h_p sont linéaires. Dans le cas contraire, le problème d'optimisation est non-convexe. Les problèmes d'optimisations peuvent être distingués en ces deux catégories pour la raison pratique suivante : on dispose de beaucoup de théorèmes et (par conséquent) de méthodes numériques fiables pour résoudre les problèmes convexes. Ce n'est pas le cas pour les problèmes non-convexes pour lesquels il n'existe pas de méthode générale.

Dans beaucoup d'applications pratiques, on applique des méthodes numériques d'optimisation convexe à des problèmes non-convexes de façon empirique, en espérant que l'algorithme converge vers la solution. C'est l'approche utilisée ici.

B.2 Optimisation différentiable convexe sans contrainte

Si on ne considère pas de contrainte, le problème d'optimisation s'écrit simplement

$$\text{minimiser} \quad f_0(\mathbf{x}) \quad (\text{B.4})$$

où le domaine du problème d'optimisation \mathcal{D} est simplement le domaine de définition de f_0 .

Théorème : Pour un problème d'optimisation différentiable convexe non contraint, si il existe un minimum local au problème, alors il s'agit du minimum global. Trouver la solution du problème d'optimisation est alors équivalent à résoudre

$$\nabla f_0(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}. \quad (\text{B.5})$$

Autrement dit, pour un problème d'optimisation différentiable convexe sans contrainte, la recherche de l'optimum est équivalente à la recherche de zéro du gradient de la fonction d'objectif. Les méthodes d'optimisation convexe (avec contraintes ou non) sont donc très liées aux méthodes de recherche de zéros (comme la méthode de Newton). Lorsque le problème n'est pas convexe, ce théorème n'est plus valable. La condition (B.5) devient une condition nécessaire, mais pas suffisante : le minimum global est un minimum local ou plus généralement un point critique, mais la réciproque n'est pas toujours vraie² : un point critique peut être un optimum local (et non-global) ou un point selle.

1. Si f_0 est concave, on peut se ramener à un problème convexe en maximisant la fonction d'objectif $-f_0$ qui est convexe. On parlera donc de problème convexe si f_0 est convexe ou concave.

2. Un contre-exemple très simple est la recherche du minimum de la fonction réelle $f(x) = ax^4 - (b-b_0)x^2$ avec $a > 0$. Ce problème admet l'unique solution $x = 0$ si $b \leq b_0$ et les deux solutions $x = \pm\sqrt{(b-b_0)/2a}$ si $b > b_0$. Dans le deuxième cas, l'équation $df/dx = 0$ admet également la solution $x = 0$ qui correspond à un maximum local.

B.3 Optimisation différentiable sous contrainte : méthode de dualité Lagrangienne et conditions KKT

On considère le problème d'optimisation différentiable contraint (B.1) que l'on appelle problème primaire. L'idée de base de la dualité Lagrangienne est de prendre en compte les contraintes en ajoutant une somme pondérée des fonctions de contraintes.

Lagrangien et fonction duale : On définit le Lagrangien associé au problème primaire (B.1)

$$\mathcal{L} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R} \quad (\text{B.6})$$

$$(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu}) \mapsto \mathcal{L}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu}) = f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^p \nu_j g_j(\mathbf{x}),$$

avec $\text{dom } \mathcal{L} = \mathcal{D} \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p$. On appelle λ_i (respectivement ν_j) le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte d'inégalité $f_i(\mathbf{x}) \leq 0$ (respectivement la contrainte d'égalité $g_j(\mathbf{x}) = 0$). $\boldsymbol{\lambda}$ et $\boldsymbol{\nu}$ sont les variables duales (ou vecteurs des multiplicateurs de Lagrange). On définit la fonction duale par

$$h : \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R} \quad (\text{B.7})$$

$$(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu}) \mapsto h(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu}) = \inf_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \mathcal{L}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu}).$$

Lorsque le Lagrangien \mathcal{L} n'est pas borné inférieurement, la fonction duale prend la valeur $-\infty$. Comme la fonction duale est une fonction affine de $(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu})$, elle est convexe.

Propriété : La fonction duale permet d'obtenir une borne inférieure sur la valeur optimale f^* du problème :

$$\forall \boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0} \quad \text{et} \quad \forall \boldsymbol{\nu}, \quad h(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu}) \leq f^*. \quad (\text{B.8})$$

Le problème dual La meilleure borne inférieure que l'on peut obtenir de la fonction duale est obtenue en résolvant le problème d'optimisation suivant :

$$\begin{aligned} & \text{maximiser} && h(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\nu}) && (\text{B.9}) \\ & \text{avec} && \boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0}, \end{aligned}$$

appelé problème dual. On note $(\boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\nu}^*)$ la solution de ce problème et $h^* = h(\boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\nu}^*)$. Étant donné que h est convexe, il s'agit d'un problème d'optimisation convexe, même si le problème primaire ne l'est pas³.

Dualité faible/forte : On a toujours la propriété de dualité faible

$$h^* \leq f^*. \quad (\text{B.10})$$

Dans le cas où l'égalité est stricte $h^* = f^*$, on parle de dualité forte. D'une façon générale (i.e. pour les problèmes convexes ou non), la propriété de dualité forte, si elle est vérifiée, permet de faciliter la résolution du problème. Il existe des propriétés qui garantissent la dualité forte, appelées contraintes de qualifications.

3. Le problème dual peut donc a priori être résolu, même quand le problème primaire n'est pas convexe. Se pose alors la question du lien entre les deux problèmes.

Théorème : Si le problème est différentiable, convexe, et qu'il vérifie la contrainte de qualification de Slater

$$\exists \mathbf{x} \in \overset{\circ}{\mathcal{D}}, \quad f_i(\mathbf{x}) < 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad \text{et} \quad g_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, p$$

alors il vérifie la propriété de dualité forte⁴.

Stagnation complémentaire : Si la propriété de dualité forte est vérifiée (i.e $f_0(\mathbf{x}^*) = f^* = h^* = h(\boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\nu}^*)$), on a

$$\begin{aligned} f_0(\mathbf{x}^*) &= h(\boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\nu}^*) \\ &= \inf_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \left\{ f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* f_i(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^p \nu_j^* g_j(\mathbf{x}) \right\} \\ &\leq f_0(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* f_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{j=1}^p \nu_j^* g_j(\mathbf{x}^*) \\ &\leq f_0(\mathbf{x}^*) \end{aligned} \tag{B.11}$$

La 3^{ème} ligne de l'équation précédente est donc une égalité et on en déduit que \mathbf{x}^* est un minimum de $\mathcal{L}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\nu}^*)$. D'autre part, cela implique que

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i^* f_i(\mathbf{x}^*) = 0, \tag{B.12}$$

et comme chaque terme de cette somme est négatif, on en conclut que

$$\lambda_i^* f_i(\mathbf{x}^*) = 0, \quad i = 1, \dots, m. \tag{B.13}$$

Cette condition est appelée condition de stagnation complémentaire. Elle est valable pour toute solution \mathbf{x}^* et $(\boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\nu}^*)$, lorsque la dualité forte est vérifiée. Elle signifie que le $i^{\text{ème}}$ paramètre de Lagrange s'annule jusqu'à ce que la $i^{\text{ème}}$ contrainte d'inégalité soit active en \mathbf{x}^* .

Conditions KKT (générales) : Si la propriété de dualité forte est vérifiée, la solution du problème primaire \mathbf{x}^* minimise $\mathcal{L}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\nu}^*)$. Le gradient de $\mathcal{L}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\nu}^*)$ doit donc s'annuler en \mathbf{x}^* et $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\nu}^*)$ vérifie le système d'équations suivant

$$\begin{aligned} \lambda_i f_i(\mathbf{x}^*) &= 0 \quad \text{avec} \quad \begin{cases} f_i(\mathbf{x}^*) \leq 0 \\ \lambda_i \geq 0 \end{cases}, & i = 1, \dots, m, \\ g_j(\mathbf{x}^*) &= 0, & j = 1, \dots, p, \\ \nabla \mathcal{L}(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\nu}^*) &= \nabla f_0(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla f_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{j=1}^p \nu_j^* \nabla g_j(\mathbf{x}^*) = 0, \end{aligned} \tag{B.14}$$

appelées conditions de Karush-Kuhn-Tucker (KKT). La réciproque peut être fautive pour les mêmes raisons que l'optimisation différentiable sans contrainte : un point critique de $\mathcal{L}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\nu}^*)$ peut être un optimum local (et non global) ou un point selle.

4. $\overset{\circ}{\mathcal{D}}$ désigne l'intérieur de l'ensemble \mathcal{D} .

Conditions KKT (cas convexe) : Pour un problème d'optimisation différentiable convexe vérifiant la propriété de dualité forte, si $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\nu}^*)$ vérifient les conditions KKT alors il est solution du problème du problème dual et du problème primaire.

À ce stade, la conclusion importante est que si le problème d'optimisation différentiable, convexe et qui vérifie la propriété de dualité forte est sans contrainte d'inégalité, alors il peut se réduire à la recherche du point critique du Lagrangien associé⁵. La recherche du point critique correspond à la recherche du zéro du gradient du Lagrangien, et peut être résolu avec la méthode de Newton (ou tout autre méthode de recherche de zéro), on parle alors de minimisation par la méthode de Newton.

B.4 Contraintes d'inégalités : méthodes de points intérieurs

Si le problème primaire contient des contraintes d'inégalités, le problème dual (ainsi que les conditions KKT) contient aussi des contraintes d'inégalités. Il faut donc trouver une méthode pour résoudre ces problèmes d'optimisation. C'est l'objet des méthodes de points intérieurs et des méthodes de points extérieurs. On discute uniquement d'une méthode de points intérieurs appelée méthode de la barrière. Dans cette partie, on considère un problème d'optimisation différentiable convexe où les fonctions f_0, \dots, f_m sont deux fois dérivables et qui vérifie la contrainte de qualification de Slater (i.e. il vérifie la propriété de dualité forte). L'idée de base est la pénalisation des contraintes : on remplace un problème avec contraintes d'inégalités par un problème sans contrainte d'inégalité dont la fonction d'objectif pénalise les points qui ne satisfont pas les contraintes d'inégalités. La première étape est de réécrire le problème d'optimisation sous la forme

$$\begin{aligned} \text{minimiser} \quad & f_0(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m I(f_i(\mathbf{x})) \\ \text{avec} \quad & g_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, p, \end{aligned}$$

où $I : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ est donné par

$$I(u) = \begin{cases} 0 & \text{si } u \leq 0 \\ \infty & \text{si } u > 0. \end{cases} \quad (\text{B.15})$$

Ainsi, si une contrainte d'inégalité n'est pas satisfaite, la fonction d'objectif est infinie, et n'est donc pas minimale. À l'inverse, si la contrainte est vérifiée, la maximisation est équivalente au problème initiale. Cependant, la fonction d'objectif de ce nouveau problème n'est pas différentiable et les méthodes basées sur la différentiabilité des fonctions d'objectif et de contraintes ne peuvent donc pas être appliquées.

5. Cela correspond à la méthode des multiplicateurs de Lagrange très utilisée en Physique et ailleurs. Comme en Mathématiques, la résolution des problèmes non-convexes est un sujet actif de recherche pour les applications en Physique, notamment dans les problèmes d'optimisation qui apparaissent en théorie des grandes déviations (voir par exemple [Touchette, 2009]). Dans ce contexte, l'inéquivalence entre la recherche des points critiques du Lagrangien et le problème primaire fournit l'explication de l'inéquivalence des ensembles en Physique Statistique. Le traitement de la non-convexité de la fonction d'objectif (qui est l'entropie dans ce contexte) permet alors d'expliquer les transitions de phase [Bouchet and Barré, 2005].

Barrière logarithmique : La méthode de la barrière consiste à approximer la fonction I par $I_t : \mathbb{R}_-^* \rightarrow \mathbb{R}$

$$I_t(u) = -\frac{1}{t} \ln(-u) \quad (\text{B.16})$$

où $t > 0$ est un paramètre qui fixe la précision de l'approximation. Contrairement à I , I_t est différentiable sur son domaine de définition. On obtient alors le problème d'optimisation

$$\begin{aligned} \text{minimiser} \quad & f_0(\mathbf{x}) - \frac{1}{t} \sum_{i=1}^m \ln(-f_i(\mathbf{x})) \\ \text{avec} \quad & g_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, p, \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

qui est une approximation du problème initial. Comme la somme de fonctions convexes est une fonction convexe, la fonction d'objectif de ce problème est convexe. On peut donc utiliser les outils d'optimisation différentiable convexe. La fonction $\phi(x) = -\sum_{i=1}^m \ln(-f_i(\mathbf{x}))$ est appelée barrière logarithmique. Son domaine de définition est l'ensemble des points qui satisfont strictement les contraintes d'inégalités (i.e. $\text{dom } \phi = \{\mathbf{x} \in \mathcal{D} \mid f_i(\mathbf{x}) < 0, i = 1, \dots, m\}$).

Chemin central : On note $\mathbf{x}^*(t)$ la solution du problème (B.17). Le chemin central associé au problème convexe (B.1) est l'ensemble $\{\mathbf{x}^*(t), t > 0\}$.

Théorème : Un point $\mathbf{x}^*(t)$ appartient au chemin central ssi $\mathbf{x}^*(t)$ satisfait :

$$f_i(\mathbf{x}^*(t)) < 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad (\text{B.18})$$

$$g_j(\mathbf{x}^*(t)) = 0, \quad j = 1, \dots, p, \quad (\text{B.19})$$

$$\exists \nu \in \mathbb{R}^p, \quad t \nabla f_0(\mathbf{x}^*(t)) + \nabla \phi(\mathbf{x}^*(t)) + \sum_{j=1}^p \nu_j \nabla g_j(\mathbf{x}^*(t)) = 0. \quad (\text{B.20})$$

On a également

$$f_0(\mathbf{x}^*(t)) - f^* \leq \frac{m}{t}, \quad (\text{B.21})$$

Ce théorème prouve que le chemin $\mathbf{x}^*(t)$ converge vers le point optimal \mathbf{x}^* lorsque $t \rightarrow \infty$, et donne la précision de l'approximation m/t . Cependant, la résolution directe de (B.17) pour $m/t \ll 1$ peut être lente. Un algorithme plus rapide consiste à résoudre itérativement des problèmes de la forme (B.17) par minimisation de Newton, en augmentant la valeur du paramètre t à chaque itération, et en initialisant la minimisation de Newton à la solution du problème précédent. Autrement dit, on calcule $\mathbf{x}^*(t)$ pour une série croissante $\{t_k, k = 0, \dots, k_{max}\}$, où $t_{k_{max}}$ est choisi pour atteindre la précision $\epsilon = m/t_{k_{max}}$. Cet algorithme de minimisation non contrainte séquentielle a été introduit par [Fiacco and McCormick, 1964], et est également appelée méthode de la barrière. Une version simple de l'algorithme est le suivant.

Algorithme de minimisation non contrainte séquentielle : Etant donné un point strictement faisable \mathbf{x}_0 , $t_0 > 0$, $\mu > 1$, une précision $\epsilon > 0$. On répète

1. On calcule $\mathbf{x}_k^* = \mathbf{x}^*(t_k)$ en minimisant $t_k f_0(\mathbf{x}) + \phi(\mathbf{x})$, avec $g_j(\mathbf{x}) = 0$, $j = 1, \dots, p$, en partant du point \mathbf{x}_{k-1} .
2. On s'arrête si $m/t_k < \epsilon$.

3. On incrémente $t_{k+1} = \mu t_k$.

Le choix de μ et t_0 ne sont pas critiques et influencent uniquement la vitesse de convergence. On peut également partir d'un point initial qui n'est pas strictement faisable en choisissant $\mathbf{x}_0 \in \{\text{dom } f_0 \mid f_i(\mathbf{x}_0) < 0, i = 1, \dots, m\}$ qui ne satisfait pas les contraintes d'égalités et en ajoutant une itération au début de l'algorithme pour chercher un point strictement faisable.

Si le problème n'est pas convexe, à chaque étape (pour chaque incrémentation de t mais aussi pour chaque itération de la méthode de Newton à t fixé), on linéarise les contraintes d'égalités et on quadratise la fonction d'objectif f_0 et les contraintes d'inégalités f_1, \dots, f_m autour de \mathbf{x}_{k-1}^* .

B.5 Application aux problèmes MEP

Pour les problèmes MEP tels que celui décrit au chapitre 3, on applique la démarche suivante :

1. On met le problème sous la forme (B.1) en concaténant toutes les variables (températures et flux d'énergie) dans un vecteur \mathbf{x} et en réexprimant la production d'entropie (qui est la fonction d'objectif) et les contraintes en fonction de \mathbf{x} .
2. On utilise l'algorithme de minimisation non contrainte séquentielle décrit précédemment pour résoudre le problème MEP. Cette approche est empirique, car la production d'entropie et les fonctions de contraintes ne sont pas forcément convexes.
3. L'algorithme peut être répété avec des conditions initiales différentes (choisies aléatoirement par exemple) pour voir si les chemins centraux convergent vers la même solution. Si ce n'est pas le cas, le problème est non-convexe et on peut sélectionner le maximum des maximums locaux obtenus. Dans le cas contraire, cette démarche permet de se rassurer sur la convexité du problème dans un domaine. Mais en aucun cas, cette méthode ne peut être vue comme une preuve de la convexité, ni de la convergence vers le maximum globale.

Pour tous les problèmes étudiés, les algorithmes convergent vers au moins une solution. La méthode de résolution a été implémentée en langage C++ par Didier Paillard pour le modèle du chapitre 3. S'agissant d'une approche standard, on peut aussi utiliser les packages des langages de programmation comme Python. Utiliser ce type d'outils facilite la construction des modèles basés sur l'hypothèse MEP.

L'optimisation non-convexe est encore un sujet actif de recherche, il peut exister des méthodes plus adaptées dont l'auteur n'a pas connaissance. La recherche d'algorithmes plus pertinents pourrait faire l'objet de développements techniques ultérieures. À noter que certains problèmes non-convexes peuvent se ramener à des problèmes convexes par des changements de variables et des transformations de la fonction d'objectif et des fonctions de contraintes appropriés.

Annexe C

Gas sur réseaux

Cette annexe a pour but de fournir les notions utiles sur les gaz sur réseaux : la structure de ces modèles, la dynamique microscopique, l'état d'équilibre macroscopique et la dérivation des équations d'évolution des observables à l'échelle macroscopique. Elle a été rédigée en s'appuyant sur les livres [Rivet and Boon, 2005] et [A Wolf-Gladrow, 2000]. Certaines notions introduites ici sont des détails techniques qui ne sont pas nécessaires pour comprendre l'étude du modèle du chapitre 6. Ces détails pourraient cependant être utiles pour l'étude du problème de modélisation sous-maille sur d'autres gaz sur réseaux.

C.1 Introduction

Présentation

Le principe d'un automate cellulaire [Wolfram, 1984, Kutrib et al., 1997] est de simuler le comportement microscopique des constituants d'un système de façon simplifiée pour observer le comportement à l'échelle macroscopique¹. Les gaz sur réseaux correspondent à l'application de cette méthode à la simulation de fluides (gaz ou liquide) : on modélise simplement et on simule le comportement des constituants élémentaires (i.e. les particules) pour représenter le comportement du fluide. Ici, on voit les gaz sur réseaux simplement comme des modèles conceptuels sur lesquels tester des idées de modélisation sous-maille.

Un automate cellulaire doit vérifier trois propriétés pour simuler un système physique de façon réaliste [A Wolf-Gladrow, 2000] :

- Conserver certaines quantités : les invariants dynamiques ;
- Transporter ces mêmes quantités ;
- La dynamique microscopique doit être réversible si la dynamique microscopique du système réel l'est.

On utilise des modèles microscopiques qui ont des structures périodiques et symétriques : les réseaux cristallographiques. La dynamique microscopique est décomposée en deux opérations : la collision et la propagation. Des règles spéciales peuvent être appliquées pour représenter des conditions aux limites, ou pour simuler un champ de force. Un gaz sur réseau peut être vu comme

1. On parle d'approche "bottom-up" car on modélise le système à l'échelle microscopique pour simuler son comportement macroscopique. À l'inverse, les simulations numériques basées sur la discrétisation d'équations aux dérivées partielles sont qualifiées de "top-down" car on part d'une modélisation du système à l'échelle macroscopique puis on décompose le système en un grand nombre d'unités microscopiques.

une version discrète (en espace, en temps, en vitesse, et en nombre de particules) de la dynamique des gaz [Ernst and Das, 1992].

Définitions

Réseau cristallographique (ou réseau de Bravais) : C'est un réseau infini de points générés par un ensemble fini de translations. Le groupe d'invariance global du réseau cristallographique est l'ensemble des isométries (translations, rotations et réflexions) qui laissent le réseau globalement invariant. On peut énumérer et classer tous les réseaux cristallographiques pour une dimension donnée par rapport à leurs groupes de symétrie à l'aide de la théorie des groupes.

Gaz sur réseau : Système composé de trois éléments distincts et essentiels :

1. Un réseau cristallographique à D dimensions \mathcal{L} (figure C.1 (a)). Les nœuds sont repérés par leur positions discrète \mathbf{r}_* (l'indice $*$ indique qu'il s'agit d'une variable discrète). En pratique, le réseau n'est pas infini et ce n'est donc pas réellement un réseau cristallographique. Cependant, on considère qu'il est infini pour la dérivation théorique de la dynamique macroscopique. On note \mathcal{N} le nombre de noeuds du réseau.
2. Une structure locale : à chaque nœud correspond b cellules qui peuvent être occupées par une particule ou non (occupation Booléenne). L'état Booléen de la cellule i est noté $s_i = 0, 1$. À la cellule i est associée la vitesse \mathbf{c}_i et éventuellement d'autres propriétés comme la masse, la nature chimique, ...² (figure C.1 (b))
 - (a) $s = \{s_i, i = 1, \dots, b\}$ correspond à un état local (i.e. du noeud)³ et γ est l'ensemble des 2^b états locaux possibles, appelé espace des phases local.
 - (b) $S = \{s_i(\mathbf{r}_*), i = 1, \dots, b, \mathbf{r}_* \in \mathcal{L}\}$ correspond à un état global (i.e. du réseau) et Γ est l'ensemble des $2^{b\mathcal{N}}$ états globaux possibles, appelé espace des phases global.

L'ensemble des vecteurs vitesses $\{\mathbf{c}_i, i = 1, \dots, b\}$ doit vérifier les conditions suivantes :

- (a) Il est invariant sous l'action du groupe de symétrie ponctuelle du réseau cristallographique (i.e. les rotations et les symétries).
 - (b) C'est une famille génératrice du réseau cristallographique. Ainsi, les vitesses correspondent à des liens vers des noeuds voisins.
3. Une dynamique (microscopique) discrète : les pas de temps t_* sont régulièrement espacés et séparés par un incrément qui est fixé à 1. On note $n_i(\mathbf{r}_*, t_*)$ l'occupation de la cellule i au noeud \mathbf{r}_* à l'instant t_* . À chaque pas de temps, on décompose l'évolution en deux opérations (figure C.1 (c)) :
 - (a) La **collision** : l'état local est changé selon des règles locales (i.e. qui ne dépendent que de l'état du noeud et pas des états des noeuds voisins) qui changent les vitesses et autres propriétés des particules. L'état après collision s' dépend de son état avant collision s et éventuellement d'un nombre fini de variables aléatoires de Bernoulli indépendantes $\eta_{s's}$ de moyennes $A_{s's}$.
 - i. $A_{s's} \forall (s, s') \in \gamma^2$ sont les probabilités de transitions (ou probabilités de collisions).

2. Voir par exemple [Schaffnerberger et al., 2001] pour un modèle à 3 températures utilisé pour simuler la convection.

3. On compte aussi parfois de 0 à $b - 1$

ii. Cela permet d'introduire l'opération de collision qui agit localement

$$\begin{aligned} \mathcal{C} : \Gamma &\rightarrow \Gamma \\ n &\rightarrow n' \\ \text{tel que } n'_i &= \sum_{(s,s') \in \gamma^2} s'_i \eta_{s's} \prod_{j=1}^b n_j^{s_j} (1 - n_j)^{(1-s_j)} \end{aligned}$$

mais qui peut dépendre de la position et du temps (pour représenter les conditions aux limites ou un forçage). Pour chaque état avant collision, l'opérateur de collision sélectionne un seul état après la collision. Cette propriété s'écrit :

$$\sum_{s' \in \gamma} \eta_{s's} = 1 \quad \forall s \in \gamma. \quad (\text{C.1})$$

Dans la définition de l'opérateur de collision et dans la suite, on omettra le temps et la position du noeud (\mathbf{r}_*, t_*) pour alléger les notations.

(b) La **propagation** : l'occupation $n'_i(\mathbf{r}_*)$ est propagée à la cellule i du noeud $\mathbf{r}_* + \mathbf{c}_i$ (i.e. la particule se déplace selon sa vitesse). On définit l'opérateur de propagation

$$\begin{aligned} \mathcal{S} : \Gamma &\rightarrow \Gamma \\ n &\rightarrow n' \\ \text{tel que } n'_i(\mathbf{r}_*) &= n_i(\mathbf{r}_* - \mathbf{c}_i) \end{aligned}$$

L'opérateur d'évolution est la composition des opérateurs de collision et de propagation :

$$\begin{aligned} \mathcal{E} : \Gamma &\rightarrow \Gamma \\ n &\rightarrow n' = \mathcal{S} \circ \mathcal{C} n. \end{aligned}$$

L'évolution du gaz sur réseau est donnée par $n(t_* + 1) = \mathcal{E} n(t_*)$. Elle est représentée comme une collision suivie d'une propagation pour simplifier l'écriture de la dynamique microscopique.

Observables

Observables microscopiques : Une observable q est définie comme un ensemble de b valeurs $q = \{q_i, i = 1, \dots, b\}$ où q_i est la valeur de l'observable q d'une particule occupant la cellule i . On définit la densité microscopique de l'observable q

$$n_{q*}(\mathbf{r}_*, t_*) = \sum_{i=1}^b q_i n_i(\mathbf{r}_*, t_*),$$

et le flux microscopique associé

$$\mathbf{j}_{q*}(\mathbf{r}_*, t_*) = \sum_{i=1}^b q_i \mathbf{c}_i n_i(\mathbf{r}_*, t_*)$$

On notera les observables microscopiques avec un indice *, excepté pour l'occupation n afin de ne pas alourdir les notations. Les observables les plus utilisées sont les premiers moments de la distribution des vitesses. Elles sont rappelées au tableau C.1.

FIGURE C.1 – Illustration des trois composantes des gaz sur réseau à $D = 2$ dimensions. (a) Exemples des deux réseaux cristallographiques possibles : le réseau hexagonal et le réseau carré. (b) Pour un réseau cristallographique donné, on peut considérer différentes structures locales possibles. Le premier exemple correspond à un modèle à 4 vitesses avec une cellule par vitesse. Le second exemple est un modèle à 9 vitesses. (c) Pour un même réseau et la même structure locale, on peut considérer différentes règles de collisions. On représente une règle de collision possible pour le modèle du réseau carré à 4 vitesses qui correspond à celle utilisée dans le premier modèle de gaz sur réseaux 2D [Hardy et al., 1973, Hardy et al., 1976]. Contrairement aux collisions, la propagation est complètement déterminée par l'ensemble des vitesses.

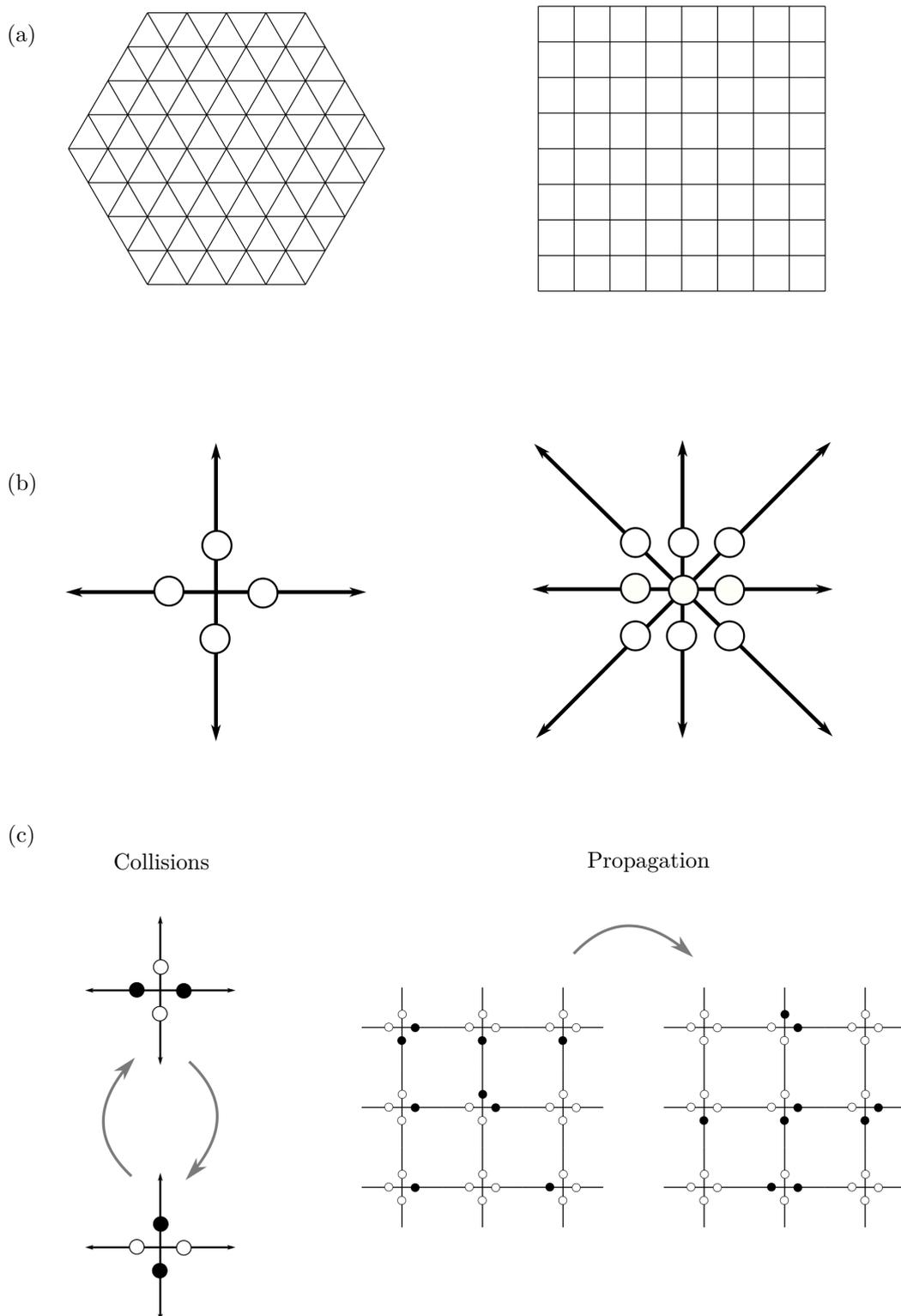


TABLE C.1 – Observables généralement utilisées dans l'étude des gaz sur réseaux.

Observable q	q_i	densité microscopique	flux microscopique
Particules	1	$\sum_{i=1}^b n_i$	$\sum_{i=1}^b \mathbf{c}_i n_i$
Masse	m_i	$\sum_{i=1}^b m_i n_i$	$\sum_{i=1}^b m_i \mathbf{c}_i n_i$
Impulsion selon α	$m_i c_{i\alpha}$	$\sum_{i=1}^b m_i c_{i\alpha} n_i$	$\sum_{i=1}^b m_i c_{i\alpha} \mathbf{c}_i n_i$
Énergie	$\frac{1}{2} m_i \mathbf{c}_i^2$	$\sum_{i=1}^b \frac{1}{2} m_i \mathbf{c}_i^2 n_i$	$\sum_{i=1}^b \frac{1}{2} m_i \mathbf{c}_i^2 \mathbf{c}_i n_i$

Observables coarse-grainées : Une moyenne sur plusieurs pas de temps et/ou plusieurs noeuds donne la densité coarse-grainée

$$n_{q\tau}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{|\mathcal{M}(\mathbf{r}, t)|} \sum_{(\mathbf{r}_*, t_*) \in \mathcal{M}(\mathbf{r}, t)} \sum_{i=1}^b q_i n_i(\mathbf{r}_*, t_*),$$

et le flux coarse-grainé associé

$$\mathbf{j}_{q\tau}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{|\mathcal{M}(\mathbf{r}, t)|} \sum_{(\mathbf{r}_*, t_*) \in \mathcal{M}(\mathbf{r}, t)} \sum_{i=1}^b q_i \mathbf{c}_i n_i(\mathbf{r}_*, t_*),$$

où $\mathcal{M}(\mathbf{r}, t)$ est l'ensemble des noeuds et des pas de temps sur lesquels l'observable est moyennée et (\mathbf{r}, t) correspond à la position de $\mathcal{M}(\mathbf{r}, t)$. On notera les observables coarse-grainées avec un indice τ qui sera la taille caractéristique de $\mathcal{M}(\mathbf{r}, t)$.

Observables moyennes : Une moyenne sur plusieurs expériences indépendantes donne la densité moyenne

$$N_q(\mathbf{r}_*, t_*) = \sum_{i=1}^b q_i N_i(\mathbf{r}_*, t_*),$$

et le flux moyen associé

$$\mathbf{J}_q(\mathbf{r}_*, t_*) = \sum_{i=1}^b q_i \mathbf{c}_i N_i(\mathbf{r}_*, t_*),$$

où $N_i(\mathbf{r}_*, t_*) = \langle n_i(\mathbf{r}_*, t_*) \rangle$ est l'occupation moyenne et $\langle \cdot \rangle$ représente la moyenne d'ensemble. On notera les densités et flux moyens en majuscule et sans indice.

C.2 La dynamique microscopique

Comme pour tout système, les propriétés microscopiques d'un gaz sur réseau ont une influence sur son comportement à l'échelle macroscopique. Il est donc nécessaire de construire un modèle qui respecte certaines caractéristiques pour retrouver un comportement réaliste à grande échelle.

L'équation d'évolution microscopique

L'équation d'évolution de l'occupation microscopique s'écrit

$$\begin{aligned} n_i(\mathbf{r}_* + \mathbf{c}_i, t_* + 1) &= \sum_{(s,s') \in \gamma^2} s'_i \eta_{s's} \prod_{j=1}^b n_j^{s_j} (1 - n_j)^{(1-s_j)} \\ &= n_i(\mathbf{r}_*, t_*) + \sum_{(s,s') \in \gamma^2} (s'_i - s_i) \eta_{s's} \prod_{j=1}^b n_j^{s_j} (1 - n_j)^{(1-s_j)}. \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

La seconde expression permet d'identifier le changement net de l'occupation dû à la collision. L'équation (C.2) est exacte et constitue le point de départ des développements théoriques.

Propriétés importantes

On peut distinguer deux types de propriétés : celles utilisées pour prouver l'existence de l'état d'équilibre macroscopique et pour la dérivation des équations d'évolution des variables macroscopiques, et celles utilisées pour que les équations d'évolution des variables macroscopiques respectent certaines propriétés physiques. Les propriétés du second type ne sont pas utilisées dans cette thèse et sont rappelées à titre informatif.

Propriétés importantes pour la dérivation des équations d'évolutions des variables macroscopiques

Microréversibilité : L'opération de collision est *micro-reversible* ssi toute collision a la même probabilité de transition que la collision inverse :

$$A_{s's} = A_{ss'} \quad (s, s') \in \gamma^2. \quad (\text{C.3})$$

Cette condition est appelée condition de bilan détaillé. Une condition plus faible :

$$\sum_{s \in \gamma} A_{s's} = \sum_{s \in \gamma} A_{ss'} = 1 \quad s' \in \gamma, \quad (\text{C.4})$$

appelée bilan semi-détaillé, signifie que l'effet global des collisions est réversible alors que toutes les collisions ne le sont pas ((C.3) \Rightarrow (C.4) mais la réciproque est fausse).

Lois de conservation : Différentes quantités sont conservées à chaque collision, on parle d'invariants de collision. L'observable q est un invariant de collision ssi

$$\sum_{i=1}^b q_i (s'_i - s_i) \eta_{s's} = 0, \quad (s, s') \in \gamma^2, \quad (\text{C.5})$$

c'est-à-dire que aucune des collisions ne modifie sa valeur locale. Pour tout invariant de collision q , on a l'équation de conservation locale

$$\sum_{i=1}^b q_i n_i(\mathbf{r}_* + \mathbf{c}_i, t_* + 1) = \sum_{i=1}^b q_i n_i(\mathbf{r}_*, t_*). \quad (\text{C.6})$$

Dualité : Un gaz sur réseau est dual si la dynamique des trous est la même que celle des particules. L'opération de propagation est duale, mais la collision l'est ssi

$$\eta_{s's} = \eta_{\bar{s}'\bar{s}}, \quad (s, s') \in \gamma^2, \quad (\text{C.7})$$

où \bar{s} représente l'état dual de s qui est obtenu en inversant l'occupation des cellules ($\bar{s}_i = 1 - s_i, i = 1, \dots, b$).

Propriétés importantes pour obtenir une évolution des variables macroscopiques réaliste, et pour faciliter les calculs

G-invariance : Un gaz sur réseau est G-invariant si sa structure locale (propagation, collisions et observables) a les mêmes symétries que le réseau cristallographique sur lequel il repose. Pour toute isométrie g du groupe de symétrie local G (rotations et symétries) du réseau cristallographique, il existe un unique indice de permutation g qui agit sur $\{1, \dots, b\}$ tel que :

1. L'ensemble des vitesses $\mathbf{c}_i, i = 1, \dots, b$ vérifie

$$g(\mathbf{c}_i) = \mathbf{c}_{g(i)}, \quad i = 1, \dots, b; \quad (\text{C.8})$$

2. Tout invariant de collision q vérifie

$$g(q_i) = q_{g(i)}, \quad i = 1, \dots, b; \quad (\text{C.9})$$

3. La matrice de collision vérifie

$$A_{\mathcal{G}(s')\mathcal{G}(s)} = A_{s's}, \quad (s, s') \in \gamma^2 \quad (\text{C.10})$$

où

$$\mathcal{G}(s)_i = s_{g(i)}, \quad s \in \gamma, i = 1, \dots, b, \quad (\text{C.11})$$

est l'action de la permutation sur l'espace des phases local γ .

Pour un modèle G-invariant, on peut définir une relation d'équivalence entre les cellules. On dit que les cellules i et j sont équivalentes ssi $\exists g \in G, j = g(i)$. Cette relation d'équivalence mène à la classification des cellules. Dans beaucoup de modèles, les classes correspondent aux différents modules des vitesses.

Isotropie d'un gaz sur réseau : On définit le tenseur de vitesse d'ordre n du gaz sur réseau par

$$L_{\alpha_1 \dots \alpha_n} = \sum_{i=1}^b c_{i\alpha_1} \dots c_{i\alpha_n}. \quad (\text{C.12})$$

Un tenseur $T_{\alpha_1 \dots \alpha_n}$ d'ordre n définie dans un espace Euclidien à D dimensions est dit isotrope ssi il est invariant sous n'importe quelle transformation orthogonale O (rotations et réflexions, qui vérifient $O \cdot O^T = \mathbb{I}$) (voir section 3.3 de [A Wolf-Gladrow, 2000]) :

$$T_{\alpha_1 \dots \alpha_n} = O_{\alpha_1 \beta_1} \dots O_{\alpha_n \beta_n} T_{\beta_1 \dots \beta_n}. \quad (\text{C.13})$$

On a les propriétés suivantes :

1. Tous les tenseurs d'ordre 0 (i.e. les scalaires) sont isotropes.
2. Il n'y a pas de tenseur d'ordre 1 (i.e. un vecteur) qui soit isotrope.
3. Tout tenseur isotrope d'ordre 2 est proportionnel à $\delta_{\alpha_1 \alpha_2}$

4. Tout tenseur isotrope d'ordre 3 est proportionnel au tenseur antisymétrique (de Levy-Civita) $\epsilon_{\alpha_1\alpha_2\alpha_3}$
5. Tout tenseur isotrope d'ordre 4 est une combinaison linéaire de $\delta_{\alpha_1\alpha_2}\delta_{\alpha_3\alpha_4}$, $\delta_{\alpha_1\alpha_3}\delta_{\alpha_2\alpha_4}$ et $\delta_{\alpha_1\alpha_4}\delta_{\alpha_2\alpha_3}$
6. Tout tenseur isotrope d'ordre $n \geq 4$ est une somme de produits de tenseurs δ quand n est paire, ou de produits de tenseurs δ et de tenseurs ϵ quand n est impaire.

On dit qu'un gaz sur réseau est isotrope d'ordre n ssi tous ses tenseurs de vitesse d'ordres $\leq n$ sont isotropes.

Irreductibilité : On note G_i le sous-groupe des isométries du réseau cristallographique (rotations et symétries) qui laissent \mathbf{c}_i invariant. Un gaz sur réseau est irréductible ssi pour toute cellule i , tout vecteur invariant sous l'effet de G_i est proportionnel à \mathbf{c}_i . Cette condition technique est utilisée pour simplifier les calculs qui surviennent dans la dérivation des équations de la dynamique macroscopique.

Conditions aux limites et forçage

Les conditions aux limites : On distingue différentes règles de collision pour représenter les conditions aux limites :

- Les conditions aux limites périodiques ;
- Les conditions inflow/outflow pour lesquelles on introduit/retire des particules ;
- Les conditions de réflexion aux bords des obstacles. Il en existe plusieurs :
 - Réflexion rebond : on renverse la vitesse des particules. Au niveau macroscopique, on obtient une condition de non-glissement (la vitesse moyenne au niveau de la paroi est nulle).
 - Réflexion spéculaire : les particules rebondissent de façon élastique sur la paroi (seule la composante normale à la paroi est renversée). Cette opération requiert de définir l'orientation de la surface ce qui n'est pas évident pour les gaz sur réseaux où les surfaces ne sont pas lisses. Au niveau macroscopique, on obtient une condition de glissement (la vitesse orthogonale à la paroi est nulle, mais pas la vitesse parallèle).
 - Réflexion diffuse : combinaison des réflexions rebond et spéculaire, avec des poids ajustables.

Les forçages : On peut représenter un forçage (en masse, impulsion, énergie, ou autre quantité) en appliquant une combinaison d'un opérateur de collision classique et d'un opérateur qui ajoute ou retire la quantité considérée. On ajuste les collisions et les poids statistiques de chacun des opérateurs de façon à retrouver le forçage désiré (voir annexe D de [Frisch et al., 1987]).

C.3 Etat d'équilibre macroscopique

La description de Liouville

Un état global $S = \{s_i(\mathbf{r}_*), i = 1, \dots, b, \mathbf{r}_* \in \mathcal{L}\}$ correspond à un micro-état (i.e. une description complète du système à l'échelle microscopique). On introduit une moyenne sur les états microscopiques. Pour les développements théoriques, on considère une moyenne d'ensemble. En pratique, on utilise plus souvent une moyenne spatio-temporelle (i.e. un coarse-graining) qu'une moyenne

d'ensemble (i.e. sur plusieurs réalisations). On note la distribution de probabilité dans l'espace des micro-états

$$\begin{aligned} \mathcal{P} : \Gamma \times \mathbb{N} &\rightarrow [0, 1] \\ (S, t_*) &\rightarrow \mathcal{P}(S, t_*), \\ \text{telle que } \sum_{S \in \Gamma} \mathcal{P}(S, t_*) &= 1, \quad \forall t_* \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

On définit la moyenne d'ensemble d'une observable $q(S, t_*)$ au temps t_* par

$$\langle q(S, t_*) \rangle = \sum_{S \in \Gamma} q(S, t_*) \mathcal{P}(S, t_*). \quad (\text{C.14})$$

En particulier, l'occupation moyenne de la cellule i au nœud \mathbf{r}_* et au temps t_* est

$$N_i(\mathbf{r}_*, t_*) = \langle n_i(\mathbf{r}_*, t_*) \rangle = \sum_{S \in \Gamma} s_i(\mathbf{r}_*) \mathcal{P}(S, t_*), \quad (\text{C.15})$$

et la densité et le flux de particules sont

$$\rho = \sum_{i=1}^b N_i \quad \text{et} \quad \mathbf{J} = \sum_{i=1}^b N_i \mathbf{c}_i. \quad (\text{C.16})$$

Un ensemble de valeurs moyennes d'observables constitue un état macroscopique.

L'approximation de Boltzmann et le théorème H

Approximation de Boltzmann : $N_i(\mathbf{r}_*, t_*)$ joue le même rôle que la distribution à une particule $f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)$ en théorie cinétique des gaz. On utilise l'approximation de Boltzmann (ou hypothèse de chaos moléculaire), qui consiste à négliger les corrélations entre particules avant la collision. Cette hypothèse correspond à une approximation de champ moyen.

En faisant la moyenne d'ensemble de l'équation (C.2), on obtient l'équation d'évolution pour l'occupation moyenne

$$N_i(\mathbf{r}_* + \mathbf{c}_i, t_* + 1) - N_i(\mathbf{r}_*, t_*) = \sum_{(s, s') \in \gamma^2} (s'_i - s_i) A_{s's} \left\langle \prod_{j=1}^b n_j^{s_j} (1 - n_j)^{(1-s_j)} \right\rangle, \quad (\text{C.17})$$

Dans l'approximation de Boltzmann, on obtient l'équation de Boltzmann pour le gaz sur réseau

$$N_i(\mathbf{r}_* + \mathbf{c}_i, t_* + 1) - N_i(\mathbf{r}_*, t_*) = \sum_{(s, s') \in \gamma^2} (s'_i - s_i) A_{s's} \prod_{j=1}^b N_j^{s_j} (1 - N_j)^{(1-s_j)}. \quad (\text{C.18})$$

Le terme de gauche correspond à une différence finie qui joue un rôle analogue à la différentielle de la fonction de distribution en théorie cinétique des gaz, et le terme de droite est l'équivalent de l'intégrale de collision (et éventuellement le terme de forçage).

Le manque d'information sur l'état local avant la collision du nœud \mathbf{r}_* au temps t_* est donné par l'entropie locale

$$S[p] = - \sum_{s \in \gamma} p(s) \ln p(s), \quad (\text{C.19})$$

où p est la distribution de probabilité locale avant la collision. De la même manière, on définit l'entropie après la collision

$$S[p'] \quad \text{avec} \quad p'(s') = \sum_{s \in \gamma} A_{s's} p(s), \quad s' \in \gamma. \quad (\text{C.20})$$

où p' est la distribution de probabilité locale après la collision. Si l'opérateur de collision satisfait la propriété de bilan semi-détaillé (C.4), alors on peut montrer que l'entropie croît sous l'effet des collisions (voir par exemple l'annexe F de [Frisch et al., 1987])

$$S[p] = - \sum_s p(s) \ln p(s) \leq S[p'] = - \sum_{s'} p'(s') \ln p'(s'). \quad (\text{C.21})$$

On a également

$$S[p] = - \sum_s p(s) \ln p(s) \leq - \sum_{i=1}^b N_i \ln N_i + (1 - N_i) \ln(1 - N_i), \quad (\text{C.22})$$

L'égalité est atteinte ssi l'approximation de Boltzmann est vérifiée, i.e.

$$p(s) = \prod_{i=1}^b N_i^{s_i} (1 - N_i)^{(1-s_i)}. \quad (\text{C.23})$$

Théorème H local : Sous l'approximation de Boltzmann et si l'opérateur de collision satisfait le bilan semi-détaillé, alors l'entropie locale

$$S(\mathbf{r}_*, t_*) = - \sum_{i=1}^b \{N_i \ln N_i + (1 - N_i) \ln(1 - N_i)\} \quad (\text{C.24})$$

ne peut pas décroître sous l'effet des collisions.

Théorème H global : Sous l'approximation de Boltzmann et si l'opérateur de collision satisfait le bilan semi-détaillé, alors l'entropie globale

$$S(t_*) = - \sum_{\mathbf{r}_* \in \mathcal{L}} \sum_{i=1}^b \{N_i \ln N_i + (1 - N_i) \ln(1 - N_i)\} \quad (\text{C.25})$$

ne peut pas décroître au cours de l'évolution, au moins pour un réseau périodique ou infini⁴.

L'état d'équilibre macroscopique

On cherche la distribution d'équilibre (i.e. correspondant à un état macroscopique) dans l'approximation Boltzmann. Cette distribution est complètement déterminée par l'occupation moyenne

4. En pratique, la production d'entropie globale tend à augmenter mais peut fluctuer à cause de la violation de l'approximation de Boltzmann (i.e. pas de décorrélation parfaite entre les particules avant la collision).

des cellules ($N_i, i = 1, \dots, b$). Une façon de déterminer la distribution d'équilibre est de chercher la solution homogène de l'équation de Boltzmann (C.18), on obtient alors les b équations

$$\sum_{(s,s') \in \gamma^2} (s'_i - s_i) A_{s's} \prod_{j=1}^b N_j^{s_j} (1 - N_j)^{(1-s_j)} = 0, \quad i = 1, \dots, b. \quad (\text{C.26})$$

Il a été montré (voir le chapitre 4 de [Rivet and Boon, 2005] ou annexe C de [Frisch et al., 1987]) que si le bilan semi-détaillé est vérifié, alors les équations précédentes deviennent

$$\sum_{(s,s') \in \gamma^2} (s'_i - s_i) A_{s's} \prod_{j=1}^b N_j^{s_j} (1 - N_j)^{(1-s_j)} = 0 \quad i = 1, \dots, b, \quad (\text{C.27})$$

$$\Leftrightarrow \sum_{i=1}^b \ln \left(\frac{N_i}{1 - N_i} \right) (s'_i - s_i) A_{s's} = 0, \quad s, s' \in \gamma. \quad (\text{C.28})$$

Ces dernières équations signifient que $q = \left\{ q_i = \ln \left(\frac{N_i}{1 - N_i} \right), i = 1, \dots, b \right\}$ est un invariant de collision. Si on considère une base $\{q^{[\kappa]}, \kappa = 1, \dots, \delta\}$ de l'espace vectoriel des invariants de collision, tout invariant de collision est alors une combinaison linéaire des $q^{[\kappa]}$ et on a

$$\ln \left(\frac{N_i}{1 - N_i} \right) = - \sum_{\kappa=1}^{\delta} \lambda^{[\kappa]} q_i^{[\kappa]}, \quad i = 1, \dots, b, \quad (\text{C.29})$$

$$\Leftrightarrow N_i = N_i^{(eq)} \equiv \frac{1}{1 + \exp \left(\sum_{\kappa=1}^{\delta} \lambda^{[\kappa]} q_i^{[\kappa]} \right)}, \quad i = 1, \dots, b. \quad (\text{C.30})$$

Il s'agit de la distribution de Fermi-Dirac. Cette équation constitue un résultat important, car elle permet de formuler le théorème suivant.

Théorème d'universalité des gaz sur réseaux : La distribution d'équilibre d'un gaz sur réseau qui satisfait le bilan semi-détaillé dans l'approximation de Boltzmann ne dépend que de ses $0 < \delta < b$ invariants de collisions.

L'expansion de l'équilibre macroscopique On peut exprimer la distribution d'équilibre en fonction des densités macroscopiques des invariants de collision si on sait inverser la relation

$$\rho^{[\kappa]} \equiv \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} N_i^{eq} = \sum_{i=1}^b \frac{q_i^{[\kappa]}}{1 + \exp \left(\sum_{\kappa=1}^{\delta} \lambda^{[\kappa]} q_i^{[\kappa]} \right)}, \quad \kappa = 1, \dots, \delta. \quad (\text{C.31})$$

Dans le cas général, on peut seulement obtenir une approximation de la solution par la méthode des perturbations. Si on a une solution exacte ($\lambda_{(0)}^{[\kappa]}, \kappa = 1, \dots, \delta$) pour une valeur particulière des densités macroscopiques ($\rho_{(0)}^{[\kappa]}, \kappa = 1, \dots, \delta$), alors on peut faire une expansion pour trouver une solution approchée de ($\lambda^{[\kappa]}, \kappa = 1, \dots, \delta$), qui correspond à ($\rho^{[\kappa]}, \kappa = 1, \dots, \delta$) proche de ($\rho_{(0)}^{[\kappa]}, \kappa = 1, \dots, \delta$). On considère une petite perturbation des densités macroscopiques telle que

$$\rho^{[\kappa]} = \rho_{(0)}^{[\kappa]} + \epsilon \rho_{(1)}^{[\kappa]} + \epsilon^2 \rho_{(2)}^{[\kappa]} + O(\epsilon^3), \quad \kappa = 1, \dots, \delta \quad (\text{C.32})$$

où ϵ est un petit paramètre (généralement le nombre de Knudsen du gaz sur réseau). On regarde les corrections au second ordre en ϵ , ce qui est suffisant pour le régime hydrodynamique

$$\lambda^{[\kappa]} = \lambda_{(0)}^{[\kappa]} + \epsilon \lambda_{(1)}^{[\kappa]} + \epsilon^2 \lambda_{(2)}^{[\kappa]} + O(\epsilon^3), \quad \kappa = 1, \dots, \delta. \quad (\text{C.33})$$

Le point important est que, à la fin de cette étape, on obtient une approximation de la distribution d'équilibre qui est une fonction des densités des invariants de collision uniquement. On note

$$N_i^{(eq)} = N_i^{(0)} \left(\rho^{[\kappa]} \right) + O(\epsilon^3). \quad (\text{C.34})$$

C.4 La dynamique macroscopique

On considère un gaz sur réseau avec δ invariants de collision $\{q^{[\kappa]}, \kappa = 1, \dots, \delta\}$, qui satisfait la condition de bilan semi-détaillé dans l'approximation de Boltzmann. On est intéressé par l'évolution des densités des variables macroscopiques dans la limite hydrodynamique, i.e. un macroétat pour lequel les variables macroscopiques varient sur des échelles de temps et d'espace bien plus grandes que les échelles microscopiques du gaz sur réseau.

L'expansion multi-échelle

L'équilibre local et la limite hydrodynamique : La dérivation des équations de la dynamique macroscopique repose sur l'hypothèse d'équilibre local et la limite hydrodynamique. Les densités sont δ fonctions $\rho^{[\kappa]}(\mathbf{r}_*, t_*)$ qui varient lentement d'un nœud à l'autre et à chaque pas de temps. La limite hydrodynamique correspond au cas où on a une séparation d'échelle nette entre les échelles microscopiques et macroscopiques. On introduit le nombre de Knudsen du gaz sur réseau

$$\epsilon = \frac{c}{L}, \quad (\text{C.35})$$

où L est la taille typique du réseau et c la distance entre deux nœuds du réseau. La limite hydrodynamique s'écrit formellement $\epsilon \ll 1$.

L'expansion multi-échelle : L'expansion multi-échelle est une méthode employée pour obtenir un problème approché lorsque différentes échelles de temps et d'espace interviennent dans un problème. On considère une petite perturbation de l'occupation moyenne N_i :

$$N_i = N_i^{(0)} + \epsilon N_i^{(1)} + \epsilon^2 N_i^{(2)} + O(\epsilon^3). \quad (\text{C.36})$$

telle que les densités moyennes ne soient pas impactés, i.e

$$\sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} N_i^{(1)} = 0, \quad \kappa = 1, \dots, \delta, \quad (\text{C.37})$$

$$\sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} N_i^{(2)} = 0, \quad \kappa = 1, \dots, \delta, \quad (\text{C.38})$$

(mais les flux peuvent l'être). On introduit la variable d'espace

$$\mathbf{r} = \epsilon \mathbf{r}_* \quad (\text{C.39})$$

qui est supposée être une variable continue dans la limite hydrodynamique.

Pour des densités qui varient sur une longueur de l'ordre de la taille du réseau, différents types de processus interviennent : la relaxation microscopique due aux collisions qui intervient sur un temps $\epsilon^0 = 1$, l'advection et les ondes sonores qui interviennent sur un temps ϵ^{-1} , et la diffusion qui intervient sur un temps ϵ^{-2} . On anticipe que le comportement macroscopique du gaz sur réseau aura donc ce type de comportement et on introduit des variables de temps auxiliaires t_0 , t_1 et t_2 telles que

$$t_* \equiv t_0 + t_1 \epsilon^{-1} + t_2 \epsilon^{-2} \equiv t \epsilon^{-1}, \quad (\text{C.40})$$

où t , t_1 et t_2 sont supposées être des variables continues dans la limite hydrodynamique. Cette décomposition permet de représenter facilement les variations de temps aux différentes échelles. On considère alors que les fonctions de (\mathbf{r}, t) sont des fonctions de (\mathbf{r}, t_1, t_2) comme si t_1 et t_2 étaient des variables indépendantes. On ne s'intéresse pas aux variations à l'échelle de temps microscopique représentées par t_0 (implicite lorsqu'on utilise l'hypothèse d'équilibre local).

On notera l'occupation moyenne des cellules en fonction des variables continues

$$f_i(\mathbf{r}, t) \equiv N_i(\epsilon \mathbf{r}_*, \epsilon t_*) \equiv f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + O(\epsilon^3) \quad (\text{C.41})$$

L'équation de Boltzmann (C.18) s'écrit alors

$$f_i(\mathbf{r} + \epsilon \mathbf{c}_i, t + \epsilon) - f_i(\mathbf{r}, t) = \Delta_i(\mathbf{r}, t) \quad (\text{C.42})$$

où

$$\Delta_i(\mathbf{r}, t) = \sum_{(s, s') \in \gamma^2} (s'_i - s_i) A_{s's} \prod_{j=1}^b f_j^{s_j} (1 - f_j)^{(1-s_j)}. \quad (\text{C.43})$$

Dans la limite hydrodynamique, on approxime les différences finies de l'occupation moyenne par une expansion de Taylor :

$$\begin{aligned} f_i(\mathbf{r} + \epsilon \mathbf{c}_i, t + \epsilon) - f_i(\mathbf{r}, t) &= \epsilon (\partial_{t_1} f_i + \partial_\alpha c_{i\alpha} f_i) \\ &+ \epsilon^2 \left(\frac{1}{2} \partial_{t_1}^2 f_i + \frac{1}{2} \partial_\alpha \partial_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i + \partial_{t_1} \partial_\alpha c_{i\alpha} f_i + \partial_{t_2} f_i \right) \\ &+ O(\epsilon^3) \end{aligned} \quad (\text{C.44})$$

$$= \epsilon \left(\partial_{t_1} f_i^{(0)} + \partial_\alpha c_{i\alpha} f_i^{(0)} \right) \quad (\text{C.45})$$

$$+ \epsilon^2 \left(\partial_{t_1} f_i^{(1)} + \partial_\alpha c_{i\alpha} f_i^{(1)} + \frac{1}{2} \partial_{t_1}^2 f_i^{(0)} \right) \quad (\text{C.46})$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{1}{2} \partial_\alpha \partial_{1\beta} c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(0)} + \partial_{t_1} \partial_\alpha c_{i\alpha} f_i^{(0)} + \partial_{t_2} f_i^{(0)} \\ &+ O(\epsilon^3) \end{aligned} \quad (\text{C.47})$$

où l'on a utilisé le fait que $\partial_t = \partial_{t_1} + \epsilon \partial_{t_2}$.

Les équations d'évolution macroscopique

Par définition d'un invariant de collision $q^{[\kappa]}$, on a

$$\sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} \Delta_i = 0. \quad (\text{C.48})$$

En multipliant l'équation de Boltzmann (C.42) par $q_i^{[\kappa]}$ et en sommant sur les cellules, on obtient 2 équations de conservations (une pour chaque ordre du développement).

Au premier ordre

$$\partial_{t_1} \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} f_i^{(0)} + \partial_\alpha \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} c_{i\alpha} f_i^{(0)} = 0, \quad \kappa = 1, \dots, \delta. \quad (\text{C.49})$$

Au second ordre

$$\begin{aligned} \partial_{t_1} \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} f_i^{(1)} + \partial_\alpha \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} c_{i\alpha} f_i^{(1)} + \partial_{t_2} \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} f_i^{(0)} \\ + \frac{1}{2} \partial_\alpha \partial_\beta \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(0)} + \frac{1}{2} \partial_{t_1}^2 \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} f_i^{(0)} + \partial_{t_1} \partial_\alpha \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} c_{i\alpha} f_i^{(0)} = 0, \quad \kappa = 1, \dots, \delta. \end{aligned} \quad (\text{C.50})$$

En utilisant (C.49) et le fait que $f_i^{(1)}$ ne contribue pas aux invariants de collision (C.37) on obtient

$$\begin{aligned} \partial_\alpha \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} c_{i\alpha} f_i^{(1)} + \partial_{t_2} \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} f_i^{(0)} + \frac{1}{2} \partial_\alpha \partial_\beta \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(0)} \\ + \frac{1}{2} \partial_{t_1} \partial_\alpha \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} c_{i\alpha} f_i^{(0)} = 0, \quad \kappa = 1, \dots, \delta. \end{aligned} \quad (\text{C.51})$$

Le premier terme à gauche reste à déterminer, car il fait intervenir la perturbation au premier ordre de la distribution $f_i^{(1)}$. Pour calculer la perturbation de la distribution, on développe également le terme de collision en puissance de ϵ . L'équation de Boltzmann au premier ordre est

$$\partial_{t_1} f_i^{(0)} + \partial_\alpha c_{i\alpha} f_i^{(0)} = \sum_{j=1}^b \Omega_{ij} f_j^{(1)}, \quad i = 1, \dots, b. \quad (\text{C.52})$$

où Ω_{ij} sont les coefficients de la matrice Jacobienne de l'opérateur de collision dans l'approximation de Boltzmann, évalué pour la distribution d'équilibre locale :

$$\Omega_{ij} = \frac{\partial \Delta_i}{\partial f_j} (f = f^{(0)}) \quad (\text{C.53})$$

Ω n'est pas une matrice inversible à cause de la présence des invariants de collision ($\Omega q^{[\kappa]} = 0$ pour $q^{[\kappa]} \neq 0$). On introduit alors la matrice pseudo-inverse $\Omega^{[-1]}$ de Ω , qui agit comme l'opérateur nul sur le noyau de Ω et comme l'inverse sur le sous-espace orthogonal au noyau. On écrit alors formellement

$$f_i^{(1)} = \sum_{j=1}^b \Omega_{ij}^{[-1]} \left(\partial_{t_1} f_j^{(0)} + \partial_\alpha c_{j\alpha} f_j^{(0)} \right) \quad (\text{C.54})$$

En multipliant (C.51) par ϵ , en sommant avec (C.49), et en utilisant la définition de la dérivée

temporelle $\partial_t = \partial_{t_1} + \epsilon \partial_{t_2}$, on obtient

$$\begin{aligned} \partial_t \rho^{[\kappa]} + \partial_\alpha \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} c_{i\alpha} f_i^{(0)} + \epsilon \left[\frac{1}{2} \partial_\alpha \partial_\beta \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(0)} \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \partial_\alpha \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} c_{i\alpha} \partial_{t_1} f_i^{(0)} + \partial_\alpha \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} c_{i\alpha} f_i^{(1)} \right] = 0, \quad \kappa = 1, \dots, \delta. \end{aligned} \quad (\text{C.55})$$

Il faut alors exprimer $\partial_{t_1} f_i^{(0)}$ en fonction des gradients des variables macroscopiques. Pour cela, on utilise le fait que l'approximation de la distribution d'équilibre est une fonction connue des variables macroscopiques $f_i^{(0)}(\rho^{[\kappa]})$. En utilisant l'équation (C.49), on a alors

$$\partial_{t_1} f_i^{(0)} = \sum_{\kappa=1}^{\delta} \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial \rho^{[\kappa]}} \partial_{t_1} \rho^{[\kappa]} = - \sum_{\kappa=1}^{\delta} \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial \rho^{[\kappa]}} \partial_\alpha \sum_{j=1}^b q_j^{[\kappa]} c_{j\alpha} f_j^{(0)}, \quad i = 1, \dots, b. \quad (\text{C.56})$$

Pour conclure, dans un gaz sur réseau avec δ invariants de collisions indépendants (sans autre invariant indésirable), des collisions qui satisfont le bilan semi-détaillé, et dans l'approximation de Boltzmann, les équations décrivant l'évolution des densités des variables macroscopiques sont :

La distribution d'équilibre qui est une fonction des densités des variables macroscopiques

$$f_i^{(0)}(\rho^{[\kappa]}), \quad (\text{C.57})$$

la perturbation de l'occupation moyenne qui vérifie les équations

$$\sum_{j=1}^b \Omega_{ij} f_j^{(1)} = \partial_\alpha (c_{i\alpha} f_i^{(0)}) - \sum_{\kappa=1}^{\delta} \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial \rho^{[\kappa]}} \partial_\beta \left(\sum_{j=1}^b q_j^{[\kappa]} c_{j\beta} f_j^{(0)} \right), \quad i = 1, \dots, b, \quad (\text{C.58})$$

et les équations d'évolutions

$$\begin{aligned} \partial_t \rho^{[\kappa]} + \partial_\alpha \sum_{i=1}^b q_i^{[\kappa]} c_{i\alpha} f_i^{(0)} \\ + \frac{\epsilon}{2} \partial_\alpha \sum_{i=1}^b q_i^{(\kappa)} c_{i\alpha} \left[\partial_\beta (c_{i\beta} f_i^{(0)}) - \sum_{\kappa'=1}^{\delta} \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial \rho^{[\kappa']}} \partial_\beta \left(\sum_{j=1}^b c_{j\beta} f_j^{(0)} \right) + 2f_i^{(1)} \right] = 0, \quad \kappa = 1, \dots, \delta. \end{aligned} \quad (\text{C.59})$$

Les équations d'évolution des variables macroscopiques (C.57-C.59) constituent la vision hydrodynamique (ou macroscopique) du gaz sur réseau.

On a retiré une grande partie des discussions usuelles, car nous utilisons les gaz sur réseau comme des modèles conceptuels et non des outils de simulation de fluides. Généralement, on utilise les propriétés comme la G-invariance, l'isotropie du réseau cristallographique jusqu'à un certain ordre, l'irréductibilité, et un changement d'échelle de temps pour retrouver les équations de Navier-Stokes pour un fluide incompressible (voir [Frisch et al., 1987] et [Rivet and Boon, 2005]).

Dérivation de l'équation macroscopique du modèle du chapitre 6

Le modèle vérifie le bilan détaillé (et donc semi-détaillé). On suppose qu'il n'a qu'un seul invariant de collision qui est le nombre de particules $q = (1, 1, 1, 1)$. Les tenseurs de vitesse utiles dans les calculs sont

$$\sum_{i=1}^4 c_{i\alpha} = 0, \quad (\text{C.60})$$

$$\sum_{i=1}^4 c_{i\alpha} c_{i\beta} = 2c^2 \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{C.61})$$

Distribution d'équilibre : On montre facilement que la distribution d'équilibre associée à la densité de particule $\rho = \sum_{i=1}^4 N_i$ est

$$f_i^{(0)} = \frac{\rho}{4}. \quad (\text{C.62})$$

Pour ce modèle simple, la distribution d'équilibre est obtenue de façon exacte et ne dépend pas de la cellule, ce qui facilite grandement les calculs.

Calcul de la perturbation au premier ordre : On a

$$\Delta_i(\mathbf{r}, t) \equiv \sum_{(s, s') \in \gamma^2} (s'_i - s_i) A_{s's} \prod_{j=1}^b f_j^{s_j} (1 - f_j)^{(1-s_j)} \quad (\text{C.63})$$

$$= p[(1 - f_i)f_{i+1}(1 - f_{i+2})f_{i+3} - f_i(1 - f_{i+1})f_{i+2}(1 - f_{i+3})] \quad (\text{C.64})$$

$$+ q[(1 - f_i)f_{i+1}f_{i+2}f_{i+3} - f_i f_{i+1}(1 - f_{i+2})f_{i+3}] \quad (\text{C.65})$$

où les indices $i, \dots, i+3$ sont à prendre modulo 4. Les termes de la matrices Ω (C.53) sont alors

$$\Omega_{ii} = -p \frac{\rho}{4} \left(1 - \frac{\rho}{4}\right) - q \left(\frac{\rho}{4}\right)^2 \quad (\text{C.66})$$

$$\Omega_{i(i+1)} = p \frac{\rho}{4} \left(1 - \frac{\rho}{4}\right) \quad (\text{C.67})$$

$$\Omega_{i(i+2)} = -p \frac{\rho}{4} \left(1 - \frac{\rho}{4}\right) + q \left(\frac{\rho}{4}\right)^2 \quad (\text{C.68})$$

$$\Omega_{i(i+3)} = p \frac{\rho}{4} \left(1 - \frac{\rho}{4}\right). \quad (\text{C.69})$$

Après quelques lignes de calculs, on obtient la solution de (C.58)

$$f_1^{(1)} = -f_2^{(1)} = -\frac{2}{q\rho^2} \partial_x \rho, \quad f_2^{(1)} = -f_4^{(1)} = -\frac{2}{q\rho^2} \partial_\rho \quad (\text{C.70})$$

Équation d'évolution macroscopique : En remplaçant les expressions des tenseurs de vitesse (C.60-C.61), de la distribution d'équilibre (C.62), et de la perturbation au premier ordre (C.70) dans (C.59), on obtient l'équation d'évolution macroscopique

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (\text{C.71})$$

$$\mathbf{J} = -c^2 \left(\frac{4}{q\rho^2} - \frac{1}{4} \right) \epsilon \nabla \rho. \quad (\text{C.72})$$