

UNIVERSITÉ DE REIMS CHAMPAGNE - ARDENNE

THÈSE

Présentée à L'U.F.R. Sciences Exactes et Naturelles

Pour l'obtention du titre de
Docteur de l'université de Reims Champagne - Ardenne

Spécialité : Astronomie, Astrophysique

Ecole doctorale ED358 : Sciences, Technologies, Santé

par

Jérémie BURGALAT

Sujet de la thèse

**DÉVELOPPEMENT D'UN MODÈLE MICROPHYSIQUE EN
MOMENTS POUR LES MODÈLES CLIMATIQUES DE TITAN**

Soutenue le 29 mars 2012 devant le jury :

Mme Griffith Caitlin	Professeur, Université d'Arizona	Rapporteur
M. Cabane Michel	Professeur, UPMC	Rapporteur
M. Durry Georges	Professeur, URCA	Président du jury
M. Lellouch Emmanuel	Astronome, OBSPM	Examineur
M. Montmessin Franck	Chargé de Recherche CNRS, UVSQ	Examineur
M. Bekki Slimane	Directeur de Recherche CNRS, UVSQ	Invité
M. Rannou Pascal	Professeur, URCA	Directeur de thèse

Remerciements

En premier lieu, je souhaite remercier Pascal Rannou, mon directeur de thèse. Sans lui, cette formidable aventure qu'a été ma thèse n'aurait pas vu le jour. Il m'a appris énormément de choses sur la microphysique, Titan, l'université et même le latin (quoique pour le latin je ne suis pas certain d'avoir retenu grand-chose, désolé!). Il m'a laissé ma liberté d'action tout en étant très disponible. Il a été d'une extrême patience en répondant à mes questions les plus idiotes et plus farfelues, qu'elles soient d'ordre scientifique, informatique, ou bien encore posées la semaine précédente. Pour tout cela je le remercie encore.

Je remercie toute la structure du GSMA et son directeur Georges Durry, avec une attention plus particulière pour Thibaud et Manu. Merci de vous être intéressés à mon travail et de m'avoir apporté conseils et précisions sur ce dernier. J'ajouterais aussi un remerciement à Fred sans qui les pauses cafés auraient été beaucoup moins divertissantes. Un chaleureux merci à Charlotte, qui a débuté sa thèse en même temps que moi. J'ai pu partager avec toi les joies du monitorat et pu m'ébahir devant tes magnifiques nuages de points (il fallait que ça sorte, désolé). Allez un petit remerciement à mon premier collègue de bureau, Jingsong, qui m'a certainement appris à être plus patient. Enfin je souhaite remercier le dernier venu dans mon antre au GSMA : Alexandre, qui a traqué la plupart des fautes syntaxiques de ce manuscrit (mais visiblement pas assez ☺) en un temps record. Pas sûr que tu es eu le temps d'apprécier les équations à leur juste valeur mais tu auras un exemplaire papier rien que pour toi!

Je remercie toute ma famille et plus particulièrement mes parents qui m'ont poliment écouté parler de moments, de lignes de codes et de tout un tas d'autres futilités! Je remercie aussi mes amis pour tous les agréables moments passés en dehors du boulot (et qui, de fait, n'ont pas eu à supporter mes divagations sur les lois de distribution des aérosols de Titan) : Nono, Jul, Pat, Garf, Fred, Denis, Pascal et Pierre, Axel (*oui, le jeu de rôles, c'est surtout une « affaire » de garçon*)... Linros, Myriel, Talyn, Ciras, Tedelas ... et même vous Chrimli et Redthor (*et le meuhhporg, une affaire d'avatar!*).

Table des matières

1	L’atmosphère de Titan	1
1.1	Propriétés des aérosols	4
1.1.1	Formation et taille des aérosols	4
1.1.2	Propriétés fractales des aérosols	5
1.1.3	Caractéristiques des aérosols contraintes par DISR	8
1.2	Propriétés des nuages	9
1.3	Impact des aérosols et des nuages sur le climat de Titan	11
1.4	Origine et développement de la thèse	13
2	Microphysique Classique	15
2.1	Distribution en taille des aérosols et des particules de nuages	16
2.1.1	Notions de granulométrie : loi de distribution	16
2.1.2	Lois de distribution en taille sur Titan	17
2.1.3	Cas des modèles 1D	21
2.1.4	Distribution en taille des particules de nuages	22
2.1.5	Ajustement de la loi de distribution	24
2.2	Régime d’écoulement	27
2.3	Microphysique des aérosols	28
2.3.1	Sédimentation	29
2.3.2	Coagulation	31
2.4	Microphysique des nuages	33
2.4.1	Energie de formation d’une goutte	34
2.4.2	Nucléation	35
2.4.3	Condensation	37

3	Méthode des moments	39
3.1	Contexte Général	39
3.2	Moments et lois de distribution	44
3.2.1	Relation inter-moments	45
3.2.2	Comparaison de lois de distributions	48
3.2.3	Cas des modèles 1D	50
3.3	Résolution des équations de la microphysique de la brume en moments	51
3.3.1	Coagulation des aérosols	52
3.3.1.1	Lois de coagulation en présence de 2 modes	54
3.3.1.2	Coagulation intra-modale (SS, FF)	57
3.3.1.3	Coagulation inter-modale (SF)	60
3.3.1.4	Synthèse de l'équation de coagulation :	60
3.3.1.5	Coefficient de coagulation	61
3.3.1.6	Équations d'évolution des moments d'ordre 0 et 3	66
3.3.1.7	Transition de régimes : Moyenne harmonique	67
3.3.1.8	Cas de l'effet de la charge électrique	73
3.3.2	Sédimentation des aérosols	76
3.3.3	Zone de production	79
3.4	Résolution des équations de la microphysique des nuages en moments	79
3.4.1	Nucléation	79
3.4.2	Condensation	80
3.4.3	Sédimentation des gouttes	82
3.5	Résumé	83
4	Modélisation et test de la méthode des moments	85
4.1	Représentation « mixte » : conversion des représentations en sections et en moments	86
4.2	Description du modèle et protocole des tests	89
4.3	Simulations et résultats des tests	90
4.3.1	Cycle annuel	91
4.3.2	Cycle diurne	99
4.3.3	Test de la loi Log-Normale	102
4.4	Résumé	105

5	Modèle de climat global : application à Titan	107
5.1	Historique du GCM-Titan de l'IPSL	107
5.2	Études en lien avec le TGCM-2D	110
5.2.1	Étude de la couche détachée	110
5.2.1.1	Caractérisation des aérosols en taille	112
5.2.1.2	Bilan thermique de la couche détachée	115
5.2.2	Test de sensibilité de la couche nuageuse	122
5.3	TGCM-3D : mise à niveau du modèle	125
5.3.1	Modèle microphysique et simplifications du modèle 3D	125
5.3.2	Premiers résultats du TGCM-3D	127
6	Conclusions et perspectives	137
	Annexes	145
A	Développement des équations de la coagulation en moments	147
	Bibliographie	167

Table des figures

1.1	« Amazing haze »	2
1.2	La brume et les nuages de Titan	3
1.3	Surface du satellite	3
1.4	Exemple d'un objet fractal : le triangle de Sierpiński	6
1.5	Exemple d'un agrégat fractal avec ses paramètres	7
1.6	Opacité et profil vertical de la densité d'aérosols obtenue par les données DISR.	9
1.7	Cartographie des nuages observés par VIMS entre 2005 et 2007	11
1.8	Variations de température du TGCM-2D (impact des couplages)	12
1.9	Réponse thermique de l'atmosphère à la variation d'opacité	13
2.1	Lois de distribution Log-Normale et Gamma	17
2.2	Lois de distributions du TGCM-2D	19
2.3	Queue de la loi de distribution en taille des aérosols	21
2.4	Comparaison de lois de distribution (modèle 1D / modèle 2D)	22
2.5	Ajustement de la loi de distribution (modèle 2D)	25
2.6	Ajustement de la loi de distribution (modèle 1D)	26
2.7	Schématisation des régimes d'écoulement	27
2.8	Vitesse de sédimentation des aérosols	30
2.9	Coefficient de coagulation en fonction du rayon des aérosols	33
2.10	Énergie de formation d'une goutte	35
2.11	Facteur de forme $f(m, x)$ de la nucléation hétérogène	37
3.1	Schéma de principe des sections fixes/mouvantes	42
3.2	Ajustement de la fonction $\alpha(k)$ (modèle 2D)	47
3.3	Comparaison des moments de la loi Titan-2D et de la loi LOG-N	49
3.4	Ajustement de la fonction $\alpha(k)$ (modèle 1D)	50
3.5	Rapport $M_k(\text{Log-N})/M_k(\text{Titan-1D})$	51

3.6	Schéma de développement de l'équation de la coagulation dans le cas d'une distribution bi-modale incluant deux types de particule (sphérique, fractale).	57
3.7	Probabilité de transfert des particules sphériques vers des particules fractales	59
3.8	Erreur relative de la simplification sur la correction Cunningham-Millikan	62
3.9	Variations de l'erreur relative de la simplification sur la correction Cunningham-Millikan	63
3.10	Comparaison de $\frac{dM_0}{dt}$ pour la méthode de la moyenne harmonique . . .	71
3.11	Erreur relative sur $\frac{dM_0}{dt}$ pour les auto-coagulations sphériques et fractales	72
3.12	Correction électrique sur l'efficacité de collection à $T = 160K$	74
3.13	Profil vertical de \overline{Q}_{SS} pour $r_{C_S} = 8 \times 10^{-9} m$	75
3.14	Variations de \overline{Q}_{FF} en fonction des variables T , r_{C_F} et P	76
3.15	Variation de l'erreur sur le flux de sédimentation de M_0^F	78
3.16	Gestion de la microphysique des nuages dans le TGCM-2D	81
4.1	Principe d'utilisation de la table pré-calculée des ΔN_i du modèle de conversion	88
4.2	Variations annuelles de la brume et de la température à la tropopause	93
4.3	Variations annuelles de la <i>température</i> pour les 3 modèles, à 3 niveaux d'altitude et à la surface	94
4.4	Variations annuelles de l'opacité des <i>nuages</i> pour les modèles R et H , à 3 niveaux d'altitude et à la surface	95
4.5	Variations annuelles de l'opacité de la <i>brume</i> (à 715 nm) pour les 3 modèles, à 3 niveaux d'altitude et à la surface	96
4.6	Profil verticaux de k_{brume} , k_{nuages} et T en été et en hiver.	97
4.7	Densité moyenne d'occurrences de la couche nuageuse en été et en hiver	98
4.8	Variations journalières de l'opacité des nuages	100
4.9	Densité moyenne d'occurrences de la couche nuageuse matin/soir . . .	101
4.10	Rapport des intensités aux limbes Soir/Matin reportés par Hirtzig et al. 2006	101
4.11	Comparaison des variations annuelles de l'opacité (brume et nuages) des modèles H_{Titan} et H_{Log-N}	103
4.12	Comparaison des variations annuelles de la température des modèles H_{Titan} et H_{Log-N}	104
5.1	Panel de la brume dans le TGCM-2D	109
5.2	Schéma de principe de l'interaction entre la circulation et les espèces chimiques	110

5.3	Comparaisons des prédictions nuageuses du TGCM-2D et des observations	111
5.4	Profils verticaux du rapport I/F observé au niveau de la couche détachée	112
5.5	Comparaisons des rapports I/F observés et calculés dans la couche détachée	113
5.6	Schématisation du modèle à deux couches	116
5.7	Impact des indices optiques sur la température « d'équilibre radiatif » de la couche détachée	117
5.8	Contribution des tailles d'aérosols aux propriétés optiques de la couche détachée	118
5.9	Impact de la forme de la distribution sur la température d'équilibre radiatif	119
5.10	Taux de chauffage dans la couche détachée en $K.s^{-1}$ (TGCM-2D)	122
5.11	Cartes de l'opacité des nuages du TGCM-2D	124
5.12	Efficacité d'extinction en fonction du paramètre de taille	127
5.13	Couverture de l'activité nuageuse de Titan durant la période 2004-2010	128
5.14	Cartes de nuages issues de différents GCM	130
5.15	Comparaison de l'extinction des nuages à 40°S des modèles 2D et 3D	132
5.16	Comparaison de la saturation du CH_4 entre le TGCM-2D et le TGCM-3D	133
5.17	Comparaison de la température de surface observée et celle des GCM	134
5.18	Comparaison de la température dans la troposphère entre le TGCM-2D et le TGCM-3D	135

Liste des tableaux

1.1	Mode de croissance des aérosols et dimension fractale associée	6
2.1	Variations du cut-off de la loi de distribution en taille des aérosols . .	21
2.2	Valeurs moyennes des paramètres des distributions en taille des gouttes	23
2.3	Paramètres d'ajustement de la loi de distribution (modèle 2D)	25
2.4	Paramètres d'ajustement de la loi de distribution (modèle 1D)	26
3.1	Paramètres d'ajustement de la relation inter-moments (modèle 2D) .	47
3.2	Paramètres d'ajustement de la relation inter-moments (modèle 1D) .	51
3.3	Conventions de la coagulation en moments	56
3.4	Pré-facteurs b_k de la coagulation en régime moléculaire	64
3.5	Simplification des pré-facteurs b_k pour $k = 0$ et $k = 3$	66
5.1	Paramètres de la loi de distribution dans la couche détachée contraints par les observations ISS et UVIS.	114
5.2	Paramétrage des tests de sensibilité sur la couche nuageuse du TGCM- 2D	123
5.3	Estimations des temps d'exécutions des TGCM-2D et TGCM-3D . .	126
5.4	Caractéristiques des GCM comparés dans la figure 5.14	128

CHAPITRE 1

L'atmosphère de Titan

Sommaire

1.1 Propriétés des aérosols	4
1.1.1 Formation et taille des aérosols	4
1.1.2 Propriétés fractales des aérosols	5
1.1.3 Caractéristiques des aérosols contraintes par DISR	8
1.2 Propriétés des nuages	9
1.3 Impact des aérosols et des nuages sur le climat de Titan	11
1.4 Origine et développement de la thèse	13

Titan est l'un des rares corps de type « planète tellurique » à posséder une atmosphère dense. En quelques mots, la pression atmosphérique est de 1.39 *bar*, la température au sol est de 93.5 *K* à l'équateur et de 90 *K* dans les régions polaires (Fulchignoni et al., 2005; Jennings et al., 2009). Les couches atmosphériques sont structurées avec une troposphère jusqu'à ~ 40 km, une température de la tropopause autour de 70 *K*, une stratosphère jusqu'à 300 km environ, puis une mésosphère. La composition atmosphérique de Titan est dominée par l'azote moléculaire (95% au sol, 98.5% au dessus de la troposphère), avec une présence de méthane au niveau de 5% proche du sol qui donne toute sa complexité à l'atmosphère (Niemann et al., 2005).

Sur Titan, le méthane est l'espèce condensable principale dont le temps de vie est de l'ordre de 20 millions d'années. Très tôt l'idée d'un cycle du méthane vigoureux a été avancée. Ce n'est que dans le milieu des années 90, mais surtout au tournant des années 2000, puis sous « l'ère Cassini » que les éléments de ce cycle du méthane ont été dévoilés (Griffith et al., 1998, 2000; Roe et al., 2002, 2005; Porco et al., 2005; Griffith et al., 2005, 2006). On voit maintenant des nuages de façon régulière qui permettent une cartographie globale (Rodriguez et al., 2009, 2011) et des lacs d'hydrocarbures, seules étendues liquides connues en dehors de la terre (Stofan et al., 2007).

La dissociation de l'azote moléculaire et du méthane dans les hautes couches de l'atmosphère, puis leur recombinaison en molécules plus complexes, produisent une très grande variété d'espèces chimiques d'hydrocarbure et de nitrile. Les observations

de Voyager, puis celles menées grâce aux télescopes et enfin avec Cassini ont montré une impressionnante complexité de la photochimie régnant sur Titan (Maguire et al., 1981; Kunde et al., 1981; Coustenis et al., 2010). La sonde Cassini a aussi révélé le fait inattendu que toute cette complexité prend naissance dans les très hautes couches de l'atmosphère, bien au dessus de 800 km, alors que l'atmosphère très ténue ne favorise pas *à priori* la complexité chimique (Waite et al., 2005).

C'est aussi cette complexité de la photochimie qui donne naissance à la couche d'aérosol. En effet, parmi les molécules complexes produites dans l'atmosphère, certaines peuvent polymériser et produire des particules photochimiques de taille nanométrique qui vont ensuite coaguler et croître. La couche d'aérosol de Titan est sans doute la composante la plus immédiatement visible lorsque l'on observe Titan (Smith et al., 1981, 1982). Elle participe aussi largement à la répartition de l'énergie radiative, masque les basses couches du rayonnement, et facilite la formation des nuages (McKay et al., 1989; Toon et al., 1988). Enfin, une partie des molécules produites par photochimie, pourtant en abondance très limitée, trouve les conditions pour condenser et former des couches de nuages distinctes de celles produites par le méthane.

Enfin, depuis le milieu des années 90, mais encore mieux grâce à la sonde Cassini, il est possible de voir et d'étudier la surface de Titan. Cette surface s'avère aussi d'une grande complexité. Plusieurs éléments remarquables peuvent être notés : cette surface est hétérogène, elle comporte des traces d'écoulement similaire à des réseaux fluviaux, des "mers", et dans la zone équatoriale on observe la présence de champs de dunes (Tomasko et al., 2005; Elachi et al., 2006). Dans ce travail, nous allons essentiellement nous consacrer à l'étude des aérosols et des nuages de Titan. Avant d'entrer dans le cœur de la microphysique, nous allons décrire ces deux composantes. Les parties 1.1 et 1.2 traitent avant tout des propriétés des aérosols et des nuages de Titan. Dans ces deux parties nous aborderons leurs caractéristiques (taille et structure) ainsi que leurs origines. La partie 1.3 présente de manière générale leurs interactions avec le climat de Titan et essentiellement leur impact sur la structure thermique de l'atmosphère.

La série de figures suivantes (figs. 1.2, 1.1 et 1.3) illustrent quelques-uns des aspects décrits plus haut comme la brume, les nuages et la surface. L'ensemble des ces photos ont été prises par les instruments des sondes spatiales ayant « visitées » Titan (Voyager 1 et Cassini).

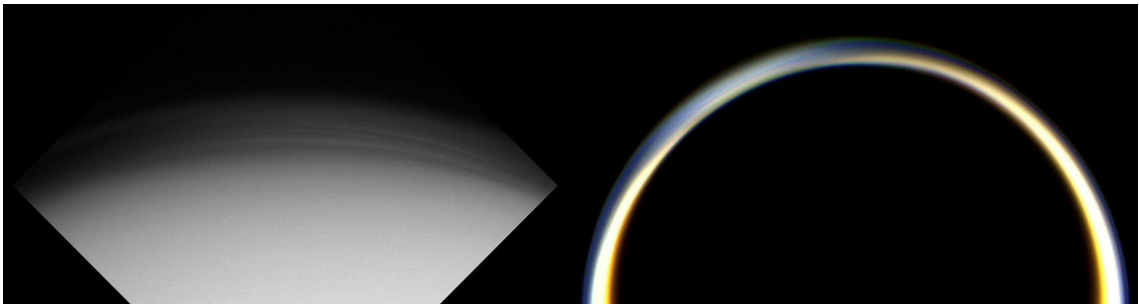
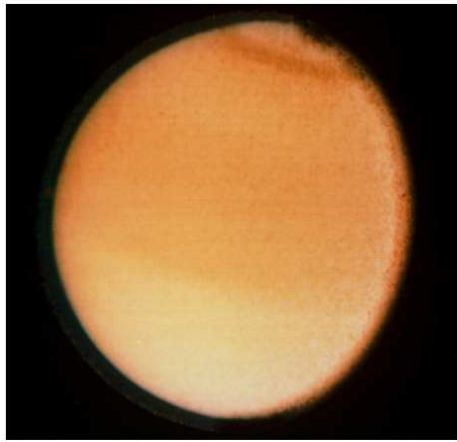


FIGURE 1.1 – « Amazing haze ».
Photo de la brume prises par ISS. (crédits NASA)

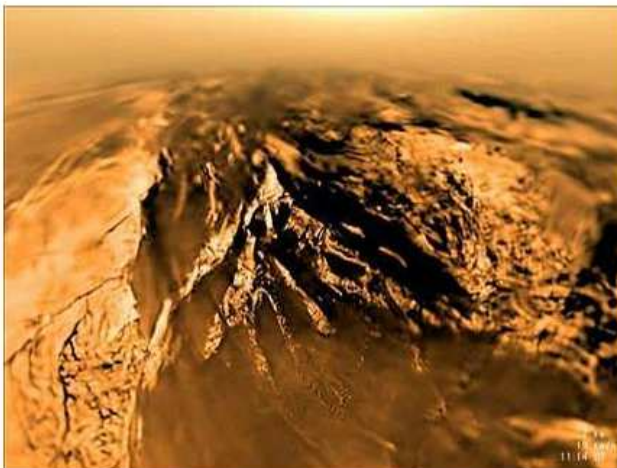


a) Titan en 1981 (Photo Voyager 1)

b) Titan en 2007 (Photo Cassini, VIMS)



FIGURE 1.2 – a) Voyager 1 présente l'épaisse couche de brume orange du satellite.
b) Cassini exposant le nuage polaire de l'hémisphère nord. (crédits NASA)



a) Descente de Huygens



b) A la surface

FIGURE 1.3 – Images de la surface de Titan prises par le module Huygens lors de sa descente dans l'atmosphère (a) et une fois au sol (b). (crédits NASA)

1.1 Propriétés des aérosols

On appelle aérosols toutes « particules en suspension dans l'air à l'exception des gouttes nuageuses ». Ils sont caractérisés par leur temps caractéristique de sédimentation supérieur aux temps caractéristiques associés aux différents processus qui affectent leur évolution. De manière générale, ce sont donc des petites particules, ou gouttelettes dont le matériau peut varier. La formation de ces aérosols varie selon le cas étudié : Par exemple sur Mars, la source majeure de production d'aérosols provient du soulèvement des poussières à la surface, on parle alors d'aérosols primaires (directement injectés dans l'atmosphère). Sur Titan, les aérosols ont une origine photochimique et sont produits directement dans l'atmosphère (ce sont des aérosols secondaires). La Terre quant à elle, constitue à ce jour l'environnement le plus complexe en matière d'aérosols où les types, les puits et les sources des aérosols sont très variés (produits issus de la photochimie, sels marins ou cendres volcaniques . . .). L'autre propriété qui caractérise les aérosols provient de leur mouvement d'agitation thermique. Comme tout objet microscopique, ils ont un mouvement associé à leur température. Ils se déplacent donc à des vitesses de quelques millimètres par seconde en suivant des parcours curvilignes. Lorsque deux aérosols se choquent lors de ces mouvements, ils peuvent rester collés l'un à l'autre par la force de Van Der Waals. Ce phénomène s'appelle la coagulation, et c'est leur mode de croissance privilégié sur Titan.

1.1.1 Formation et taille des aérosols

A haute altitude (à plus de 500 km) dans l'atmosphère de Titan, les composants majoritaires, N_2 et CH_4 , sont dissociés par rayonnement UV ou par des particules énergétiques puis se recombinaient pour donner lieu à des nitriles et des hydrocarbures, dont l'éthane, qui à leur tour peuvent être dissociés pour former une grande variété de molécules. Ces processus photochimiques complexes donnent à terme naissance aux aérosols. Les sources de production d'aérosols sont encore assez mal connues et soumises à débat. De même, la composition exacte des aérosols n'est pas connue. Néanmoins, plusieurs expériences en laboratoire ont simulé la formation des aérosols. A partir des composés principaux de l'atmosphère de Titan dans différentes conditions de température et de pression (mais aussi de protocoles expérimentaux) ces études ont permis de produire une grande variété d'analogues à ces aérosols, appelés « tholins ». L'analyse et la comparaison entre les propriétés optiques de ces tholins et les observations photométriques de Titan, permettent de sélectionner ces analogues au niveau des propriétés optiques (Khare et al., 1984; Imanaka et al., 2012).

La taille des aérosols a été l'un des grands « défis » des études de l'atmosphère de Titan durant les années 1980 et 1990. Avant le passage de la sonde Pioneer 11 en 1979 puis de Voyager 1 (un an plus tard) dans le système de Saturne, le satellite est relativement peu connu. Le méthane est détecté depuis longtemps dans son atmosphère (Kuiper, 1944) et la présence d'aérosols était établie (Danielson et al., 1973; Veverka, 1973). Une étude avait permis de cerner la taille de ces aérosols et leur propriétés optiques grâce à des observations télescopiques (Rages and Pollack, 1980).

L'analyse des données polarimétriques et photométriques obtenues par les sondes Pioneer et Voyager ont révélé un désaccord sur la taille des particules : Si la polarimétrie imposait des particules sphériques de rayon $r = 0.1 \mu m$ (Tomasko and Smith, 1982), la photométrie nécessitait des tailles légèrement plus importante avec des rayons compris entre $r = 0.2 \mu m$ et $r = 0.6 \mu m$ (Rages and Pollack, 1983). Le désaccord établi suite à ces études a pu être partiellement résolu en considérant les aérosols comme des agrégats de sphères et non plus des sphères parfaites. Une telle étude a été menée West and Smith (1991) : Ils estimèrent ainsi que des agrégats composés de 8 monomères¹ de rayon $r_m = 0.06 \mu m$ reproduisent simultanément les observations de polarimétrie et de photométrie dans le bleu, le vert et le rouge. La clef de ce succès provient du fait que la diffusion de ces agrégats peut être considérée comme la diffusion de N sphères indépendantes. La fonction de polarisation en diffusion latérale (autour de 90°) ressemble donc essentiellement à celle des petits éléments de la particule, soit les monomères, diffusant de façon incohérente. En revanche, en diffusion vers l'avant, ces agrégats diffusent une lumière cohérente (même phase) et la forme de la fonction de phase vers l'avant ressemble à celle d'une grande particule de même rayon apparent que l'agrégat. Néanmoins, dans le domaine UV, un mode supplémentaire de plus petites particules ($r = 0.03 \mu m$) était nécessaire pour parfaitement reproduire les observations. Par la suite, Cabane et al. (1992, 1993) montrèrent que les lois de la microphysique, associées aux règles empiriques de formation des particules fractales, peut expliquer la présence d'agrégats fractals dans l'atmosphère de Titan. Ils développèrent les modèles de microphysique dédiés à Titan, et montrèrent en effet que les tailles des monomères et des agrégats produits concordent avec celles dont West and Smith (1991) ont besoin pour expliquer les observations

1.1.2 Propriétés fractales des aérosols

Dans les années 1970, Benoit Mandelbrot met au point un concept pour décrire des objets dont la structure est auto-similaire et extrêmement irrégulière (ou encore fragmenté) sur une grande gamme d'échelle de longueur. Il leur associe le terme de fractal². A titre d'exemple, on retrouve dans la nature, des objets de forme fractale qui présentent cette propriété d'auto-similarité comme les flocons de neige, les choux fleurs ou encore les fougères.

Une autre particularité des objets fractals concerne l'évolution du volume de matière contenu dans une sphère de rayon croissant. Cette évolution se caractérise par une loi de puissance $M \propto R^{D_f}$. D_f est appelée dimension fractale. Prenons un exemple simple, dans un espace euclidien de dimensions 3 ($d = 3$), un bloc de matière compacte (une sphère pleine) est définie par la loi $M \propto R^3$, une feuille plate est définie par $M \propto R^2$ et un fil par $M \propto R$. Dans le cas d'un objet fractal, D_f n'est pas nécessairement entier et cet objet n'occupe jamais entièrement l'espace mais en explore « certaines directions ». Dans le cas de la figure 1.4, l'objet est contenu dans le plan ($d = 2$) mais n'occupe pas tout son espace : on observe des "trous" dans la figure. La dimension fractale peut être considérée comme une mesure du degré

1. Le monomère est défini par West and Smith (1991) comme la particule primaire d'un agrégat, ou encore comme la plus grosse particule sphérique disponible.

2. Le mot fractal est un néologisme créé à partir de la racine latine *fractus* qui signifie brisé.

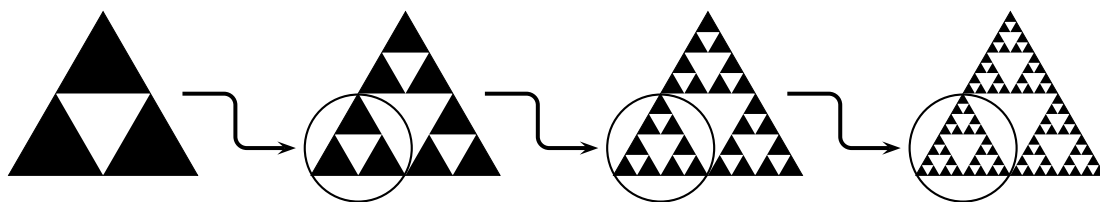


FIGURE 1.4 – Exemple de figure fractale : le triangle de Sierpiński ($D_f = 1.58496$). Il est obtenu ici à partir d'un triangle plein (en noir) dont on divise la taille par 2 à chaque itération et que l'on juxtapose en 3 exemplaire pour former un nouveau triangle.

d'exploration de l'espace physique d'un objet fractal ce qui implique que $D_f \leq d$. Le cas $D_f = 2$ est un peu particulier. Rien ne contraint un objet de dimension fractale $D_f = 2$ à être objet plan dans un espace $d > 3$. Nous en verrons un exemple un peu plus tard (figure 1.5).

Revenons aux agrégats fractals. Dans leur cas, la dimension fractale dépend de leur mode de formation. Il existe plusieurs modes d'agrégation qui correspondent à des processus physiques particuliers. On peut distinguer deux modes de collection, le mode *particule-agrégat* et le mode *agrégat-agrégat*. Les simulations informatiques effectuées sur la formation d'agrégats dans les années 1980 (Witten and Sander, 1981; Meakin, 1984; Jullien, 1984) ont permis de déterminer la dimension fractale d'agrégats formés par ces deux modes de collection selon différents types de déplacement des particules. Le modèle DLA (Diffusion Limited Aggregation) décrit un mode déplacement correspondant au mouvement brownien (déplacement aléatoire sur de petits parcours) pour lequel le libre parcours moyen de la particule, λ_p , est inférieur au rayon de la particule, r_p . Le deuxième type de modèle mis au point utilise des déplacements en ligne droite où $\lambda_p \gg r_p$ ce qui correspond à un régime balistique. Ces simulations donnent des résultats (table 1.1) pour des cas idéaux qui représentent les processus physiques rencontrés dans la nature.

Régime de déplacement	Brownien	Ballistique
Mode d'agrégation	$(\lambda_p \ll r_p)$	$(\lambda_p \gg r_p)$
particule-agrégat	$D_f \approx 2.5$	$D_f \approx 3$
agrégat-agrégat	$D_f \approx 1.75$	$D_f \approx 2$

TABLE 1.1 – Dimension fractale associée aux différents modes de croissance.

Dans leurs travaux pionniers, Cabane et al. (1992, 1993) montrent que, les aérosols étant produits à l'état de macromolécules nanométriques par la photochimie dans des couches élevées, ils ont un temps caractéristique de coagulation beaucoup plus court que le temps caractéristique de sédimentation. Ils croissent donc rapidement jusque des rayons de quelques dizaines de nanomètres. Ainsi, se forme à ces altitudes une couche d'aérosols dont la distribution est polydispersée. Néanmoins, au delà d'une certaine taille, les aérosols sont suffisamment massifs, et l'ordre des temps caractéristiques s'inversent. Alors, les aérosols gagnent des couches plus basses

hors de la zone de formation des macromolécules. Là, les distributions en tailles sont bien plus étroites car seuls les aérosols de plusieurs dizaines de nanomètres peuvent accéder ces niveaux. Cabane et al. (1992) associent les modes de croissance dans la zone de formation des aérosols, avec des distributions en tailles polydispersées et donc des coagulations impliquant des aérosols de tailles très différentes, au mode d'agrégation « particule-agrégat ». En revanche, en dessous de cette zone, le mode d'agrégation dans une distribution étroite se réfère au cas « agrégat-agrégat ». A ces altitudes, quelque soit la taille des aérosols, le régime de déplacement correspond au cas balistique. La lecture de la dimension fractale des aérosols produits se fait directement dans la table 1.1. Cabane et al. (1992) en concluent que dans la zone de formation des aérosols, les aérosols croissent en conservant une structure d'aérosols sphériques jusqu'à des tailles de quelques dizaines de nanomètres. Ces aérosols, avec une masse suffisante pour sédimenter assez rapidement, se retrouvent en dessous de la zone de formation, formant une couche d'aérosols avec une distribution mono-modale. Ils commencent alors à croître en acquérant une structure en agrégats fractals avec une dimension fractale autour de $D_f = 2$. Cabane et al. (1993) font une étude complète de la croissance de ces aérosols, développent le modèle de microphysique de référence pour les aérosols fractals sur Titan, et montrent - entre autres - la dépendance du rayon du monomère à l'altitude de formation des aérosols. Dans le travail présenté ici, il est acquis que les grands aérosols ont une structure fractale de dimension D_f . Cela a d'ailleurs été confirmé grâce aux observations de DISR (Descent Imager/Spectral Radiometer, Tomasko et al., 2008, 2009) dont l'analyse des résultats concernant les aérosols est succinctement résumée dans la section suivante.

Comme le présente la figure 1.5, un agrégat fractal peut être caractérisé par trois variables : Un rayon apparent, r_a et un nombre, N_m , de particules sphériques "primaires" de rayon, r_m , que l'on appelle usuellement monomère.

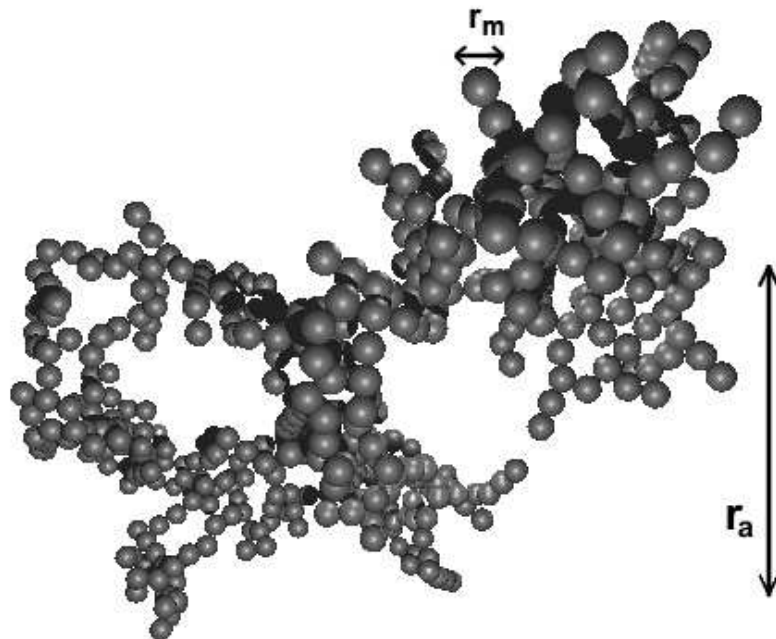


FIGURE 1.5 – Un agrégat fractal et ses paramètres r_a , r_m et $D_f = 2$.

Dans le cas d'un agrégat fractal, l'évolution du nombre de monomères en fonction du rayon apparent de l'agrégat suit une loi de puissance :

$$N_m = \left(\frac{r_a}{r_m} \right)^{D_f} \quad (1.1)$$

Il est possible de définir certaines relations entre un agrégat fractal et une sphère compacte de même volume dont le rayon sera noté r_v . En écrivant le volume occupé par le matériel de l'agrégat en fonction d'une part du rayon de monomère, r_m et d'autre part du rayon de la sphère compacte, r_v , on obtient :

$$V = \frac{4}{3}\pi N_m r_m^3 = \frac{4}{3}\pi r_v^3$$

$$N_m = \left(\frac{r_v}{r_m} \right)^3 \quad (1.2)$$

La combinaison des équations 1.1 et 1.2 permet alors de trouver la relation entre le rayon apparent r_a de l'agrégat et celui de la sphère équivalente, r_v :

$$r_a = r_v^{3/D_f} r_m^{\frac{D_f-3}{3}} \quad (1.3)$$

Pour une particule sphérique, la dimension fractale étant égal à 3, on déduit que l'égalité $r_a = r_v$. Dans les chapitres suivants, la relation 1.3 sera appliquée à tous les rayons apparents dans les équations de la microphysique afin de systématiquement se ramener à une expression ne dépendant que du rayon r_v .

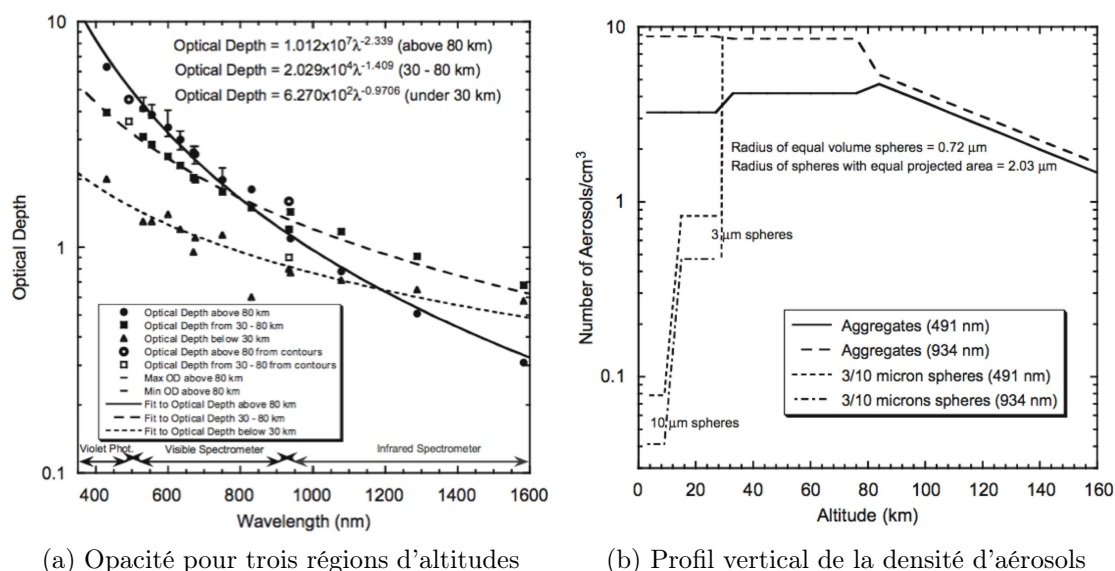
1.1.3 Caractéristiques des aérosols contraintes par DISR

La descente du module Huygens sur Titan constitue le seul profil de mesures *in situ* dans l'atmosphère du satellite (à la latitude 10°S). L'analyse approfondie des résultats de l'instrument DISR menée par Tomasko et al. (2008, 2009) a permis de contraindre la plupart des propriétés des aérosols et de confirmer les études théoriques menées à leur sujet.

A l'aide d'un modèle d'aérosols fractals, Tomasko et al. (2008) estime que les agrégats, pour une dimension fractale $D_f = 2$, doivent être composé d'environ 3000 monomères de taille $r_m = 0.05 \pm 0.02 \mu m$ au dessus de 60 km d'altitude. L'ajout des données de polarisation à leur analyse (Tomasko et al., 2009), a permis de mieux contraindre la taille de monomère avec une valeur $r_m = 0.04 \pm 0.01 \mu m$ sur les 150 premiers kilomètres de l'atmosphère.

La distribution verticale de la brume présente principalement trois régions d'altitude que l'on peut associer à la basse troposphère ($z < 30 km$), la haute troposphère et la basse stratosphère ($30 km < z < 80 km$) et enfin la stratosphère ($z > 80 km$). Dans ces trois régions, la brume présente des variations d'opacité et de densité différentes (voir figure 1.6). Dans la stratosphère, l'opacité de la brume décroît en altitude avec une échelle de hauteur $H \sim 65 km$. Pour les deux autres régions, l'opacité varie linéairement en fonction de l'altitude mais avec des pentes différentes. La comparaison des variations spectrales de l'opacité pour chacune des trois régions montre que

celle-ci augmente lorsque l'altitude diminue (fig. 1.6.a) et traduit une augmentation de la taille des aérosols. L'absorption diminue légèrement elle aussi lorsque l'on se rapproche du sol. Tomasko et al. (2008) suggère que l'accroissement de taille doit se faire par l'incorporation de nouveau matériaux qui pourrait correspondre à la glace de méthane en dessous de 30 km (ce qui rendrait les aérosols plus brillant et pourrait modifier leur forme et leur taille). Ce point se retrouve aussi sur la figure 1.6.b : Au dessus de 80 km, les rapports de l'opacité (déduite de l'observation) sur la section efficace (calculée pour des agrégats fractals) pour les deux longueur d'onde utilisées sont similaires, et on en déduit des densités d'aérosols comparables. En dessous de 80 km, ce n'est plus le cas et les densités déduites varient d'un facteur 3 à 5 en fonction de la région d'altitude. L'apport de matériau (condensat ou autres) peut altérer la forme de l'agrégat et les règles fractales utilisées pour calculer les sections efficaces ne sont plus forcément représentatives.



(a) Opacité pour trois régions d'altitudes

(b) Profil vertical de la densité d'aérosols

FIGURE 1.6 – Opacité de la brume et profil vertical de la densité d'aérosols obtenus par les données DISR, figures extraites de Tomasko et al. (2008). (a) Opacités de la brume pour trois régions d'altitudes ($z < 30\ km$; $30\ km < z < 80\ km$; $z > 80\ km$) en fonction de la longueur d'onde. (b) Profil vertical de la densité d'aérosols (estimé à partir de l'opacité).

1.2 Propriétés des nuages

L'autre particularité des aérosols provient du fait qu'ils sont de bons candidats pour produire des noyaux de condensation. Ainsi ils aident à la formation de nuages. Nous présenterons dans cette courte section les caractéristiques principales des nuages dans la troposphère de Titan (distribution spatiale, taille moyenne de gouttes, types de nuages).

Le profil de température de Titan permet la condensation du méthane. Les aérosols peuvent servir comme support à la nucléation et à la condensation, facilitant ainsi ces processus menant à la formation de nuages. Les sources de méthane sont

partiellement connues et de nombreux lacs ont été observés par la sonde Cassini (Porco et al., 2005; Stofan et al., 2007). Ces lacs sont les plus gros réservoirs disponibles à la surface et représente environ 36 cm de méthane réparti sur tout le globe (Lorenz et al., 2008). Le contenu atmosphérique est bien plus important, de l'ordre de 5 m (cf. Tokano et al., 2006). Les lacs fournissent indéniablement une source immédiate pour le cycle court³ du méthane mais ne permettent pas de résoudre le problème de la perte photochimique en ~ 20 millions d'années. Une autre source au minimum est nécessaire pour expliquer le contenu atmosphérique de méthane. Cette source, certainement épisodique n'est à ce jour pas clairement établie mais le cryovolcanisme semble être une piste privilégiée (Tobie et al., 2006; Choukroun et al., 2010).

Compte tenu de la position des sources de méthane, les nuages vont donc se former principalement dans les branches ascendantes de la circulation (typiquement aux moyennes latitudes de l'hémisphère d'été). Le volume de méthane impliqué dans la condensation étant important, les gouttes atteignent des rayons de 50 à 100 μm et de ce fait sédimentent, puis disparaissent (par évaporation ou précipitation) rapidement. Ils ont donc une durée de vie courte (de l'ordre du jour terrestre) et représentent des phénomènes sporadiques. Ces nuages, observés par le spectromètre imageur VIMS à bord de Cassini, sont de nature convective et leur sommet atteint plus de 40 km d'altitude (Griffith et al., 2005). L'altitude de leur base n'est pas clairement définie par les observations mais les modèles l'estime à environ 10 km (Rannou et al., 2006).

Le méthane n'est pas l'unique espèce connue pour condenser dans l'atmosphère. L'éthane, le plus abondant des gaz secondaires, condense aussi aux alentours de 60 km en quantité suffisante pour produire des nuages observables à courtes longueurs d'onde (Rannou et al., 2006, Griffith et al., 2006). Comme l'ensemble des gaz secondaires, les sources de C_2H_6 se situent dans la mésosphère. Ces gaz sont transportés de la stratosphère vers la troposphère en suivant la branche descendante de la circulation stratosphérique. Elles condensent dans les régions polaires en passant par le piège froid de la tropopause (Griffith et al. 2006, Rannou et al. 2006). Ces nuages ont des gouttes de taille de quelques micromètres, nettement plus petite que les nuages des moyennes latitudes, et sont plus assimilables à un brouillard (ou une bruine) permanent. Enfin, au delà de l'éthane, une grande quantité de molécules produites par la photochimie sont susceptibles de condenser. Certaines formes condensées ont été détectées essentiellement en infrarouge thermique, par CIRS, comme le C_4N_2 , le HC_3N (Anderson and Samuelson, 2011). Elles produisent trop peu de matériel condensé pour être observables en visible et proche infrarouge. Nous faisons ici une distinction entre les différentes espèces condensables (majoritaires qui plus est), mais il est fort probable que les nuages sur Titan soient composés d'une mixture de l'ensemble des espèces condensables.

Rodriguez et al. (2009) ont développé un modèle de détection semi-automatique des nuages, dans lequel le critère de séparation entre les nuages les autres contributions (surface et limbe) au spectre se base sur l'augmentation simultanée de l'intensité dans les fenêtres à 2.75 μm et 5 μm . La figure 1.7 extraite de Rodriguez et al. (2009) présente une cartographie des nuages obtenue à partir de leur traitement des

3. Le cycle court correspond à l'évaporation, la condensation et la précipitation du méthane étroitement lié à la formation des nuages dans les basses couches de l'atmosphère de Titan.

images VIMS entre 2005 et 2007, peu avant l'équinoxe de printemps Nord. Cette carte synthétise dans l'ensemble la distribution spatiale des nuages cités plus haut.

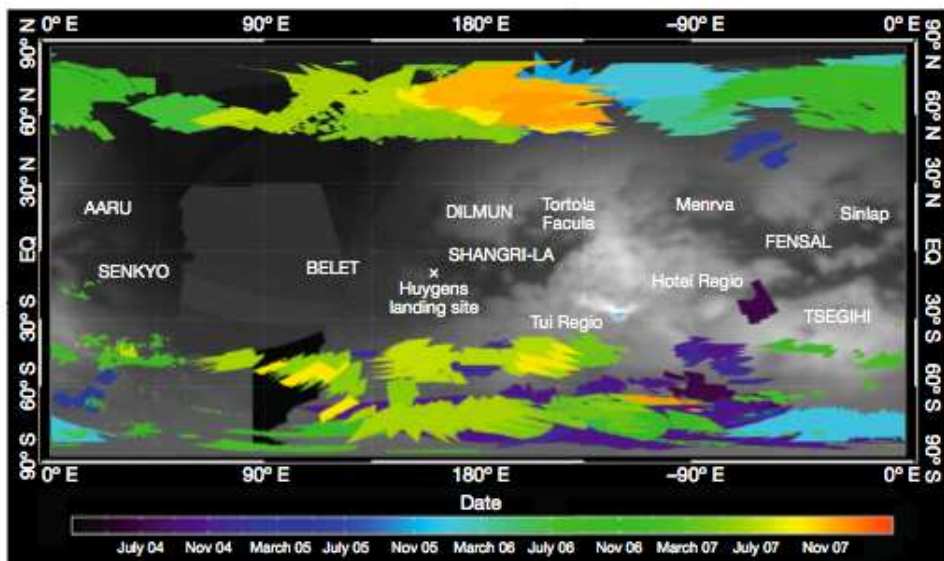


FIGURE 1.7 – Cartographie des nuages observés par VIMS avant l'équinoxe de printemps Nord. Figure extraite de [Rodriguez et al. \(2009\)](#).

1.3 Impact des aérosols et des nuages sur le climat de Titan

Dans les longueurs d'onde UV, visible et proche infrarouge (la lumière solaire) la couche d'aérosol absorbe et diffuse la lumière. Ainsi seule une dizaine de pourcent du flux solaire atteint la surface. Le premier effet net des aérosols est donc de produire un anti-effet de serre en empêchant l'énergie solaire d'arriver jusqu'à la surface. Cela se traduit, en conséquence, par un réchauffement direct des couches d'altitude où l'énergie se dépose et un refroidissement des basses couches de l'atmosphère.

En infrarouge, les aérosols et les nuages peuvent aussi avoir un impact radiatif. Les aérosols contribuent d'une part à opacifier l'atmosphère en visible et participent au blocage du flux infra-rouge thermique provenant de la surface. Les nuages ont probablement le même rôle mais leur effet doit être marginal par rapport à l'absorption des gaz dans les régions où ils se forment (troposphère essentiellement). La contribution des aérosols à l'opacité de l'atmosphère joue un rôle important sur le climat. L'effet direct des aérosols est double :

- Il diminue le flux visible à la surface (anti-effet de serre).
- Il augmente le flux infrarouge, d'une part en réchauffant l'atmosphère, et d'autre part en empêchant l'échappement du flux infrarouge de la surface (effet de serre).

Il est aussi utile de souligner que l'impact des aérosols se conçoit par rapport à une situation de référence. Il est assez difficile de s'intéresser à l'impact des aérosols par

rapport à une situation sans aérosols. En effet, ces derniers modifient en profondeur le climat par de multiples couplages, et nous aurions alors à comparer deux systèmes n'ayant que peu de choses en commun. Il est plus utile de comparer l'impact des aérosols par rapport à une situation de référence prédéfinie (fig. 1.8).

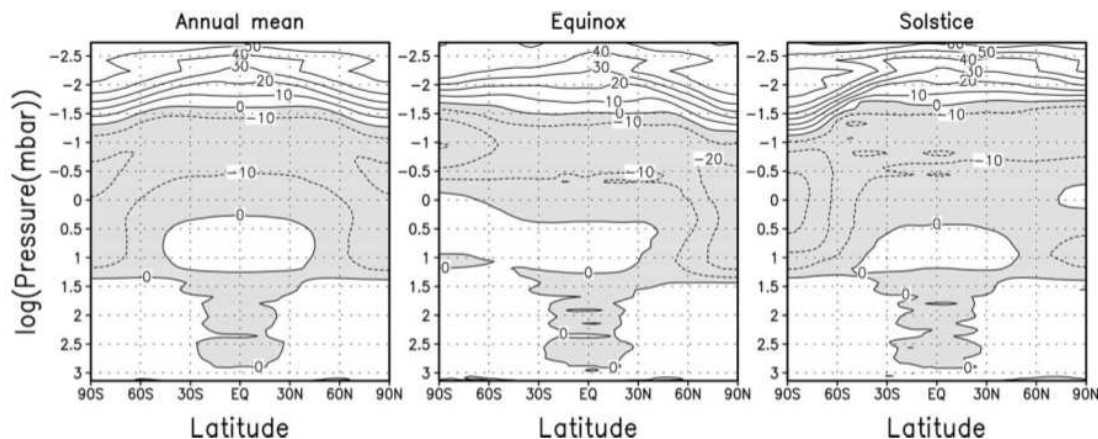


FIGURE 1.8 – Variations de température obtenue dans le Modèle de Climat Global (GCM) de l'IPSL (Rannou et al., 2004) entre un modèle non couplé (couche d'aérosols homogène et fixe) et un modèle couplé brume/dynamique. Les variations allant jusqu'à -20K dans la stratosphère illustrent bien l'importance des couplages entre les aérosols et la dynamique.

Sur Titan, la couche d'aérosols optiquement épaisse est modulée en latitude au cours de l'année. Si l'on veut saisir l'impact de ces variations, on peut prendre pour comparaison une couche homogène et fixe, correspondant à la moyenne globale annuelle. On peut par exemple effectuer un calcul sur une colonne, et modifier la quantité de brume autour d'une valeur de référence, toutes choses égales par ailleurs (fig. 1.9.a). Cela donne une idée de l'effet direct des aérosols mais n'est pas très adapté pour étudier les rétroactions. Au niveau global, il est plus difficile de définir un état de référence autour duquel étudier l'effet net des poussières. Cela suppose une bonne connaissance de l'état moyen de l'atmosphère. Sur Titan, l'opacité de la brume est bien plus faible que celle des gaz en infrarouge (McKay et al., 1989; Samuelson and Mayo, 1991; Courtin et al., 1995). Mais, la brume absorbe à des niveaux d'altitude globalement plus élevés que le gaz, et contrôle donc l'équilibre thermique de la stratosphère. La brume est l'une des composantes qui rayonne l'infrarouge vers l'espace. La variation d'un facteur 5 de l'opacité infrarouge de la brume aux pôles par rapport au reste de la planète représente peu de chose comparée à l'opacité totale de l'atmosphère. Mais, parce que cet excès de brume survient dans la nuit polaire (donc sans flux solaire incident), et dans la stratosphère, il devient un puissant radiateur infrarouge qui refroidit l'atmosphère dans la nuit polaire de façon extrêmement efficace (fig. 1.9.b).

Par rapport au cas d'une brume homogène, cela conduit à accentuer les gradients méridiens de température, ce qui finalement accentue la circulation atmosphérique en renforçant le jet stratosphérique d'hiver et en doublant la vitesse des vents (Rannou et al., 2004). Au niveau global, dans l'état actuel de Titan, une augmentation de la quantité de brume se traduit par un refroidissement des basses couches (l'anti-effet

de serre domine) et un refroidissement global de la stratosphère en dessous de 150 km (fig. 1.9a).

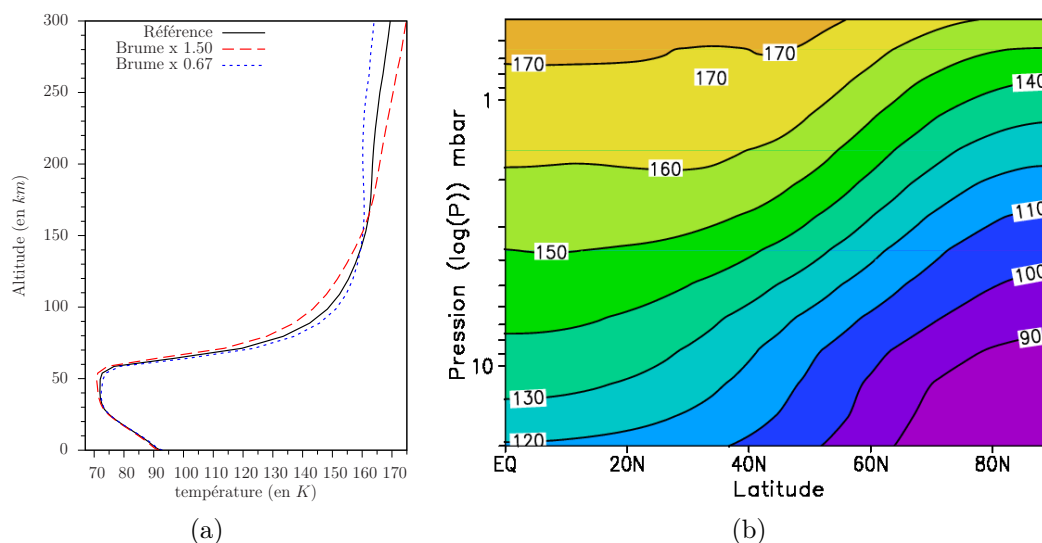


FIGURE 1.9 – A gauche : réponse de l’atmosphère à la variation d’opacité de la brume autour d’une situation de référence. L’augmentation de l’opacité entraîne une élévation du niveau $\tau(z) = 1$ qui correspond au maximum du taux de chauffage ce qui entraîne une augmentation de la température dans la stratosphère et une diminution dans la troposphère. A droite : Carte de température (latitude/altitude) dans la stratosphère issue du GCM.

Enfin, on peut noter l’effet indirect des aérosols sur le climat via la formation des nuages, puis l’effet des nuages eux-mêmes. Actuellement l’étude des nuages sur Titan en est à ses débuts et s’est essentiellement concentrée sur la nature, l’évolution et la distribution spatiale des nuages et non sur leurs possibles interactions avec le climat du satellite. Néanmoins quelques remarques peuvent être soulevées. Sur Titan, les nuages sont profondément enfouis dans la brume et sont surtout de nature sporadique. Nous parlons ici des « gros » nuages de méthane comme ceux observés aux moyennes latitudes. Dans le domaine visible, leur impact doit certainement être modéré puisque la brume produit déjà une extinction globale, permanente. En infra-rouge, ils situent dans une zone où l’opacité des gaz est déjà très importante et leur effet est probablement négligeable. Cependant, si la brume persistante existe réellement (Tokano et al., 2006), alors l’effet radiatif pourrait en revanche devenir significatif, au moins en visible.

La chaleur latente liée aux changements de phase du méthane est en revanche suffisante pour modifier localement le profil thermique. Les études théoriques le prédisaient (Lorenz et al., 2005), et l’existence de nuages convectifs sur Titan a été prouvée quelques temps plus tard par les observations (Griffith et al., 2005).

1.4 Origine et développement de la thèse

L’origine de ce projet de thèse est étroitement liée à la mise à niveau du modèle de climat global (GCM) dédié à Titan et développé de longue date à l’Institut

Pierre Simon Laplace (IPSL). Le GCM originel, développé au milieu des années 90 était en trois dimensions, mais par la suite les différents couplages mis en place ont nécessité un passage en 2D. Ce modèle dont l'historique est développé dans chapitre 5 a joué un rôle majeur dans la compréhension des mécanismes et des structures de l'atmosphère du satellite.

Depuis quelques années, ce modèle axi-symétrique montre ses limites (essentiellement car il n'est plus adapté pour servir à l'interprétation des récentes observations). Un projet a alors été initié au Laboratoire de Météorologie Dynamique (LMD) par Sébastien Lebonnois. En ce qui nous concerne ici, ce projet extrêmement ambitieux s'orientait⁴ autour d'une mise à jour complète du modèle dont notamment le retour en 3D.

L'objectif visé pour la thèse était de rendre possible l'intégration des lois microphysiques dans la nouvelle version du GCM. Usuellement, les modèles de microphysiques sont décrits à l'aide d'une grille en rayon. Ce type de représentation peut être extrêmement coûteux en temps de calcul, en particulier lorsque les lois microphysiques des aérosols et des nuages sont couplées. Cette thèse s'est donc principalement axée autour du développement d'une méthode réduisant les temps de calcul liés à la microphysique. L'idée d'employer une représentation en moments des traceurs⁵ microphysiques dans le modèle a germé suite aux discussions échangées sur le sujet avec Franck Montmessin qui avait déjà conduit une étude similaire pour l'atmosphère Martienne. Nous présentons dans ce manuscrit les développements effectués autour de cette méthode dans le cadre de Titan, ainsi que leurs applications.

Le chapitre 2 se compose de deux parties consacrées d'une part à un rappel des lois de la microphysique classique et d'autre part à la notion de granulométrie avec pour exemple les lois de distribution en taille des aérosols dans l'atmosphère de Titan. Le chapitre 3 est quant à lui entièrement dédié la mise en équations de la représentation en moments des processus microphysique. Ce travail a constitué le cœur de cette thèse. Le chapitre qui le suit traite de la modélisation et de la validation de cette méthode. Un exemple d'application dans le cadre d'un modèle 1D de Titan y est aussi présenté. Le chapitre 5 clôt ce manuscrit en présentant l'historique du GCM, deux études autour de la version axi-symétrique du GCM et enfin l'état des développements effectués autour de la nouvelle version tri-dimensionnelle du modèle.

Dans la suite du manuscrit, afin d'éviter toute confusion, nous emploierons les abréviations TGCM-2D lorsque nous traiterons de la version axisymétrique du GCM et TGCM-3D lorsque nous aurons à faire à la nouvelle version en 3D.

4. Le projet ANR Exolclimat s'est officiellement terminé en août 2011.

5. Un traceur correspond à une variable d'intérêt qui est suivie tout au long des processus dans un modèle numérique. A titre d'exemple, la concentration d'aérosols est un traceur microphysique dans le GCM.

CHAPITRE 2

Microphysique Classique

Sommaire

2.1	Distribution en taille des aérosols et des particules de nuages	16
2.1.1	Notions de granulométrie : loi de distribution	16
2.1.2	Lois de distribution en taille sur Titan	17
2.1.3	Cas des modèles 1D	21
2.1.4	Distribution en taille des particules de nuages	22
2.1.5	Ajustement de la loi de distribution	24
2.2	Régime d'écoulement	27
2.3	Microphysique des aérosols	28
2.3.1	Sédimentation	29
2.3.2	Coagulation	31
2.4	Microphysique des nuages	33
2.4.1	Energie de formation d'une goutte	34
2.4.2	Nucléation	35
2.4.3	Condensation	37

Ce chapitre traite de manière générale la théorie de la microphysique classique dans le contexte particulier de l'atmosphère de Titan. Les quatre processus (coagulation, sédimentation, nucléation et condensation) mis en jeu y seront décrits et les équations qui en découlent serviront de base au développement de la méthode en moments présentée dans le chapitre 3. Nous ne détaillerons pas toutes les équations décrivant ces lois qui sont très bien documentées dans la littérature dont nous citons dès à présent les ouvrages de références : [Fuchs \(1964\)](#) pour la microphysique des aérosols et [Pruppacher and Klett \(1978\)](#) pour la microphysique des nuages.

Nous porterons plus spécifiquement notre attention sur la modification de ces équations due à la nature fractale des aérosols de Titan dont l'ensemble a été décrit et modélisé par [Cabane et al. \(1993\)](#). De plus, en introduction au chapitre 3 consacré à la méthode des moments, nous présenterons les équations de manière à exprimer explicitement le rayon des particules qui est une des variables les plus importantes de la mise en équation de cette méthode.

2.1 Distribution en taille des aérosols et des particules de nuages

Lorsque l'on s'intéresse aux aérosols et aux processus microphysiques qui leurs sont associés, il est nécessaire de présenter leur granulométrie. La granulométrie représente la mesure en taille d'une population de particules. Il est en effet difficile de concevoir qu'une seule taille unique d'aérosol existe dans l'atmosphère. Cette hypothèse paraît de plus en plus absurde dès lors que l'on traite des processus microphysiques. Le phénomène de coagulation est certainement la première évidence de la présence d'une granulométrie des aérosols, mais la quasi-totalité de la microphysique (coalescence, interaction aérosols-nuages par le biais de la nucléation ou de l'évaporation) tend à créer, ou altérer, la distribution en taille des particules. Par la suite, la dynamique atmosphérique joue aussi un rôle. Si elle ne permet pas la création de nouvelles tailles de particules, elle peut modifier la forme d'une distribution.

2.1.1 Notions de granulométrie : loi de distribution

La granulométrie a un caractère continu : Dans la nature, il n'existe pas de taille définie, ou encore discrète, de particule. On appelle loi de distribution en taille, $n(r)$, la fonction du rayon de la particule correspondant à la densité de population des particules. La concentration totale de particules N_0 s'obtient en intégrant $n(r)$ sur \mathbb{R}_+ :

$$N_0 = \int_0^{+\infty} n(r) \, dr \quad (2.1)$$

N correspond généralement à une concentration¹ (ou un nombre) de particules. Les unités physiques de $n(r)$ sont donc en $m^{-3}.m^{-1}$ (respectivement m^{-1}). La concentration d'aérosols dont le rayon est compris entre r et $r + dr$ correspond, quant à elle, à l'intégrale :

$$N(r, r + dr) = \int_r^{r+dr} n(r) \, dr \quad (2.2)$$

La forme (analytique) de la loi de distribution, $n(r)$, dépend essentiellement du système étudié. Il n'existe pas de fonction universelle de la loi de distribution. Néanmoins, certaines fonctions analytiques sont couramment employées pour représenter la distribution en taille des aérosols. Nous citerons ici deux exemples les plus utilisés, pour lesquels la loi est normalisée tel que $\int_0^{+\infty} n(r)dr = 1$ (figure 2.1) :

La *loi log-normale* est très utilisée dans les études sur les aérosols terrestres. On l'utilise aussi sur Mars ou Vénus. Son expression est :

$$n(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_0 r} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\ln(r/r_0)}{\sigma_0} \right)^2 \right] \quad (2.3)$$

Où r_0 représente le rayon moyen, σ_0 « l'écart type » de la distribution et $\frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_0}$ est un facteur de normalisation.

1. Par la suite, et pour éviter toute confusion, nous ne traiterons que des concentrations dans les exemples.

La *loi Gamma* est une loi de distribution pratique qui permet de représenter un grand nombre de distributions naturelles grâce à des paramètres ajustables.

$$n(r) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \left(\frac{r}{r_n}\right)^{\nu-1} \frac{1}{r_n} \exp\left(-\frac{r}{r_n}\right) \quad (2.4)$$

Où ν représente un paramètre de forme ($\nu \geq 1$) qui contrôle la quantité de petites particules par rapport aux plus grosses, $\frac{1}{\Gamma(\nu)}$ est un facteur de normalisation et r_n est un rayon caractéristique lié au rayon modal de la distribution par la relation $r_{modal} = (\nu - 1) r_n$.

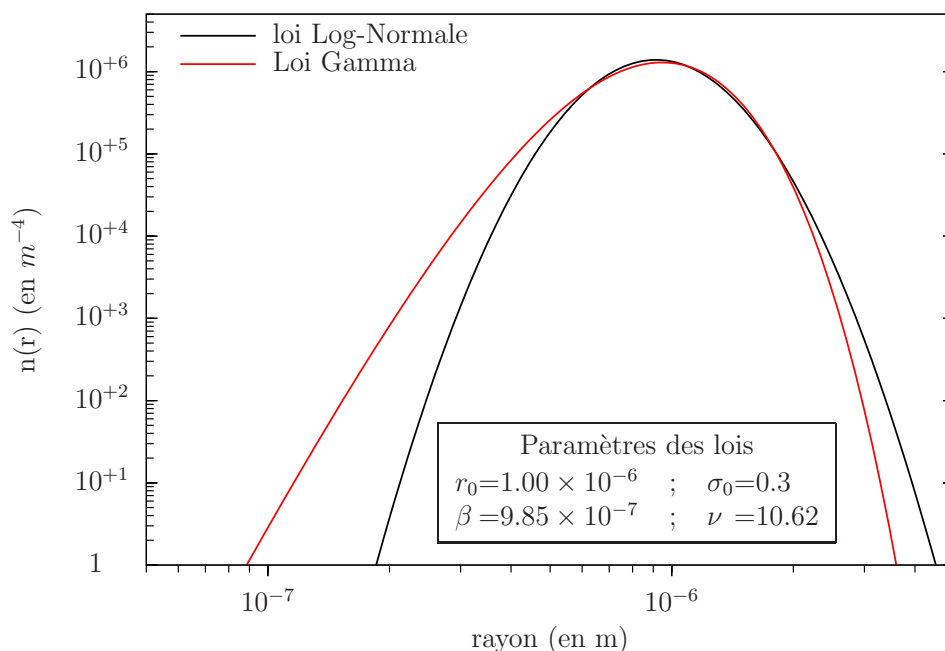


FIGURE 2.1 – Forme des lois de distribution Log-Normale (en noir) et Gamma. Les paramètres renseignés sur la figure ont été calculés de sorte que les deux lois ont exactement le même rayon moyen et la même variance.

Ces fonctions sont très utilisées car elles représentent généralement bien les populations d'aérosols. Elles présentent surtout certaines propriétés analytiques, dont notamment une formulation analytique de leur intégration (sur \mathbb{R}), qui facilitent leur utilisation dans les modèles.

2.1.2 Lois de distribution en taille sur Titan

Aucune étude directe de la granulométrie a pu être menée dans l'atmosphère de Titan. Dès lors, les modèles microphysiques doivent prendre le relai afin de contraindre la distribution en taille des aérosols. Le TGCM-2D de l'IPSL produit une granulométrie des aérosols à l'aide de son modèle microphysique de brume et de nuages couplé (Cabane et al., 1993; Rannou et al., 2004).

Dans le modèle, les aérosols sont décrits en taille à l'aide d'une grille de rayon (d'après Toon et al., 1988). La valeur initiale du rayon correspond à des particules

de taille nanométrique. La grille est ensuite construite en appliquant un facteur de volume constant V_{rat} entre chaque case (éq. 2.5). Les largeurs de case sont construites en supposant que chaque case est centrée en volume (éq. 2.6) :

$$r_1 = 1.64 \times 10^{-9} \text{ m}$$

$$r_{i+1} = r_1 \times V_{rat}^{i/3} \quad (2.5)$$

$$dr_i = \left[\left(\frac{2V_{rat}}{V_{rat} - 1} \right)^{1/3} - \left(\frac{2}{V_{rat} - 1} \right)^{1/3} \right] r_i \quad (2.6)$$

Le modèle initialise la grille de rayon avec un facteur de volume de $V_{rat} = 16$ et un total de 10 cases ce qui permet de couvrir une gamme de rayon comprise entre $r_1 = 1.64 \times 10^{-9} \text{ m}$ et $r_{10} = 6.71 \times 10^{-6} \text{ m}$. D'après Rannou et al. (2004), ce paramétrage constitue la grille minimale nécessaire pour d'une part reproduire correctement l'albédo géométrique de Titan et d'autre part rester stable vis à vis des lois microphysiques. Nous verrons néanmoins que cette grille n'est pas suffisamment large pour contenir l'ensemble de la distribution.

Sur Titan, la loi de distribution dépend fortement de l'altitude. La figure 2.2 montre les deux types principaux de loi de distribution obtenus par le GCM. A haute altitude (vers 500 km), la distribution est polydispersée et assimilable analytiquement à une loi de puissance en rayon, $n(r) \propto r^\alpha$ (fig. 2.2a). Dans la couche principale la distribution est de forme modale (fonction en « cloche »). Cette loi n'est pas symétrique autour d'un rayon caractéristique et les « grosses particules² » sont en proportion plus importante que les petites.

Le GCM permet aussi d'obtenir l'évolution de la distribution en altitude ainsi qu'en latitude. Les processus microphysiques sont en majeure partie responsables de l'altération de la distribution. Nous présentons ici les effets de ces processus que l'on peut voir sur les figures 2.2.c et 2.2.d. Ces processus seront décrit plus en détails dans la suite de ce chapitre :

- La coagulation, favorisant la collection des petites particules par les plus grosses, est le processus responsable de la disparation progressive des petits aérosols ($r \lesssim r_m$).
- La vitesse de sédimentation des aérosols fractals dépend du nombre de Knudsen³ et de leur dimension fractale ($D_f = 2$ dans le TGCM-2D). En régime hydrodynamique ($Kn \ll 1$), pour $D_f = 2$, la vitesse de ces aérosols est proportionnelle au produit $r_m \times r_a$ (r_m : rayon du monomère; r_a : rayon apparent de l'aérosol). En régime moléculaire ($Kn \gg 1$), avec toujours la même condition sur D_f , leur vitesse est uniquement proportionnelle à r_m . On comprend alors que les aérosols fractals les plus gros vont commencer à tomber plus vite dès le changement de régime qui se produit aux alentours de 100 km. C'est pourquoi, dans la basse stratosphère et surtout dans la troposphère, la sédimentation est en majeure partie responsable du changement de pente (moyenne) pour les aérosols fractals.

2. On entend ici (et par la suite) par grosses particules, les tailles supérieures à celle du monomère ($r_m = 0.06 \mu\text{m}$ dans le GCM).

3. $Kn = \frac{\lambda}{r}$. Où λ est le libre parcours moyen et r le rayon de la particule.

- L'interaction entre la brume et les nuages est aussi un facteur de déformation de la distribution mais qui, dans le modèle, semble agir préférentiellement sur certaines cases de la distribution (voir la figure 2.2.d).

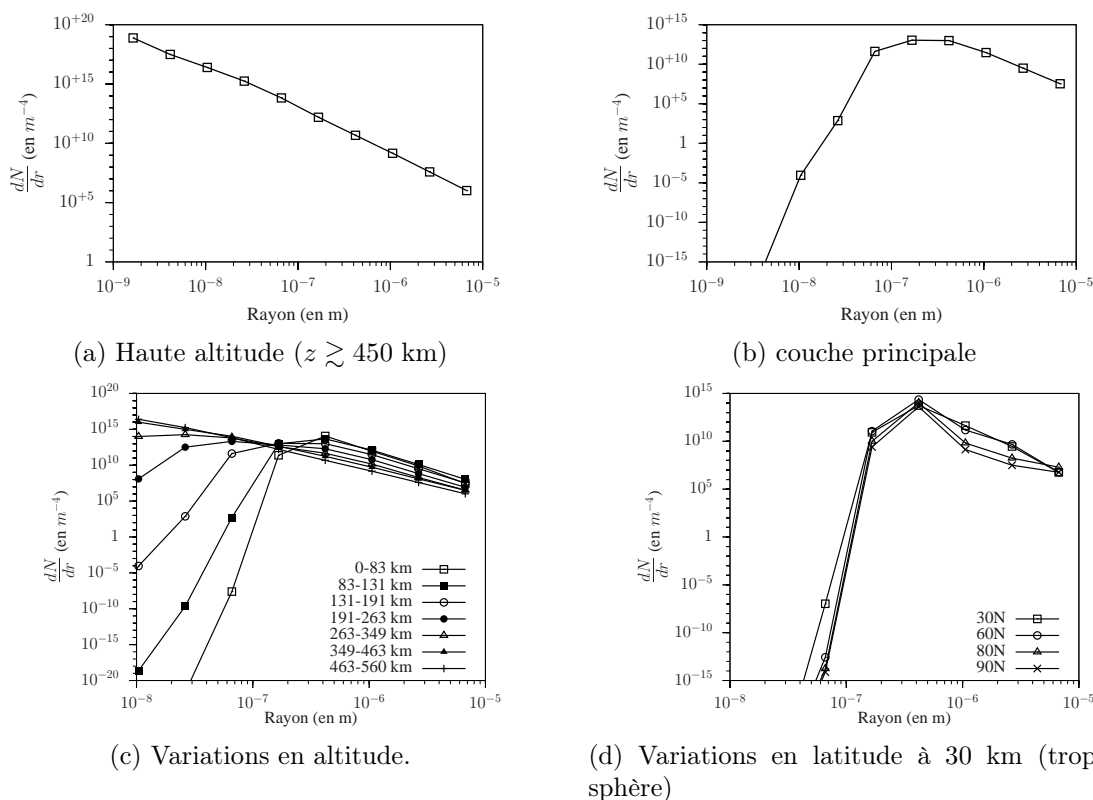


FIGURE 2.2 – Lois de distribution des aérosols (en $m^{-3}.m^{-1}$) extraites du TGCM-2D. Les figures (a) et (b) représentent la distribution respectivement à haute altitude (au dessus de 450 km) et dans la couche principale (moyenne entre 130 km et 200 km). Les figures (c) et (d) montrent respectivement l'altération en altitude et en latitude de la distribution d'aérosols.

Il est intéressant de noter qu'aucune des distributions tracées ici (fig. 2.2) ne présentent de seuil maximum sur la grille de rayon du modèle. Prenons le cas de la figure 2.2.b, la queue de distribution peut être représentée par une fonction du type :

$$n(r) = \exp(\alpha \ln(r) + C) \propto r^\alpha \quad (2.7)$$

Cette loi de puissance correspond à une droite de pente de α dans l'espace logarithmique. En moyenne dans la couche principale, pour $r \gtrsim 1\mu m$, α est de l'ordre de -5 . Si l'on extrapole la loi de distribution en dehors de la grille de rayons avec cette fonction, on s'aperçoit que la densité de population pour de très grosses particules est non négligeable.

En réalité, il doit exister un rayon maximum au delà duquel la concentration de particules peut être considérée négligeable (voire nulle). En élargissant la grille en rayon du GCM, il est possible de déterminer ce rayon. Pour effectuer ces simulations, le nombre de cases a été augmenté à 40, ce qui permet de choisir un facteur de volume suffisamment petit ($V_{rat} = 3.4$) pour ne pas dégrader le modèle. La grille ainsi élargie permet de couvrir une gamme de rayon allant jusqu'au centimètre.

Dans le modèle certains aspects de la microphysique sont gérés par des paramètres libres qui sont susceptibles d'altérer les loi de distribution. Ces paramètres et leur effets seront décrits plus en détails dans les sections suivantes. Nous les présentons donc ici succinctement et renvoyons le lecteur aux sections les décrivant dans le manuscrit :

- La charge électrique des aérosols modifie l'efficacité de coagulation de ces derniers. Son effet est représenté par une fonction du rayon apparent de l'aérosol (r_a) faisant intervenir la loi de charge de l'aérosol :

$$q = \frac{n_{e^-} q_{e^-}}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \times r_a$$

Où q_{e^-} est la charge d'un électron et ϵ_0 est la permittivité du vide. n_{e^-} représente quant à lui le nombre d'électron par mètre d'aérosol. Ce paramètre n'est pas vraiment contraint sur Titan et devient un paramètre libre des modèles. De manière générale, plus la charge électrique est importante et plus l'efficacité de coagulation est réduite ce qui entraîne une diminution de la proportion des larges particules dans la population. La correction électrique est présentée plus en détail dans la section 2.3.2 (page 32) dédiée à la coagulation brownienne des aérosols.

- La mouillabilité est un paramètre associé à la microphysique des nuages et plus précisément au processus de nucléation. Ce paramètre correspond au cosinus de l'angle de contact entre l'embryon et le noyau, $\cos \theta$. Il affecte principalement la capacité des aérosols à devenir des noyaux de nucléation. Plus la mouillabilité est élevée est plus les aérosols seront utilisés comme support à la nucléation. Dans le modèle, ces aérosols ne seront donc plus comptabilisés comme tel ce qui tend à modifier leur distribution en taille. On se référera à la section 2.4.2 (page 36) pour une description plus détaillée de la mouillabilité et de son impact sur la nucléation.
- La dimension fractale des aérosols, D_f , affecte la quasi-totalité des processus microphysique et donc la coagulation et la sédimentation des aérosols qui sont les principaux processus responsables de l'altération de la loi de distribution (voir plus haut).

L'extension de la grille permet de faire apparaitre une nouvelle queue de distribution dont la pente moyenne est bien plus importante (figure 2.3) : Au delà de $r \sim 10^{-4} m$, la pente de la queue de distribution (dans la couche principale), $\beta = d \ln(n(r)) / d \ln(r)$, décroît rapidement pour atteindre des valeurs de l'ordre de -30 pour $r \gtrsim 5 \cdot 10^{-3} m$. On définit le rayon seuil r_{seuil} comme le rayon correspondant à l'intersection entre les droites de pentes α et β . La table 2.1 recense les tests effectués sur ces paramètres ainsi que le rayon seuil obtenu pour la distribution moyenne dans la troposphère. Il résulte de ces tests que le rayon seuil dépend essentiellement de la dimension fractale des aérosols. L'augmentation de la charge électrique affecte relativement peu le seuil de la distribution mais altère globalement sa forme en décalant le rayon modal vers les petits rayons. La mouillabilité impacte peu le seuil ($|\Delta r_{seuil} / r_{seuil}| \sim 2\%$) sur la distribution moyenne, car son effet reste local dans les zones d'activité nuageuse. Cependant, même dans ces zones, l'effet de la mouillabilité reste faible comparé à l'impact de la dimension fractale.

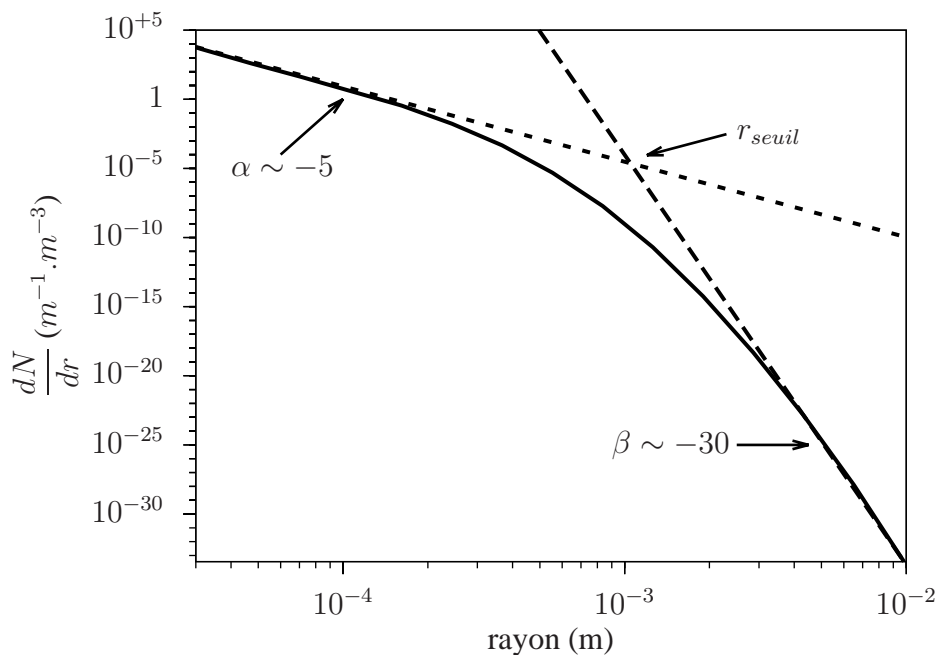


FIGURE 2.3 – Queue de la loi de distribution moyenne dans la troposphère pour le modèle de référence (voir table 2.1). On retrouve la pente $\alpha \sim -5$ pour $r \in [10^{-5}; 10^{-4}]$. L’extension de la grille fait apparaître une nouvelle pente $\beta \sim -30$.

2.1.3 Cas des modèles 1D

L’impact de la circulation sur la forme de la distribution peut être observé en comparant les lois issues du TGCM-2D à celle que l’on obtient par le biais d’un modèle à 1D. Le transport des aérosols effectué par la circulation se fait sans discrimination de taille ce qui augmente le temps de résidence des aérosols fractals dans l’atmosphère. Les modèles 1D, quant à eux, tiennent compte au mieux d’un processus de diffusion verticale pour représenter les effets de la dynamique à grande échelle ce qui a tendance à sous-estimer la population des larges particules dans la distribution.

Nous avons effectué des simulations avec un modèle 1D et nous avons pu directement comparer les formes des lois distributions résultantes. Pour chaque modèle, des distributions sont extraites pour une gamme d’altitude couvrant la troposphère. Puis, elles sont translatées de manière à obtenir le même rayon modal. Enfin, elles

$\cos \theta$	D_f	n_{e^-} (en $e^- \cdot \mu m^{-1}$)	r_{seuil} (en m)
0.97	2	-15	1.049×10^{-3}
0.97	2	-30	1.040×10^{-3}
0.97	2	-60	1.037×10^{-3}
0.92	2	-15	1.027×10^{-3}
0.97	2.1	-15	7.633×10^{-4}

TABLE 2.1 – Modifications des paramètres susceptibles d’altérer la distribution et rayon seuil correspondant à la distribution moyenne dans la troposphère.

sont normalisées de sorte que $\int_0^\infty n(r)dr = 1$. La figure 2.4 présente les lois de distribution résultantes pour les deux types de modèle.

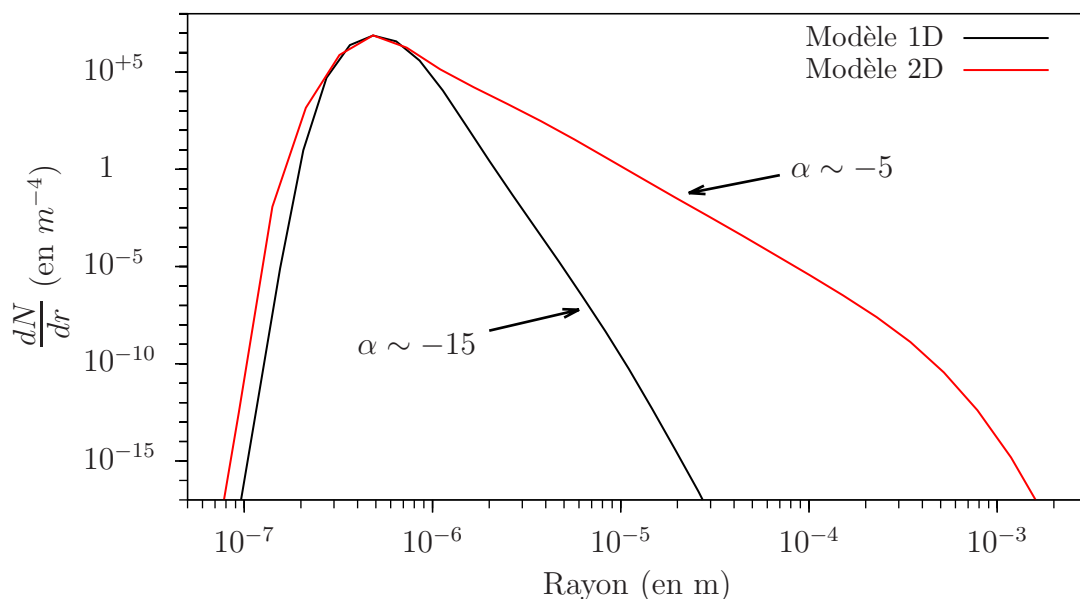


FIGURE 2.4 – Comparaison de lois de distribution issues d'un modèle 1D et du TGCM-2D. La grille en rayons est étendue ici afin de présenter aussi le cut-off de la loi de distribution du modèle 2D.

On peut y voir clairement l'effet de l'advection des aérosols par la circulation sur la queue de distribution : Si on approxime à nouveau cette dernière par l'équation 2.7, la pente α est de l'ordre de -15 dans la troposphère pour les modèles 1D. Par souci de simplicité, dans la suite du manuscrit, nous nommerons *loi Titan-1D* la fonction analytique représentant la loi de distribution en taille dérivée du modèle 1D.

2.1.4 Distribution en taille des particules de nuages

Les simulations du GCM permettent aussi, dans une moindre mesure d'analyser la loi de distribution en taille des gouttes. Le modèle donne accès au nombre de noyaux de condensation, ΔN_i^{noy} , ainsi qu'au volume, V_i^χ , de chaque condensat ($\chi = CH_4, C_2H_6$ ou C_2H_2) disponibles pour chaque case, r_i , de la grille de rayon. Il est dès lors possible d'estimer la taille correspondante des gouttes.

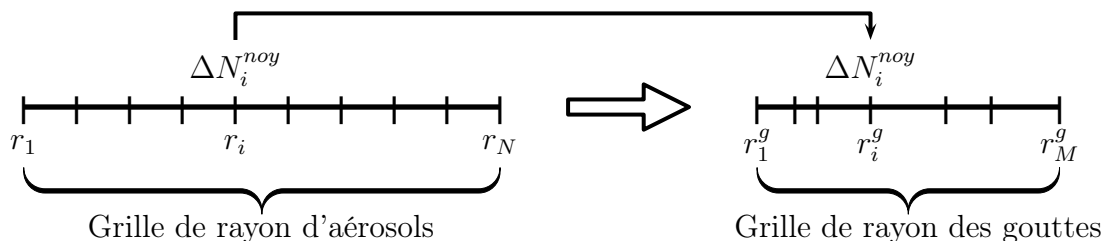
La grille fixe obtenue n'étant pas régulière, il n'est pas possible d'obtenir directement la loi de distribution en taille des gouttes. Néanmoins, il est toujours possible de calculer le rayon moyen, \bar{r} , et l'écart-type, σ , associés à cette distribution :

$$\bar{r} = \frac{\sum_i \Delta N_i^{noy} r_i^g}{\sum_i \Delta N_i^{noy}} \quad (2.8)$$

$$\sigma = \frac{\sum_i (r_i^g - \bar{r})^2 \Delta N_i^{noy}}{\sum_i \Delta N_i^{noy}} \quad (2.9)$$

$$V_i^g = \frac{1}{\Delta N_i^{noy}} \left(\sum_j V_i^{Xj} + \frac{4}{3}\pi \Delta N_i^{noy} r_i^3 \right)$$

$$r_i^g = \left(\frac{3}{4\pi} \times V_i^g \right)^{1/3}$$



Les nuages, comme la brume, évoluent au cours de l'année. Les nuages sont de plus, des structures éphémères. Dans le modèle, on peut globalement séparer les zones d'activités nuageuses en deux parties : la basse troposphère ($z \lesssim 20 \text{ km}$) et la haute troposphère ($z \gtrsim 20 \text{ km}$). La table 2.2 présente les valeurs moyennes⁴ de \bar{r} et σ pour ces deux régions.

	$\cos \theta$	\bar{r} (μm)	σ (μm)
Basse troposphère	0.92	13	0.06
	0.97	4	0.04
Haute troposphère	0.92	1.6	0.06
	0.97	1.7	0.08

TABLE 2.2 – Valeurs moyennes du rayon moyen, \bar{r} , et de l'écart type, σ , de la distribution en taille des gouttes dans la troposphère pour deux valeurs de la mouillabilité ($\cos \theta$).

Les valeurs dans la basse troposphère sont plus faibles que celle attendues, ($\bar{r} \sim 50 - 100 \mu\text{m}$), car ces tailles de gouttes sont associés à des événements sporadiques (présent aussi dans le modèle) que la statistique utilisée ici ne permet pas d'obtenir.

Globalement, l'écart type des distributions est d'environ 1 à 10 % la valeur du rayon moyen et les tailles de gouttes sont donc très peu dispersées autour de ce rayon moyen. Ces distributions étroites justifient les simplifications effectuées dans le GCM. Par exemple dans le modèle, la sédimentation des nuages s'effectue pour une taille moyenne de goutte (éq. 2.8), il en va de même pour le calcul des propriétés optiques des nuages.

4. Pour chacune des régions citées, ces moyennes sont effectuées aux moyennes latitudes et sur une année.

2.1.5 Ajustement de la loi de distribution

Avant de conclure cette section sur la granulométrie, intéressons nous une dernière fois à la distribution des aérosols. Nous avons présenté en début de section 2.1.1, deux fonctions généralement utilisées pour décrire les lois de distribution en taille dans les modèles numériques. Malheureusement, ces deux lois de distribution ne sont pas très utiles dans le cas de Titan et ne permettent pas d'ajuster la forme de la distribution.

On a vu que l'équation 2.7 permettait, sur un intervalle restreint de rayons, de représenter la distribution (voir figure 2.3). On peut étendre ce concept sur différents segments de l'intervalle de rayons et ainsi obtenir une fonction équivalente à une combinaison de lois de puissance décrivant la loi de distribution.

$$n(r) \approx f(r) = \frac{C_0}{\sum_{i=1}^{\nu} A_i \times \left(\frac{r}{r_c}\right)^{-B_i}} \quad (2.10)$$

où C_0 est un facteur de normalisation tel que $\int_0^{\infty} f(r)dr = 1$; A_i sont des paramètres d'ajustement et B_i les puissances de chaque loi; enfin r_c est un rayon caractéristique de la fonction f .

L'intérêt de cette fonction est d'obtenir pour un rayon donné, le minimum de l'ensemble des lois de puissance utilisées. Dans l'espace logarithmique, les pentes B_i associées à chaque loi de puissance ne peuvent que décroître avec l'augmentation du rayon, ce qui impose la règle suivante : $B_i > B_{i+1}$.

Cette fonction est assez flexible pour représenter la loi de distribution partout dans l'atmosphère. Le degré d'ajustement dépendra du nombre de lois de puissance utilisées dans la fonction f . A haute altitude (au delà de 450 km), on pourrait se contenter d'utiliser une seule loi de puissance ($\nu = 1$)⁵ tandis qu'une combinaison d'au moins quatre lois de puissance est nécessaire pour l'ajustement dans la couche principale (voir figure 2.2). En contrepartie, plus le nombre de lois de puissance utilisées est important et plus le nombre de paramètres à ajuster est important ($2\nu + 2$).

Afin de trouver ces paramètres, nous construisons d'abord un jeu de données à partir des distributions dans la troposphère et issues des sorties du GCM pour un état convergé⁶. L'ensemble de ces distributions est translaté en rayon et ajusté en nombre afin d'obtenir pour un même rayon modal (r_{modal}), une valeur unique de $n(r_{modal})$. Enfin nous cherchons à minimiser le carré de l'écart relatif entre la fonction analytique et cette distribution par une méthode de moindre carré (algorithme de Levenberg-Marquardt). L'ajustement de cette fonction est présentée sur la figure 2.5 et les paramètres associés (meilleur ajustement) sont donnés dans la table 2.3. L'ajustement montre de manière générale un bon accord avec la loi de distribution sur le domaine d'intérêt en rayons.

5. Nous verrons dans le chapitre 3, qu'une telle représentation de la loi de distribution n'est pas suffisante pour décrire les lois de la microphysique en moments.

6. Ces distributions sont donc représentatives d'un état stationnaire et les variations de la loi auxquelles on peut s'attendre sont uniquement liées aux interactions brume/nuages.

Par soucis de simplicité, dans la suite du manuscrit, nous nommerons *loi Titan-2D* cette fonction analytique représentant la loi de distribution en taille dérivée du TGCM-2D.

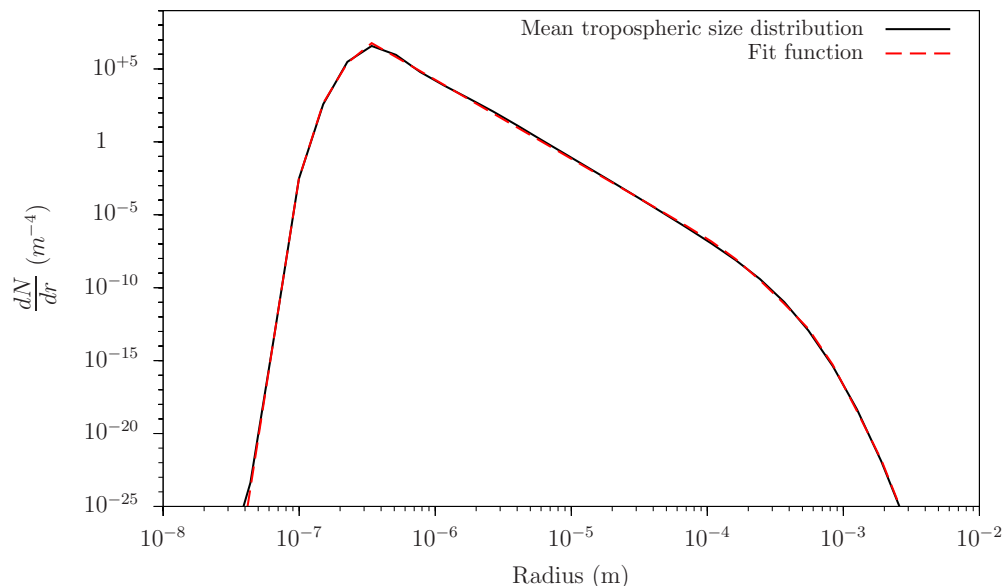


FIGURE 2.5 – Ajustement de la loi de distribution moyenne dans la troposphère extraite du TGCM-2D (en noir) par une combinaison de lois de puissance (en rouge) décrite par l'équation 2.10 avec $n = 6$. Le seuil en densité de distribution (dn/dr) a volontairement été forcé à des très faibles valeurs pour faire apparaître le « cut-off » des grands rayons.

Paramètres de la fonction de distribution (modèle 2D)	
$C_0 = 2.122 \times 10^{-3}$	$r_C = 4.582 \times 10^{-7} \text{ m}$
$A_1 = 2.483 \times 10^{-40}$	$B_1 = 59.518$
$A_2 = 1.460 \times 10^{-13}$	$B_2 = 15.508$
$A_3 = 1.715 \times 10^{-9}$	$B_3 = -5.418$
$A_4 = 1.808 \times 10^{-19}$	$B_4 = -9.350$
$A_5 = 1.482 \times 10^{-47}$	$B_5 = -18.208$
$A_6 = 6.872 \times 10^{-81}$	$B_6 = -27.249$

TABLE 2.3 – Ensemble des paramètres du meilleur ajustement pour la loi de distribution moyenne dans la troposphère extraite du TGCM-2D.

Nous présentons par la même occasion, l'ajustement effectué pour la loi de distribution du modèle 1D qui nous a servi à valider la méthode de moments développée dans le chapitre suivant (figure 2.6, table 2.4). L'ajustement est basé sur le même schéma que celui décrit pour la version 2D. Seul le nombre choisi de lois de puissance est changé car cette fonction ne présente pas de cut-off (voir figure 2.4).

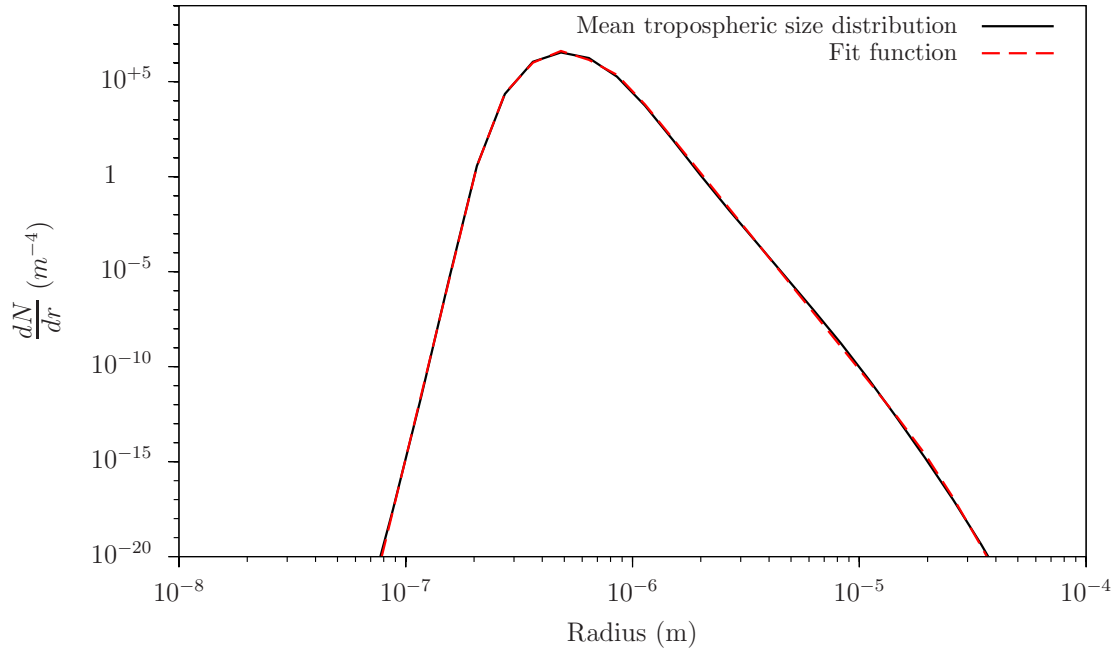


FIGURE 2.6 – Ajustement de la loi de distribution moyenne dans la troposphère extraite du modèle 1D (en noir) par une combinaison de lois de puissance (en rouge) décrite par l'équation 2.10 avec $n = 5$.

Paramètres de la fonction de distribution (modèle 1D)	
$C_0 = 1.023 \times 10^{+6}$	$r_C = 4.478 \times 10^{-7} \text{ m}$
$A_1 = 9.046 \times 10^{-12}$	$B_1 = 48.950$
$A_2 = 6.028 \times 10^{-2}$	$B_2 = 13.291$
$A_3 = 1.669 \times 10^{-1}$	$B_3 = -3.967$
$A_4 = 1.670 \times 10^{-4}$	$B_4 = -14.780$
$A_5 = 8.708 \times 10^{-16}$	$B_5 = -21.477$

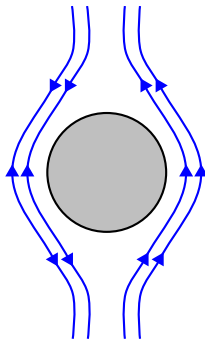
TABLE 2.4 – Ensemble des paramètres du meilleur ajustement pour la loi de distribution moyenne dans la troposphère extraite du modèle 1D.

2.2 Régime d'écoulement

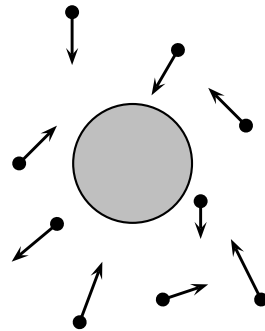
L'expression des lois microphysiques dépend du régime d'écoulement dans lequel évolue la population de particules étudiée. On distingue deux régimes particuliers d'écoulement que l'on déduit du nombre de Knudsen, $Kn = \lambda_g/r_p$ correspondant au rapport du libre parcours moyen⁷ des molécules dans l'atmosphère (λ_g) sur le rayon de l'aérosol (r_p).

La figure 2.7 schématise les interactions entre une particule (aérosol ou goutte par exemple) et son environnement gazeux proche pour ces deux régimes d'écoulements :

1. En Régime hydrodynamique ($Kn \ll 1$), le gaz environnant la particule forme des lignes de courant (trait bleu) et se présente comme un fluide autour de la particule.
2. En régime Moléculaire ($Kn \gg 1$), les molécules du gaz ont un libre parcours moyen bien plus grand que la taille de la particule et peuvent « impacter » cette dernière. Les interactions particule-gaz sont traitées de manière balistique.



a) Régime hydrodynamique



b) Régime moléculaire

FIGURE 2.7 – Schéma des deux régimes d'écoulement autour d'une particule en fonction du nombre de Knudsen.

Un troisième régime transitoire relie les deux cas extrêmes du régime d'écoulement. Si pour ces derniers, les lois microphysiques sont bien connues, il n'existe aucune théorie explicite pour le régime transitoire. Néanmoins, certaines études ont permis de déterminer des corrections empiriques à adopter pour décrire les lois microphysiques dans ce régime de transition et « coller » à la réalité. La plus connue de ces corrections est certainement celle de Cunningham-Millikan (Millikan, 1923) permettant d'ajuster la vitesse de sédimentation des aérosols à partir de son expression dans le régime continu.

Compte tenu de la large gamme de rayon couverte par la loi de distribution, les trois régimes que nous venons de présenter se retrouvent sur les 500 premiers kilomètres de l'atmosphère de Titan. L'ensemble des lois microphysiques doit donc tenir compte des corrections du régime transitoire. Nous verrons dans le chapitre 3 que

7. Le libre parcours moyen est comparable à la distance moyenne parcourue avant que la particule ne change de direction.

ce régime transitoire est bien souvent un obstacle au développement des équations d'évolution des aérosols en moments.

2.3 Microphysique des aérosols

L'évolution des aérosols dans l'atmosphère est soumise à différents processus que l'on se propose de décrire ici. L'équation qui régit l'évolution des aérosols dans l'atmosphère s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{d}{dt}C(r, z) = Q(r, z) + \left. \frac{d}{dt}C(r, z) \right|_{\text{sédimentation}} + \left. \frac{d}{dt}C(r, z) \right|_{\text{collection}} \quad (2.11)$$

où $C(r, z)$ est la concentration en particule de rayon r à l'altitude z . Cette équation peut se séparer en trois principales parties :

- (1) $Q(r, z)$ correspond à la fonction de production de particules.
- (2) $\left. \frac{d}{dt}C(r, z) \right|_{\text{séd.}}$ représente l'évolution de la concentration sous l'effet de la sédimentation.
- (3) $\left. \frac{d}{dt}C(r, z) \right|_{\text{collection}}$ représente l'évolution des aérosols sous l'effet des processus de collection (changement de taille des particules).

Le terme (1) correspond à un gain de particules pour la distribution à une altitude donnée. Dans le TGCM, cette fonction s'applique uniquement à la première case de rayon et elle est représentée par une loi Gaussienne :

$$Q(z) = Q_0 \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{z - z_0}{\Delta z} \right)^2 \right]$$

Où Q_0 est le taux de production des aérosols ($kg.m^{-2}.s^{-1}$), z_0 , l'altitude de production et Δz , la largeur de la zone de production des aérosols.

Les termes (2) et (3) correspondent aux gains et aux pertes de particules de taille r à l'altitude z . Ces gains et pertes par transport d'une part et par collection de matière d'autre part correspondent respectivement à un changement d'altitude et à un changement de rayon.

Nous allons décrire plus en détails certains de ces termes qui font partie des lois de la microphysique. Ces processus physiques dépendent principalement des conditions atmosphériques (pression, température, composition locale) mais aussi des aérosols eux-mêmes et de leurs propriétés dont notamment la dimension fractale D_f .

Afin de présenter les équations dans un cadre général et de ne pas les alourdir inutilement, les deux variables r_a et r_v seront utilisées pour définir le rayon de l'aérosol⁸ :

- Si le rayon fait référence à une expression du volume de l'aérosol, la variable r_v correspondant au rayon du volume de la sphère équivalente sera utilisé.

8. Pour rappel, les relations entre r_a et r_v sont décrites dans le chapitre 1, page 8.

- Si le rayon fait référence à une expression de la surface de l'aérosol, nous utiliserons le variable r_a correspondant au rayon apparent de l'aérosol.

Lorsque les variables r_a ou r_v ne sont pas employé, le rayon fera toujours référence à r_v .

2.3.1 Sédimentation

L'évolution d'une population d'aérosol sous l'effet de la sédimentation peut s'exprimer à travers l'équation de conservation :

$$\frac{\partial}{\partial t} C(r, z) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{\Phi}_{sed} = -\frac{d}{dz} \left(C(r, z) \times \omega(r, z) \right)$$

Où $C(r, z)$ représente la concentration des aérosols, Φ_{sed} est le flux de sédimentation et $\omega(r, z)$ est la vitesse de sédimentation pour des aérosols de taille r à l'altitude z .

La vitesse de sédimentation, ω , des aérosols dépend avant tout de la force de frottement appliquée lors de leur chute dont l'expression est différente selon le régime d'écoulement.

En partant de la théorie connue pour des particules sphérique et utilisant les relations 1.1 à 1.3 (définies dans le chapitre 1), Cabane et al. (1993) ont déduit des relations pour calculer la vitesse de sédimentation d'agrégats fractals. Nous les rappelons ici.

En régime moléculaire ($Kn \gg 1$), la force de frottement est proportionnelle à la surface de l'aérosol. Par extension, il en va de même pour la vitesse de sédimentation ω . En tenant compte du fait que la surface est reliée au rayon apparent de l'aérosol, on a donc la relation de proportionnalité suivante :

$$\begin{aligned} \omega &\propto \frac{M}{S} \propto \frac{r_v^3}{r_a^2} \\ \omega &\propto r_v^{\frac{3D_f-6}{D_f}} \times r_m^{\frac{6-2D_f}{D_f}} \end{aligned} \quad (2.12)$$

Pour une particule sphérique ($D_f = 3$), la vitesse est donc directement proportionnelle au rayon. Dans le cas d'un agrégat fractal avec $D_f = 2$, on remarque que la vitesse ne dépend plus que du rayon du monomère. Cette propriété intéressante et surtout très importante implique qu'en régime moléculaire, tous les agrégats fractals de dimension $D_f = 2$, quelque soit leur taille, vont sédimenter à la même vitesse !

En régime hydrodynamique ($Kn \ll 1$), les frottements sont représentés par la force de Stokes. La vitesse ω devient donc proportionnelle au rapport entre la masse de la particule et son rayon apparent. En utilisant le rayon apparent r_a dans la loi de Stokes, on peut obtenir la vitesse de sédimentation pour une particule fractale :

$$\begin{aligned} m \vec{g} + \vec{F}_s &= 0 \\ \frac{4}{3} \pi r_v^3 \rho g - 6 \pi \eta r_a \omega &= 0 \\ \omega &= \frac{2}{9\eta} r_v^{\frac{3D_f-3}{D_f}} \times r_m^{\frac{3-D_f}{D_f}} \rho g \end{aligned} \quad (2.13)$$

Pour $D_f = 3$, on retrouve l'expression de la vitesse de sédimentation d'une particule sphérique et $\omega \propto r_v^2$. Dans le cas $D_f = 2$, l'équation 2.13 donne la relation $\omega \propto r_v \times r_m$. En conséquence, une particule fractale de dimension $D_f = 2$ sédimentera moins vite qu'une particule sphérique de volume équivalent dans le régime hydrodynamique (typiquement dans la troposphère sur Titan).

La transition entre les deux régimes d'écoulement se fait par le biais de la correction de Cunningham-Millikan qui s'applique sur l'expression de la force de Stokes. Cette correction dépend du nombre de Knudsen et donc du rayon apparent de la particule concernée.

$$F_{CM} = 1 + Kn [1.257 + 0.4 \exp(-1.1 Kn^{-1})] \quad \text{où} \quad Kn = \frac{\lambda_g}{r_a}$$

On en déduit alors l'expression générale de la vitesse de sédimentation d'un aérosol :

$$\omega(r, z) = \frac{2}{9\eta} r_v^{\frac{3D_f-3}{D_f}} \times r_m^{\frac{3-D_f}{D_f}} \rho g \times F_{CM} \quad (2.14)$$

La figure 2.8 présente les vitesses de sédimentation d'aérosols de différentes tailles en fonction de l'altitude calculées dans le GCM-Titan. Elle synthétise l'ensemble des relations présentées ci-dessus pour des aérosols fractals de dimension $D_f = 2$ (ce que l'on s'attend à trouver sur Titan). On peut globalement découper la figure en trois zones d'altitude qui correspondent aux deux régimes et à la zone de transition. Comme le nombre de Knudsen dépend de la taille de la particule, cette zone de transition (entre ~ 50 et ~ 200 km sur la figure 2.8) varie d'une taille de particule à l'autre.

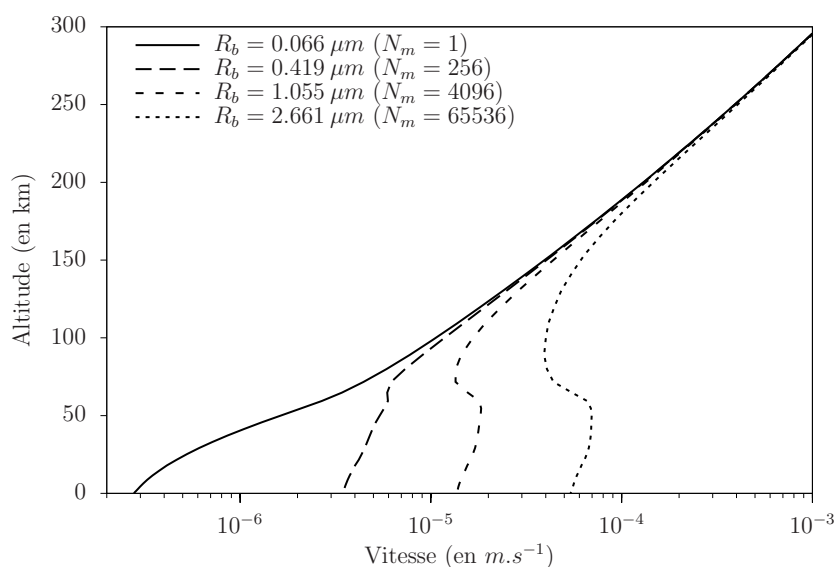


FIGURE 2.8 – Vitesse de sédimentation des aérosols en fonction de l'altitude pour différentes taille d'aérosols extraites du GCM-2D. La courbe en trait plein correspond au monomère (particule sphérique). Les courbes en tiret représentent la vitesse de sédimentation pour différentes valeurs de N_m .

2.3.2 Coagulation

Lors d'une collision entre deux particules, il existe une probabilité non nulle pour qu'elles restent collées l'une à l'autre, formant ainsi une particule de plus grande taille (dans le cas d'une goutte liquide) ou un agrégat (particules solides). Ceci représente le principe de base de la coagulation. La vitesse relative entre les deux particules est le moteur essentiel de la coagulation. Dans l'atmosphère, on peut globalement distinguer deux types de coagulation dépendant de la manière dont est produit ce différentiel de vitesse :

- La coagulation par mouvement brownien résulte de la collision entre particules du fait de leur agitation thermique.
- La coalescence est générée par les différences de vitesse de sédimentation entre particules lors de leur chute.

Sur Titan, la collection de particules liée à la coalescence est négligeable devant la coagulation par mouvement brownien. Ceci est évident dans la stratosphère où les aérosols fractales sédimentent tous à la même vitesse et ne générant donc aucun différentiel de vitesse. Dans la troposphère, cela paraît moins évident mais la comparaison des coefficients de coagulation montre que la coalescence est au mieux dix fois plus faible que la coagulation brownienne. Nous nous présenterons donc dans ce manuscrit que cette dernière.

Indépendamment du type des particules mise en jeu, il est possible de montrer que la variation d'une distribution de particules, $n(r)$, sous l'effet de la coagulation est régie par l'équation suivante (Fuchs, 1964)⁹ :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}n(r) = & \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^r K(u, r-u) n(u) n(r-u) du}_{f_{gain}} \\ & - \underbrace{n(r) \int_0^{+\infty} K(r, u) n(u) du}_{f_{perte}} \end{aligned} \quad (2.15)$$

Pour une taille de particule r , la partie f_{gain} de l'équation 2.15 représente le gain par accretion de toutes particules de rayon $r' < r$. La partie f_{perte} correspond aux pertes des particules de rayon r par accretion de ces dernières avec des particules de toute taille. $K(r_i, r_j)$ est appelé kernel ou coefficient de coagulation et porte toute l'information « physique » du processus de la coagulation. Son expression dépend notamment du régime d'écoulement.

En régime hydrodynamique, son expression se calcule à partir du calcul du flux de diffusion de particules r_j vers une particule r_i . On l'écrit de la manière suivante :

$$K(r_i, r_j) = 4\pi(D_i + D_j)(r_{a_i} + r_{a_j}) \quad (2.16)$$

D_i et D_j sont les coefficients de diffusion respectifs des particules i et j , et dépendent du rayon des particules ($D = \frac{kT}{6\pi\eta r_a} \times F_{CM}$).

9. Les calculs menant à l'équation 2.15 sont donnés dans le chapitre 7 de Fuchs (1964) mais aussi dans le chapitre 12 de Pruppacher and Klett (1978).

Dans le régime moléculaire, $K(r_i, r_j)$ est obtenue de l'expression dérivée de la théorie cinétique des gaz pour des collisions et s'écrit comme suit :

$$K(r_i, r_j) = \pi (r_{a_i} + r_{a_j})^2 G_{ij} \quad (2.17)$$

Où $G_{ij} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi} \left(\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j} \right)}$ est la vitesse thermique moyenne relative des particules i et j .

Dans le chapitre suivant, les deux équations 2.16 et 2.17 nous serviront comme base de départ au développement des lois de coagulation en moments.

Comme dans le cas de la sédimentation, une correction doit être apportée afin de décrire le kernel de coagulation dans le régime transitoire. Une telle correction a été développée par Fuchs (1964) et s'écrit comme suit :

$$\beta = \left(\frac{r_{a_i} + r_{a_j}}{r_{a_i} + r_{a_j} + \sqrt{\delta_i^2 + \delta_j^2}} + \frac{4(D_i + D_j)}{\sqrt{G_i^2 + G_j^2} (r_{a_i} + r_{a_j})} \right)^{-1} \quad (2.18)$$

Où, pour chacune des particules i et j :

$$G = \sqrt{\frac{6k_b T}{\pi^2 \rho_p r_v^3}}$$

$$\delta = \frac{1}{6\lambda_p} \left[(2r_a + \lambda_p)^3 (4r_a^2 + \lambda_p^2)^{3/2} \right] - 2r_a$$

Cette correction multiplicative s'applique sur l'équation 2.16 et permet alors d'obtenir une forme générale du kernel de coagulation valable quelque soit le régime d'écoulement rencontré.

Nous avons évoqué dans la section 2.1.2 le fait que les aérosols sur Titan sont chargé. Dans l'atmosphère, peu de molécules sont susceptibles de former des ions négatifs et les aérosols deviennent les principaux receveurs d'électrons. Les forces engendrées par la charge des particules affectent de manière significative l'efficacité de collection. Cet effet doit être pris en compte dans les lois de coagulation en appliquant une nouvelle correction multiplicative au kernel qui se présente comme suit (Pruppacher and Klett, 1978) :

$$\mathcal{Q}(r_i, r_j) = \frac{y}{\exp(y) - 1} \quad ; \quad y = \frac{q_i q_j}{(r_{a_i} + r_{a_j}) kT}$$

Où $q = \frac{n_{e^-} q_{e^-}}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \times r_a$ représente la loi de charge des aérosols. En raisonnant sur le fait que les charges sont répulsives et tendent à mettre le plus de distance entre elle, Cabane et al. (1993) ont proposé d'utiliser le rayon apparent (r_a) de l'agrégat qui correspond à la taille physique d'un aérosol fractal.

La charge des aérosols n'étant pas connue précisément, n_{e^-} est un paramètre libre des modèles dont la valeur varie généralement entre 15 et 30 $e^- \cdot \mu m^{-1}$ dans la littérature (Borucki et al., 1987; McKay et al., 1989; Rannou et al., 2003; Lavvas et al., 2008). Cette correction variant de 1 à 0 (pour les grandes particules) peut totalement inhiber la coagulation.

Quelque soit le régime d'écoulement, le coefficient de coagulation K dépend essentiellement de la taille des particules mis en relation (et donc de leur dimension fractale) mais aussi de la charge électrique n_{e^-} de ces dernières. La figure 2.9, montre l'impact de ces deux paramètres sur l'efficacité de coagulation. De manière générale, le coefficient de coagulation augmente avec la différence de taille des particules mis en jeu avec un minimum se situant aux alentours de $r_i = r_j$. En régime hydrodynamique pur ($Kn \ll 1$), $K(r_i, r_j)$ est minimum lorsque cette condition est atteinte. Les particules fractales ont une efficacité de coagulation plus élevée que les particules sphériques de volume équivalent ce qui tend à augmenter la proportion des grosses particules par rapport aux plus petites¹⁰. La charge électrique dépendant de la taille des particules mise en jeu, joue le rôle inverse et tend à diminuer l'efficacité de coagulation lorsque la taille des particules augmente.

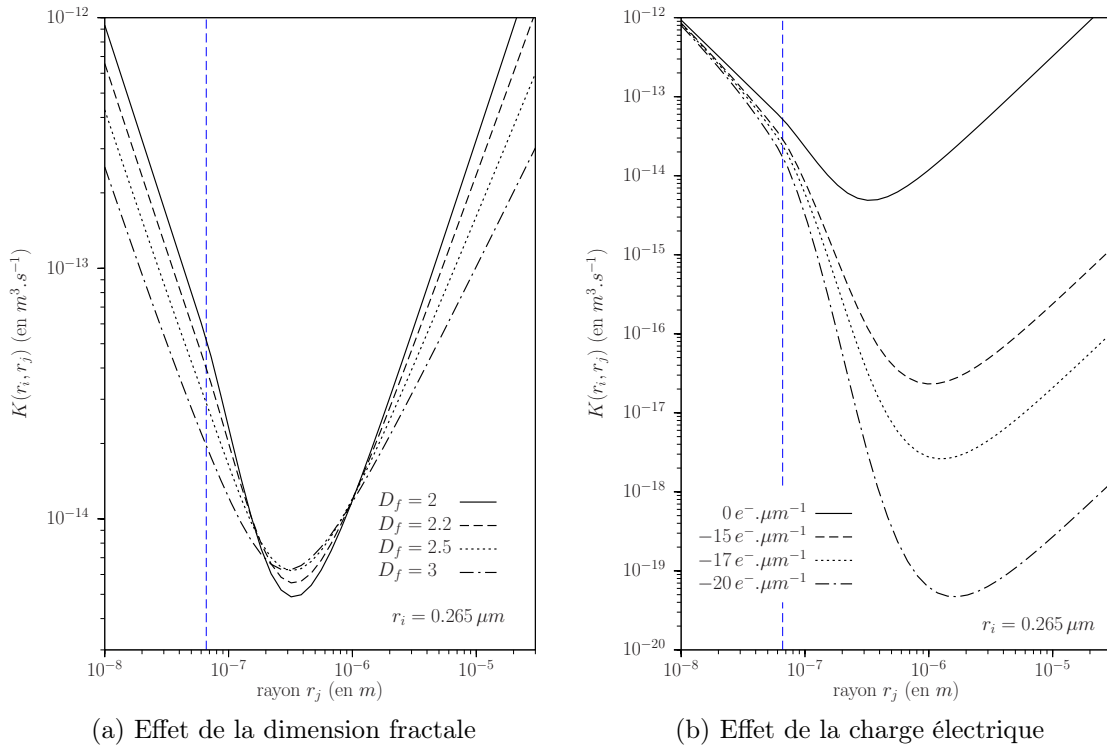


FIGURE 2.9 – Coefficient de coagulation $K(r_i, r_j)$ pour un aérosol fractal de rayon $r_i = 2.65 \times 10^{-7} m$ (rayon équivalent) en fonction du rayon r_j (correspondant à un agrégat fractal si $r_j > 66 nm$) au niveau de pression $P = 10 mbar$ et à la température $T = 144 K$. (a) : Variation de $K(r_i, r_j)$ pour $n_{e^-} = 0 e^- . \mu m^{-1}$ en fonction de la dimension fractale, D_f . (b) : Variation de $K(r_i, r_j)$ pour $D_f = 2$ en fonction de la charge des aérosols, n_{e^-} .

2.4 Microphysique des nuages

De la même manière que les aérosols, les nuages sont soumis aux lois microphysiques. Nous présenterons dans cette section les phénomènes de nucléation et de

10. C'est un des principaux effets responsables de « l'asymétrie » de la loi de distribution.

condensation qui sont les deux « premières étapes » de la formation des nuages et de l'évolution des gouttes qui les caractérisent. En ce qui concerne la sédimentation, ce processus suit le même principe que l'on traite des aérosols ou des gouttes (à la différence que l'on considère les gouttes ici comme étant des sphères parfaites), nous ne le présenterons pas à nouveau et renvoyons à la section 2.3.1.

2.4.1 Energie de formation d'une goutte

La formation d'une goutte dépend de la variation d'énergie du système liée au passage de la phase gazeuse à la phase condensée mais aussi de l'énergie nécessaire pour maintenir une tension superficielle suffisante pour assurer la cohésion du condensat créée au sein du milieu gazeux. Sans entrer dans les détails (voir Pruppacher and Klett, 1978), on peut montrer que la variation d'énergie libre ΔF associée à la formation d'une goutte de taille r s'écrit :

$$\Delta F = \int_0^r dF = 4\pi r^2 \sigma - \frac{4}{3}\pi r^3 \frac{\rho_\chi kT \ln S}{m_\chi} \quad (2.19)$$

Où σ est la tension superficielle¹¹, m_χ est la masse d'une molécule constituant le condensat ; ρ_χ la densité du condensat et S , la saturation qui représente le rapport entre la pression partielle du gaz condensable et la pression de vapeur saturante de ce même gaz ($S = p_\chi/p_\chi^{sat}$).

Pour $S \leq 1$, ΔF est une fonction croissante du rayon. Dès que $S > 1$, cette fonction passe par un maximum en r^* ($\frac{\partial \Delta F}{\partial r}|_{r^*} = 0$) puis tend vers $-\infty$ lorsque r tend vers ∞ (figure 2.10).

$$r^* = \frac{2\sigma m_\chi}{kT \rho_\chi \ln S} \quad (2.20)$$

$$\Delta F^* = \frac{4}{3}\pi r^{*2} \sigma \quad (2.21)$$

Les agglomérats de molécules de taille r^* sont appelés embryons : ils constituent la première étape de formation d'une goutte, tant qu'un agglomérat de particule n'atteint pas la taille r^* , aucune goutte ne pourra être créée. On peut le comprendre en analysant simplement la figure 2.10. Pour $S > 1$, ΔF^* représente un équilibre instable :

Lorsque $\frac{\partial \Delta F}{\partial r} > 0$ ($r < r^*$), sans apport d'énergie extérieure, l'agglomérat tend à diminuer spontanément. Une fois la taille r^* atteinte, l'agglomérat tendra par contre à croître spontanément et former une goutte ($\frac{\partial \Delta F}{\partial r} > 0$).

11. La formule de Laplace permet de relier la tension superficielle à la différence de pression entre la goutte (p_t) et le gaz environnant (p_g) à l'équilibre mécanique : $p_t - p_g = \frac{2\sigma}{r}$.

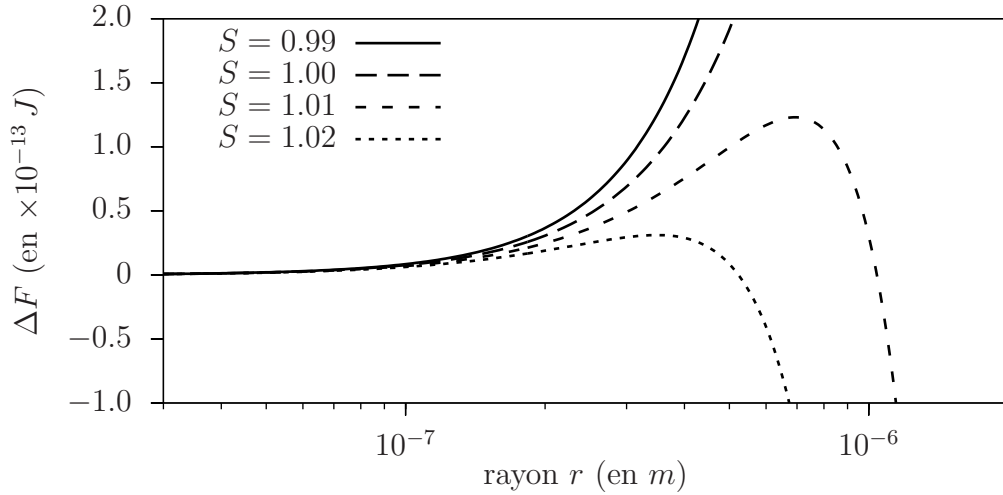


FIGURE 2.10 – Énergie de formation ΔF d'une goutte de méthane sur Titan à 80K en fonction du rayon de la goutte.

2.4.2 Nucléation

L'équation 2.19 permet de relier taille et énergie de formation dans le cas d'une seule goutte. On peut étendre ce concept à une population en considérant que ces particules se présentent, à l'équilibre, comme une distribution de Maxwell-Boltzman :

$$N(r) = n \exp\left(-\frac{\Delta F}{kT}\right) \quad (2.22)$$

Où n est la concentration en molécules du milieu gazeux.

$N(r^*)$ correspond au nombre d'agglomérat de taille r^* , qui seront susceptibles de croître par la suite spontanément avec l'apport de molécules issues du milieu gazeux. Ce phénomène représente la *nucléation* et peut s'exprimer par le taux de molécules franchissant le seuil $r = r^*$ par unité de volume et de temps. Ce taux se calcule simplement en multipliant le flux ($F^\downarrow = 1/4 \times n \bar{v}_t$) de molécules susceptibles de s'intégrer à un embryon de surface $4\pi r^{*2}$ par le nombre d'embryon $N(r^*)$:

$$\begin{aligned} J_{\text{éq}} &= F^\downarrow 4\pi r^{*2} N(r^*) \\ J_{\text{éq}} &= \pi r^{*2} \bar{v}_t n^2 \exp\left(-\frac{\Delta F^*}{kT}\right) \end{aligned} \quad (2.23)$$

L'approche à l'équilibre est toutefois insatisfaisante. Les équations 2.19 et 2.22 impliquent que les agglomérats infiniment grands sont infiniment nombreux ce qui ne semble pas physiquement acceptable. De plus, nous avons uniquement pris en compte un flux de molécules, F^\downarrow rejoignant l'embryon. Or ce flux peut être compensé par le phénomène d'évaporation. Une correction à l'équation 2.23 est nécessaire. Cette correction appelée facteur de Zeldovitch permet de tenir compte du fait que le système n'est pas à l'équilibre de Boltzmann mais en situation stationnaire. Il y a en permanence des gouttelettes franchissant le seuil $r = r^*$ (voir à nouveau Pruppacher and Klett, 1978). En multipliant l'expression du taux de nucléation (Eq. 2.23) par

le facteur Z on obtient alors :

$$Z = \sqrt{\frac{\Delta F^*}{3\pi kT g^{*2}}} \quad (2.24)$$

$$J = \sqrt{\frac{\Delta F^*}{3\pi kT g^{*2}}} \times \pi r^{*2} \bar{v}_t n^2 \exp\left(-\frac{\Delta F^*}{kT}\right) \quad (2.25)$$

Où g^* représente le nombre de molécule de l'embryon, \bar{v}_t est la vitesse thermique des molécules

Jusqu'à présent tout ce développement théorique se base sur la formation de gouttes pour lesquelles la vapeur se condense sur elle même sans support, on parle alors de *nucléation homogène*. Si l'on se fixe une valeur de $J = 1 \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ comme limite de détection de la nucléation, la vapeur d'eau dans l'atmosphère terrestre ne pourrait nucléer qu'avec des rapports de saturation de l'ordre de 4 ou 5. Sur Titan, où la température est bien plus faible, ce rapport doit excéder plusieurs dizaines de milliers.

La présence de particules (solides) dans l'atmosphère offre un support à la nucléation qui permet d'abaisser fortement l'énergie de formation ΔF^* . On parle alors de *nucléation hétérogène*. On peut, de la même manière que précédemment calculer un taux de nucléation en y intégrant certains mécanismes spécifiques à la nucléation sur un support. Ces mécanismes qui sont bien documentés dans la littérature ne seront pas détaillés ici. Nous nous contenterons de présenter l'expression complète du taux de nucléation hétérogène (Keesee, 1989) :

$$J_{het} = \frac{\pi Z}{8\nu_s f(m, x)} (n \bar{v}_t r^*)^2 \exp\left(\frac{2\Delta F_{des} - \Delta F_{sd} - \Delta F^* \times f(m, x)}{kT}\right) \quad (2.26)$$

Dans cette équation, les termes n , \bar{v}_t , r^* , Z et ΔF^* sont exactement les même que leur homologues définis pour la nucléation hétérogène (voir eq. 2.20, 2.21, 2.24). Le terme ν_s correspond à la fréquence de vibration des molécules. Les termes ΔF_{des} et ΔF_{sd} sont des corrections sur l'énergie d'activation. Elles sont respectivement liées à la désorption des molécules sur le support et à la diffusion des molécules à la surface de ce support.

Le terme $f(m, x)$ appelé facteur de forme, est la correction la plus importante dans l'équation 2.26. Ce facteur d'origine géométrique dépend du cosinus de l'angle de contact¹² entre l'embryon et son noyau mais aussi du rayon de courbure de l'embryon. On le déduit à partir de l'expression de l'énergie de formation dans le cas de la nucléation hétérogène (Fletcher, 1958) et de la géométrie du système embryon/noyaux (voir figure 2.11.a). Dans le cas d'un support concave, son expression est la suivante :

$$f(m, x) = \frac{1}{2} \left(1 + \left(\frac{1 - mx}{\phi} \right)^3 + x^3 \left[2 - 3 \left(\frac{x - m}{\phi} \right) + \left(\frac{x - m^3}{\phi} \right) \right] + 3mx^2 \left(\frac{x - m}{\phi} - 1 \right) \right)$$

où $\phi = \sqrt{1 - 2mx + x^2}$, $m = \cos\theta$ est la mouillabilité et le paramètre x correspond au rapport entre le rayon de courbure et le rayon critique, $x = r_N/r^*$.

12. Pour rappel, le cosinus de cet angle est aussi appelé mouillabilité, $m = \cos(\theta)$.

La figure 2.11.b montre les variations du facteur de forme en fonction du rayon de courbure pour différentes valeurs de la mouillabilité pour un noyau de la taille du monomère ($r_N = 6.66 \times 10^{-8}m$). La mouillabilité dépend de la nature du support et son estimation est difficile¹³. Dans les cas de Titan, les aérosols sont considérés comme étant très facilement mouillables et les valeurs utilisées dans les modèles microphysiques sont systématiquement supérieures à 0.97 (Barth and Toon, 2006; Rannou et al., 2006; Lavvas et al., 2011). Cette valeur élevée de m diminue fortement l'énergie de formation des gouttes par le biais du facteur de forme (voir figure 2.11.b). En conséquence, le seuil de saturation critique (S^*) nécessaire à l'activation de la nucléation est abaissé à des valeurs proche de 1.

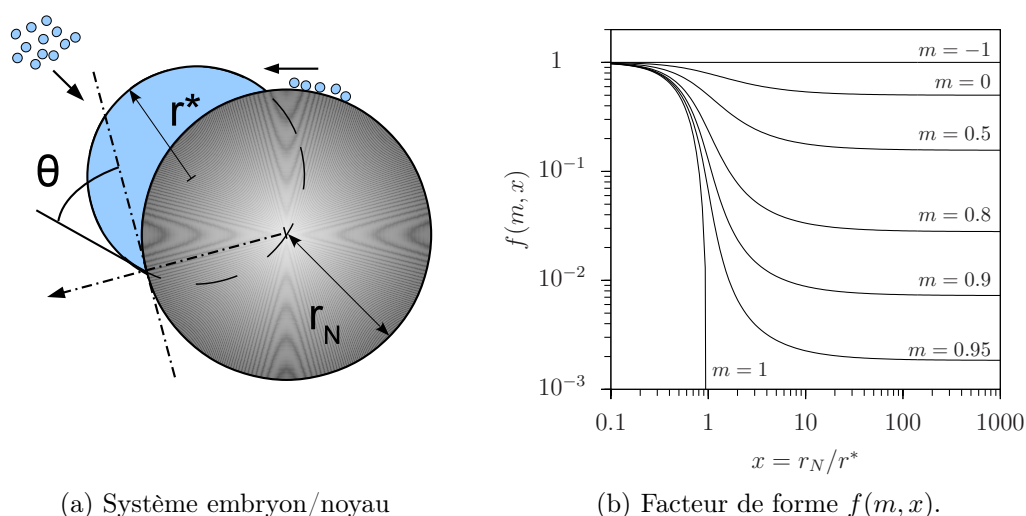


FIGURE 2.11 – (a) Schématisation du système embryon/noyau et géométrie associée au facteur de forme $f(m, x)$. (b) Variations du facteur de forme $f(m, x)$ en fonction du paramètre x pour différentes valeurs de m .

2.4.3 Condensation

Une fois la barrière de nucléation atteinte, les gouttes peuvent évoluer librement. Les gouttes de tailles $r > r^*$ entament alors une phase de condensation durant laquelle, elles vont croître par apport de molécules issues du milieu gazeux. La condensation est caractérisée par un taux de croissance g qui dépend de la quantité de molécules condensables qui changent de phase.

$$r \frac{\partial r}{\partial t} = g = \frac{S - S^*}{R_d + R_c} \quad (2.27)$$

où S correspond à la saturation dans le milieu gazeux (loin de la goutte), S^* la saturation à la surface de la goutte. S^* se calcule à partir de la relation 2.20 en substituant r^* par r_g , le rayon de la goutte. Les termes R_d et R_c sont des termes de résistance (en $s.m^{-2}$) qui vont freiner la condensation.

13. Cette estimation est d'autant plus difficile qu'il y a beaucoup d'espèces en jeu.

Les molécules sont amenées vers la goutte par le processus de diffusion moléculaire, et le flux de molécules vers la goutte dépend de la sursaturation du milieu par rapport à la goutte ($S - S^*$). Ce flux dépend aussi du régime dans lequel les molécules évoluent et donc du nombre de Knudsen.

$$R_d = \frac{\rho_\chi R T}{\mathcal{D} M_\chi p_\chi^{sat}(T)}$$

Où ρ_χ est la densité du condensat de l'espèce χ , M_χ la masse molaire, p_χ^{sat} la pression de vapeur saturante, R la constante des gaz parfaits et T la température. \mathcal{D} est la diffusivité moléculaire de la vapeur de l'espèce condensable donnée par la relation (Fuchs and Sutugin, 1971) :

$$\mathcal{D} = \frac{D}{1 + \mathcal{A}_{Kn}} \quad \text{avec} \quad \mathcal{A}_{Kn} = Kn \frac{1.333 + 0.71 Kn^{-1}}{1 + Kn^{-1}}$$

\mathcal{A}_{Kn} est une correction similaire à la correction Cunningham-Millikan qui assure la transition entre le régime moléculaire et continu.

Le terme R_c provient du dégagement de chaleur latente lors du changement de phase. Ce dégagement de chaleur peut augmenter la température à la surface de la goutte, et freiner ainsi la condensation. Il faut inclure dans ce cas une condition supplémentaire liée à la conservation de l'énergie, qui dépend du coefficient de diffusivité thermique et du gradient de température proche et loin de la goutte.

$$R_c = \frac{L_v \rho_\chi}{\gamma T} \left(\frac{L_v M_\chi}{RT} - 1 \right)$$

où L_v correspond à la chaleur latente d'évaporation de l'espèce χ considérée, et γ la conductibilité thermique de l'air (N_2 dans le cas de Titan).

CHAPITRE 3

Méthode des moments

Sommaire

3.1	Contexte Général	39
3.2	Moments et lois de distribution	44
3.2.1	Relation inter-moments	45
3.2.2	Comparaison de lois de distributions	48
3.2.3	Cas des modèles 1D	50
3.3	Résolution des équations de la microphysique de la brume en moments	51
3.3.1	Coagulation des aérosols	52
3.3.2	Sédimentation des aérosols	76
3.3.3	Zone de production	79
3.4	Résolution des équations de la microphysique des nuages en moments	79
3.4.1	Nucléation	79
3.4.2	Condensation	80
3.4.3	Sédimentation des gouttes	82
3.5	Résumé	83

Ce chapitre débute par la description des deux représentations de traceurs les plus utilisées dans les modèles numériques ainsi que le contexte général de l'emploi d'une méthode de moments dans ces modèles. La seconde partie se focalise sur les relations entre la loi de distribution et ses moments qui seront nécessaires au développement des équations microphysiques en moments. La dernière partie est quant à elle dédiée à la réécriture des ces équations en terme de moment de loi de distribution ce qui constitue le cœur de la méthode.

3.1 Contexte Général

Nous présentons dans cette section le contexte et la problématique qui ont motivé l'application d'une méthode de moment. Le développement de cette méthode

accompagne la mise à jour du modèle de climat global (TGCM) dédié à Titan et développé de longue date à l'IPSL.

Il est important de savoir, même si cela paraît évident, que l'ajout d'une dimension supplémentaire dans un modèle aussi complexe que le GCM augmente dramatiquement le temps d'exécution du programme. Pour se donner une idée, le TGCM-2D nécessite approximativement une quinzaine d'heures pour effectuer une simulation représentant une année complète de Titan avec une grille en *Latitude* \times *Altitude* de 48×55 points. On peut estimer le temps de calcul nécessaire au TGCM-3D pour effectuer la même simulation en multipliant ce temps de calcul par le nombre de points décrivant la dimension ajoutée. Même si cette estimation reste approximative, on déduit de ce simple calcul que le TGCM-3D mettrait une vingtaine de jours pour la même simulation avec une grille *Longitude* \times *Latitude* \times *Altitude* de $32 \times 48 \times 55$ points. De plus cette approximation sous-estime le temps réel d'exécution car le TGCM-2D ne traite pas tous les calculs effectués en 3D¹. Il n'est donc pas exagéré de penser que le temps d'exécution soit plutôt de l'ordre du mois.

En l'état, une telle version du TGCM-3D ne peut être considéré comme un outil efficace. Le moindre test se ferait en plusieurs semaines avant de donner des résultats quelle que soit leur nature. Il est donc nécessaire de réduire le temps d'exécution du modèle et pour cela nous avons à notre disposition plusieurs moyens. Nous ne les énumérerons pas toutes ici mais donnerons simplement certaines pistes :

Réduction de la grille du modèle : La taille de la grille impacte directement le nombre de calculs effectués dans le modèle, puisque tous les processus sont calculés pour chaque cellule de la grille. De ce fait, le nombre de calculs est directement proportionnel au nombre de cellules du modèle. La contrepartie réside dans la perte en résolution de certains processus et donc par extension des diagnostics que produit le modèle. La réduction de la grille n'est donc pas une modification pérenne. Dès lors que l'on s'intéressera plus en détails à certaines régions du modèle, il sera nécessaire d'augmenter la résolution.

Parallélisation du code : La parallélisation du programme permet de réduire efficacement le temps d'exécution du GCM en répartissant les calculs sur les différents processeurs de la machine utilisée. Elle nécessite tout de même des moyens de calcul conséquents pour être efficace, mais de nos jours, la majorité des ordinateurs disposent au moins de 2 cœurs et l'accès à des fermes de calcul est facile. Cette technique est complexe à mettre en place essentiellement dans la partie dynamique du modèle où les cellules vont s'échanger des quantités de traceurs en trois dimensions (les calculs dépendent donc les uns des autres). La partie physique du modèle quant à elle, se prête bien à cette méthode car toutes les colonnes du modèle sont traitées indépendamment des autres. La parallélisation du code, même si elle nécessite une refonte (partielle ou complète ?) du modèle, est certainement le moyen le plus efficace de réduire les coûts en temps de calcul tout en gardant une bonne précision.

Réduction du nombre de traceurs : L'amélioration du temps de calcul peut aussi passer par une modification du nombre de traceurs représentant certains champs de l'atmosphère (comme les traceurs microphysiques ou chimiques par

1. On citera par exemple l'utilisation du cycle diurne qui nécessite un appel plus fréquent du transfert radiatif augmentant les temps de calcul, surtout en tenant compte des nuages.

exemple). Pour les processus faisant intervenir les traceurs, le nombre de calculs exécutés est proportionnel au nombre de traceurs à traiter. Comme la réduction de la grille, la diminution du nombre de traceurs engendre des gains de temps non négligeables (de moindre importance cependant, car tous les processus ne font pas appel à tous les traceurs). La diminution de ces traceurs entraîne une perte d'informations qui peut engendrer une dégradation des résultats.

La réduction de la grille du modèle n'est pas indiquée pour des études poussées avec le GCM. La parallélisation du code présente un aspect plus technique que scientifique de la modélisation et a été engagée au Laboratoire de Météorologie Dynamique (LMD) durant la période de ma thèse. En ce qui concerne la réduction des traceurs, contrairement à la diminution de la grille, ce moyen ne dégrade pas systématiquement le modèle et autorise toujours un certain degré d'ajustement possible pour pouvoir représenter correctement par la suite les différentes structures de l'atmosphère. Je me suis donc focalisé sur cette dernière approche durant ma thèse.

Représentation des traceurs dans un modèle

Lorsque l'on cherche à représenter des aérosols dans un modèle, le moyen le plus simple consiste à les décrire à l'aide d'une particule type dont on ajustera les différentes propriétés (sa taille par exemple ou encore sa dimension fractale dans le cas d'agrégat). Cependant dès lors que l'on s'intéresse à la microphysique dans son ensemble, une telle description des traceurs devient insuffisante puisque les processus de collection ne peuvent pas être représentés. Il est donc nécessaire de pouvoir décrire les distributions en taille des particules. Nous avons déjà développé dans la section 2.1 ces notions de granulométrie et de loi de distribution. Nous allons maintenant décrire les différentes méthodes permettant de les représenter dans un modèle.

Plusieurs méthodes ont été mises au point pour décrire l'évolution d'une population de particule soumise aux lois de la microphysique. En raison de la nature différente de chacun des processus (collection pour la coagulation, variations de taille pour la condensation ...), les méthodes développées sont généralement spécifiques à un processus. On peut globalement dégager deux grands types d'approches pour décrire une distribution en taille :

- représentation en section (Gelbard et al., 1980; Kim and Seinfeld, 1990).
- représentation paramétrisée (Seigneur et al., 1986; Whitby and McMurry, 1997).

Nous allons par la suite décrire plus en détail ces deux approches qui sont respectivement celle utilisée dans le TGCM-2D et celle que j'ai développée dans le cas de Titan afin de réduire le nombre de traceurs du modèle.

Représentation en sections

L'approche en *sections* consiste à discrétiser la distribution en taille sur une grille en rayon. Les équations microphysiques sont alors aussi discrétisées et l'évolution de la distribution est calculée pour chaque case de la grille. En règle générale, la

précision de cette représentation dépend du nombre de cases utilisées pour la discrétisation (Seigneur et al., 1986).

Il existe deux versions de la représentation en section dont la différence se situe au niveau de la grille de rayons. Cette dernière peut être fixe ou bien « mouvante ». La figure 3.1 présente schématiquement comment se présentent les transformations de la loi de distribution dans les deux type de sections que nous allons décrire ici :

- Dans le cas d’une grille en sections fixes, on s’intéresse au nombre de particules dans un système de cases fixes : au sein d’une section la quantité est constante. Ce type de représentation est bien adapté pour la coagulation où l’échange de particules se fera case à case : 2 particules de taille i donneront une particule de taille j . Dans ce type de représentation, on observe une variation de la quantité de chaque case de la grille lors du calcul d’un processus.
- Le développement de l’idée de sections mouvantes quant à lui, vient du principe de la condensation. Comme nous l’avons déjà développé dans la section 2.4.3 le phénomène de condensation/évaporation s’exprime au travers du changement de taille des gouttes. Lors de cette évolution, le nombre de noyaux reste constant. Il est donc plus pratique de calculer les variations en taille des gouttes (et donc modifier la grille en rayons) que de calculer l’échange de noyaux entre les différentes cases d’une grille fixe.

Une autre manière de cerner les deux approches consiste à les considérer comme des analogues dans l’espace des rayons aux représentations *eulérienne*, dans le cas des sections fixes, et *lagrangienne* dans le cas des sections mouvantes.

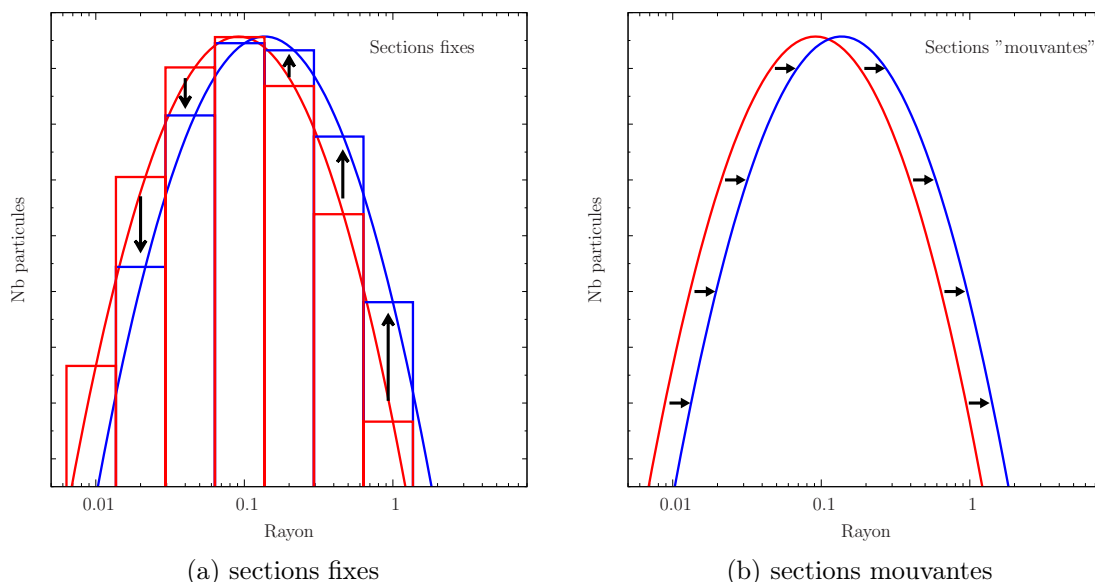


FIGURE 3.1 – Schématisation d’une transformation de la loi de distribution dans le cas de la représentation en section. La figure est avant tout qualitative et montre la manière dont se « déplace » la distribution dans chaque cas. En sections fixes (a), c’est la quantité dans chaque case qui est réévaluée lors du calcul. Dans le cas de sections mouvantes (b), c’est la grille qui se déforme à la suite du calcul.

Représentation paramétrisée

La représentation paramétrisée est une méthode dans laquelle on suppose que la loi de distribution peut être ajustée à l'aide d'une fonction analytique dont le nombre de paramètres est restreint². Ce type de représentation ne fait plus apparaître explicitement la loi de distribution mais consiste à calculer l'évolution des paramètres de la fonction qui lui sont associés. Ces paramètres peuvent varier d'une fonction à l'autre mais se ramènent généralement à un rayon caractéristique, un nombre de particules et/ou encore une variance. On peut toujours d'une manière ou d'une autre, mettre ces paramètres en relation avec certaines quantités analytiques de la fonction que l'on nomme moments et qui se définissent comme suit :

Pour une fonction f continue sur un intervalle I de \mathbb{R} , le moment d'ordre n (où n un nombre réel) de la fonction est défini (sous réserve d'existence de l'intégrale) par :

$$M_n(f) = \int_I x^n f(x) dx \quad (3.1)$$

Pour $I = \mathbb{R}_+$, on notera que les moments sont des quantités physiques de la loi de distribution. A titre d'exemple, pour $n = 3$, si $f(r)$ représente la loi de distribution des aérosols en rayon alors M_3 correspond au volume total de la population. Pour $n = 0$, M_0 représente le nombre total de particules.

Dans le cas des lois de distributions, les moments sont des quantités positives finies. La condition d'existence des moments peut donc se comprendre facilement en terme de convergence de l'intégrale. En ce qui concerne la loi de distribution sur Titan, la présence du cut-off situé aux alentours d'un millimètre (voir table 2.1 page 21) implique que tous les moments de la distribution existent³.

Si l'on est capable de réécrire les équations d'évolution d'une population non plus en fonction du rayon ($dn(r)/dt$) mais en fonction des moments de cette population (dM_k/dt) alors sous réserve de résoudre le système d'équations reliant moments et paramètres (éq. 3.1) on est capable à tout instant d'obtenir la loi de distribution des particules. La représentation en moment se base donc sur l'évolution de quantités *intégrées* de la distribution plutôt que sur l'évolution de la distribution elle-même.

Cette représentation a ses avantages et ses inconvénients. Son principal atout est la réduction du temps de calcul qu'elle autorise pour les processus affectés ; d'abord car le nombre de variables est réduit et ensuite car la résolution (numérique) des équations de la microphysique est simplifiée. En contrepartie, cette représentation engendre une perte d'informations puisque la loi est dès le départ supposée connue et donc contraint l'évolution de la distribution.

On peut dégager de ces points une remarque : Le degré de complexité de cette représentation est intimement lié au nombre de paramètres *libres* de la fonction utilisée. L'équation 3.1 implique de connaître autant de moments que le nombre de paramètres de la fonction analytique utilisée. De fait, plus le nombre de paramètres est élevé et plus la rapidité d'exécution s'en trouvera affectée.

2. Nous détaillerons cette aspect dans la section suivante.

3. Mathématiquement, le moment maximum existant est lié à la pente du cut-off. On peut affirmer sans se tromper que les 20 premiers moments de la fonction existent ce qui est plus que suffisant.

Si on regroupe les notions exposées ici, on peut énoncer les pré-requis nécessaires à la mise en place d'une représentation en moments dans un modèle, qui seront présentés plus en détails dans les sections suivantes :

- Une fonction analytique proche de la granulométrie observée. dans notre cas, aucune observations ne permet d'avoir la loi de distribution. Nous nous basons alors sur la loi de distribution du TGCM-2D.
- un ensemble de moments (autant que de paramètres de la fonction analytique) dont les ordres sont souvent choisis de manière à simplifier les équations d'évolution.
- Une relation permettant de calculer n'importe quel moment de la fonction analytique à partir d'un autre. Cette relation est indispensable pour simplifier les équations microphysiques et « éliminer » les moments intermédiaires intervenant dans ces équations.
- Une réécriture complète des équations de la microphysique qui comme on l'a déjà souligné dépendent des conditions de l'atmosphère.

3.2 Moments et lois de distribution

Avant de résoudre les équations de la microphysique en moments, intéressons nous aux relations existantes entre une loi de distribution et ses moments. Nous l'avons déjà souligné plus haut : L'équation 3.1, qui nous sera utile tout au long des développements, n'est calculable que si l'on connaît l'ensemble des paramètres de la fonction de distribution. Pour Titan, nous avons présenté cette fonction mais nous n'avons pas encore précisé le nombre de paramètres associés pour obtenir un ajustement correct (voir section 2.1.5). Le meilleur ajustement de cette fonction nécessite 6 lois de puissances en tenant compte du cut-off pour les grands rayons⁴. Afin de refléter au maximum des altérations de la loi telle que nous la décrivons, 14 paramètres libres seraient nécessaires et donc 14 moments d'ordre différents. D'un point de vue purement numérique, ce nombre élevé de paramètres est un obstacle à la méthode des moments. Si on se place dans le cadre du GCM, ce nombre devient plus important que le nombre minimum de sections dédiées à la discrétisation de la loi de distribution. De plus, les processus microphysiques font intervenir des moments d'ordre intermédiaires, et à ce stade, la méthode perd tout son intérêt.

Dans le cas de notre étude, nous avons restreint la fonction analytique à deux paramètres libres : r_C et C_0 (voir équation 2.10). Ces deux paramètres autorisent deux degrés de liberté à la fonction, la translation en rayon et l'ajustement en nombre mais impose une forme constante de la fonction sur le domaine d'intérêt (ici \mathbb{R}_+). On peut s'interroger sur le choix du nombre de paramètres libres à prendre en compte et nous n'avons actuellement pas de réponse « universelle ». Néanmoins quelques éléments peuvent être abordés.

Ces deux paramètres sont reliés à des quantités représentatives de la population d'aérosols : r_C peut donner indirectement des informations sur la taille effective des aérosols, et C_0 correspond au nombre total d'aérosols de la population.

4. La représentation du cut-off de la loi de distribution est indispensable pour la représentation en moments, puisque c'est lui qui impose la convergence de l'intégrale de l'équation 3.1.

L'ajout de paramètres libres supplémentaires à l'équation 2.10 revient essentiellement à se poser les deux questions suivantes :

- Quelle loi de puissance serait prioritaire vis à vis des processus concernés ?
- Pour une loi de puissance donnée ($f = A/(r/r_c)^N$) :
 - ◊ Est ce que la variation de N est suffisante pour représenter correction les variations de la loi ? Dans le cas contraire, il faudrait systématiquement ajouter les moments 2 par 2.

Une étude complète de la loi de distribution, impliquant différents tests sur les processus microphysiques serait nécessaire pour répondre à ses questions. Par manque de temps, une telle étude n'a pas pu être réalisée.

Finalement, nous verrons dans ce chapitre que les comparaisons effectuées entre la représentation en sections et la méthode des moments telle que nous la présentons (utilisation de 2 paramètres seulement) sont globalement déjà en bon accord. L'ajout de paramètres supplémentaires détermine au final le degré de raffinement de la méthode. Cet ajout n'affecte pas en profondeur l'écriture générale des équations microphysiques en moments. La difficulté ajoutée se situe dans la définition des outils mathématiques utilisés tel que la relation inter-moments que nous présentons dans la section suivante. De plus, l'ajout de moments supplémentaire diminue *in fine*, l'efficacité de la méthode en terme de temps de calcul.

3.2.1 Relation inter-moments

Comme nous l'avons brièvement mentionné précédemment, la représentation en moments des processus microphysiques fait intervenir un ensemble d'ordre de moments intermédiaires dépendants avant tout du processus concerné et du choix des moments que l'on souhaite traiter. A titre d'exemple, pour les processus de la microphysique des nuages, l'évolution du moment d'ordre k de la distribution dépend du moment d'ordre $k + 3$: si les moments M_0 et M_3 sont les variables choisies du problème, alors il est nécessaire de connaître aussi M_6 . Dans le cas de la coagulation, il est nécessaire de connaître plus d'une dizaine d'ordres différents. De fait, si tous les moments apparaissant dans les équations d'évolution devaient être des variables du problème, alors cette représentation aurait un intérêt limité (voir totalement nul) en ce qui concerne la rapidité d'exécution. Pire encore, la situation deviendrait ingérable puisque chaque moment nécessiterait la connaissance d'autres moments en cascade.

Il est donc indispensable d'établir une relation entre les différents moments existants de la loi de distribution. Cette relation est d'ailleurs la clef de voûte de la méthode des moments. Elle dépend de tous les paramètres de la fonction analytique et représente tous les aspects de la loi de distribution dans les équations d'évolution.

Lorsque l'équation 3.1 prend une forme analytique, cette relation inter-moments est immédiate. C'est notamment le cas de la loi Log-Normale dont les propriétés analytiques sont bien connues. Dans le cas contraire et de manière générale, on peut toujours formuler le moment d'ordre k comme le produit d'un facteur de forme que nous appellerons α , et du rayon caractéristique, r_C de la fonction. Ce facteur α

dépend donc à la fois de l'ordre du moment et de la forme de la fonction de distribution qui est donnée par tous ses paramètres à l'exception du rayon caractéristique. En prenant l'exemple de la loi Log-Normale (voir éq. 2.3), le moment d'ordre k s'exprime de la façon suivante :

$$M_k = r_0^k \times \underbrace{\exp\left(\frac{k^2 \sigma_0^2}{2}\right)}_{\alpha(k, \sigma_0)} \quad (3.2)$$

De manière plus générale on pourra mettre en forme la relation moments/paramètres de la façon suivante :

$$\frac{M_k}{M_0} = r_C^k \times \alpha(k, a_1, \dots, a_n) \quad (3.3)$$

Où les variables a_i représentent les paramètres définissant la forme de la fonction de distribution. Dans le cas de la loi présentée dans le chapitre 2 (voir éq. 2.10), les paramètres a_i font référence aux A_p et B_p ($p = 1$ à N).

Dans notre cas particulier, la forme de la fonction de distribution est figée puisque seuls r_C et C_0 sont autorisés à varier. On en déduit alors que le facteur de forme α ne dépend plus que de l'ordre du moment considéré ce qui simplifie considérablement le problème. En effet, même si la fonction n'est pas analytiquement intégrable (comme c'est le cas ici), on peut tout de même numériquement calculer ses moments sur un intervalle suffisamment grand pour contenir l'ensemble de la distribution. Si ce calcul est effectué finement, il est alors possible de tabuler la relation 3.3 voire de l'ajuster par une fonction.

La figure 3.2 présente l'ajustement du facteur de forme α pour la loi Titan-2D (voir figure 2.5) par une somme d'exponentielles paraboliques définie comme suit :

$$\alpha(k) = \sum_{i=1}^n \exp(a_i \times k^2 + b_i \times k + c_i) \quad (3.4)$$

Où k représente l'ordre du moment, les a_i , b_i et c_i sont les coefficients d'ajustement (voir table 3.1).

Le nombre d'exponentielles permet d'ajuster plus ou moins finement la fonction sur l'intervalle. Pour la figure 3.2, 6 exponentielles ont été utilisées pour obtenir une erreur relative inférieure à 3×10^{-5} sur le domaine d'intérêt des ordres de moment.

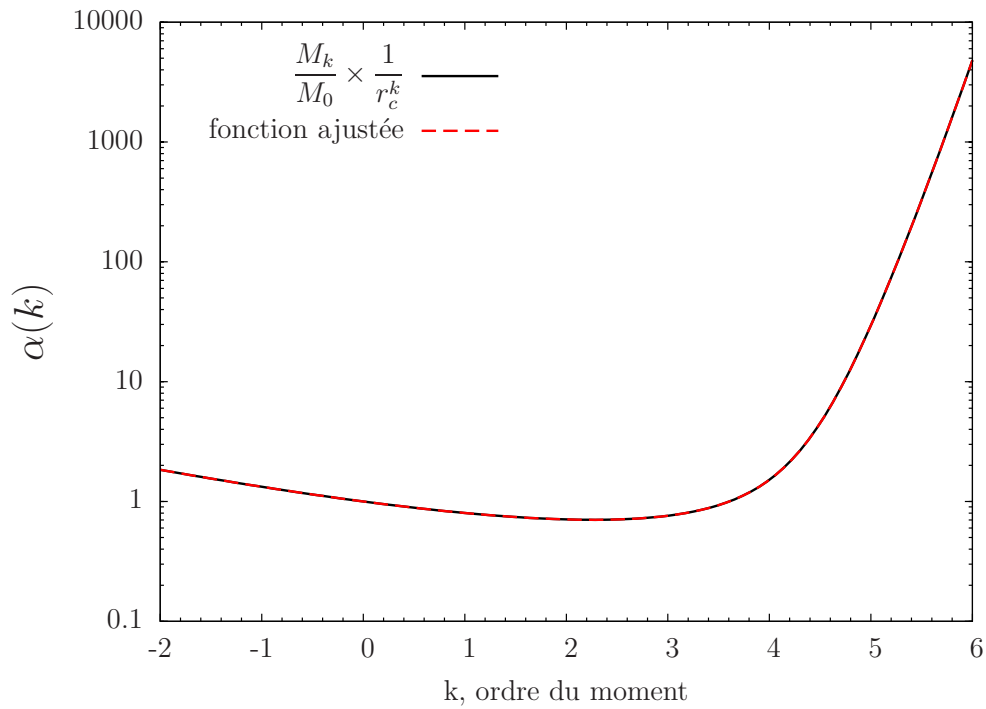


FIGURE 3.2 – Ajustement de la fonction α pour la loi de distribution « Titan » (fig. 2.5). La fonction est présentée pour l'intervalle $k \in [-2; 6]$ contenant tous les ordres nécessaires au développement en moment des lois microphysiques.

i	a_i	b_i	c_i
1	8.0845×10^{-3}	-3.4157×10^{-1}	-2.8412×10^{-1}
2	6.9651×10^{-2}	4.9791	$-2.4622 \times 10^{+1}$
3	$-1.5824 \times 10^{+2}$	$-1.7001 \times 10^{+2}$	-2.0306
4	$4.3937 \times 10^{+1}$	5.6679×10^{-2}	-8.3528
5	1.4819×10^{-1}	3.9284×10^{-1}	-4.6710
6	4.2898×10^{-2}	-9.8245×10^{-3}	-1.4366

TABLE 3.1 – Valeur des coefficients a_i , b_i et c_i de la fonction α . Ces coefficients ne sont valables que pour la loi de distribution définie par les paramètres de la table 2.3.

3.2.2 Comparaison de lois de distributions

La question du choix du nombre de paramètres libres de l'équation 2.10 et la contrainte forte du fait que cette équation n'est pas analytiquement intégrable soulève une nouvelle question : Cette représentation de la loi de distribution est-elle vraiment indispensable dans le cas de notre étude ? On peut se demander si une fonction beaucoup plus facile à manipuler comme la loi Log-Normale (à laquelle on se référera par le terme Log-N par la suite) ne serait pas tout simplement suffisante.

Il n'est pas aisé de comparer et de quantifier de manière théorique l'impact du choix de la fonction de distribution. Néanmoins, la comparaison des facteurs de forme α pour différentes lois permet déjà de pointer les éventuelles différences de comportement. On se propose donc dans cette section de comparer la loi de distribution en taille telle que nous l'avons ajusté (éq. 2.10) avec la loi Log-N (éq. 2.3) à l'aide de ce critère.

La première étape consiste à déterminer les deux paramètres (r_0, σ_0) de la loi Log-N à utiliser. L'équation 3.2 nous permet d'obtenir une relation directe entre les paramètres de la fonction et ses moments. On en déduit qu'à un couple de moments $(M_p; M_k)$ avec $p \neq k \neq 0$, correspond un couple $(r_0; \sigma_0)$ et l'on peut écrire les équations suivantes pour une loi Log-N :

$$r_0 = \left[M_p \left(\frac{M_p^k}{M_k^p} \right)^{-\frac{k^2}{p^2k - k^2p}} \right]^{\frac{1}{p}} \quad (3.5)$$

$$\sigma_0 = \frac{2}{p^2k - k^2p} \times \ln \left(\frac{M_p^k}{M_k^p} \right) \quad (3.6)$$

Ces deux relations ainsi que la règle de normalisation imposent qu'au moins 3 moments pourraient être équivalents entre la loi Titan-2D et la loi Log-N. Tous les autres moments peuvent être calculés à partir de la fonction α et c'est donc cette dernière qui impose les relations de proportionnalité entre les moments de chaque loi.

Dans le cas de la loi Log-N, le facteur α correspond exactement à l'équation 3.2. Si l'on impose les mêmes restrictions aux deux lois (forme invariante) alors le paramètre σ_0 est fixé. Le facteur α de la loi Log-N ne dépend plus que de l'ordre k .

D'après leur forme, rien n'indique, a priori, que les relations 3.2 et 3.3 soient égales. Le comportement *in fine* des lois microphysiques devrait donc être différent.

En ce qui concerne la coagulation, le poids des moments intermédiaires varie selon les ordres et il est difficile de quantifier l'erreur finale commise sur le processus (en partant du principe que la loi Titan-2D représente le meilleur cas). Certains moments peuvent toutefois être entachés d'une erreur importante conduisant inévitablement à une divergence des résultats. Dans le cas de la microphysique des nuages, seul le processus de nucléation fait intervenir le facteur de forme α . La relation mise en jeu est même très simple puisque l'évolution du moment d'ordre k est directement proportionnel à la fonction $\alpha(k + 3)$.

En poussant la réflexion, on s'aperçoit que si l'on ne traitait que la microphysique des nuages en moments qui ne nécessite que les ordres $k, k + 3$ et $k + 6$, on pourrait

très bien se contenter de substituer la fonction de distribution par une loi Log-Normale⁵. Il faudrait tout de même répartir le choix des ordres pour calculer les paramètres de la loi en les répartissant selon k , $k + 3$ et $k + 6$.

La figure 3.3 présente d'une part les moments M_k associés à chaque distribution présentée ici en fonction de leur ordre et d'autre part le rapport de ces moments. Les paramètres de la loi Log-N ont été calculés à partir des moments M_3 et M_6 de la loi Titan-2D en suivant les relations 3.5 et 3.6 ($k = 3$ et $p = 6$) afin de refléter le point évoqué dans le paragraphe précédent.

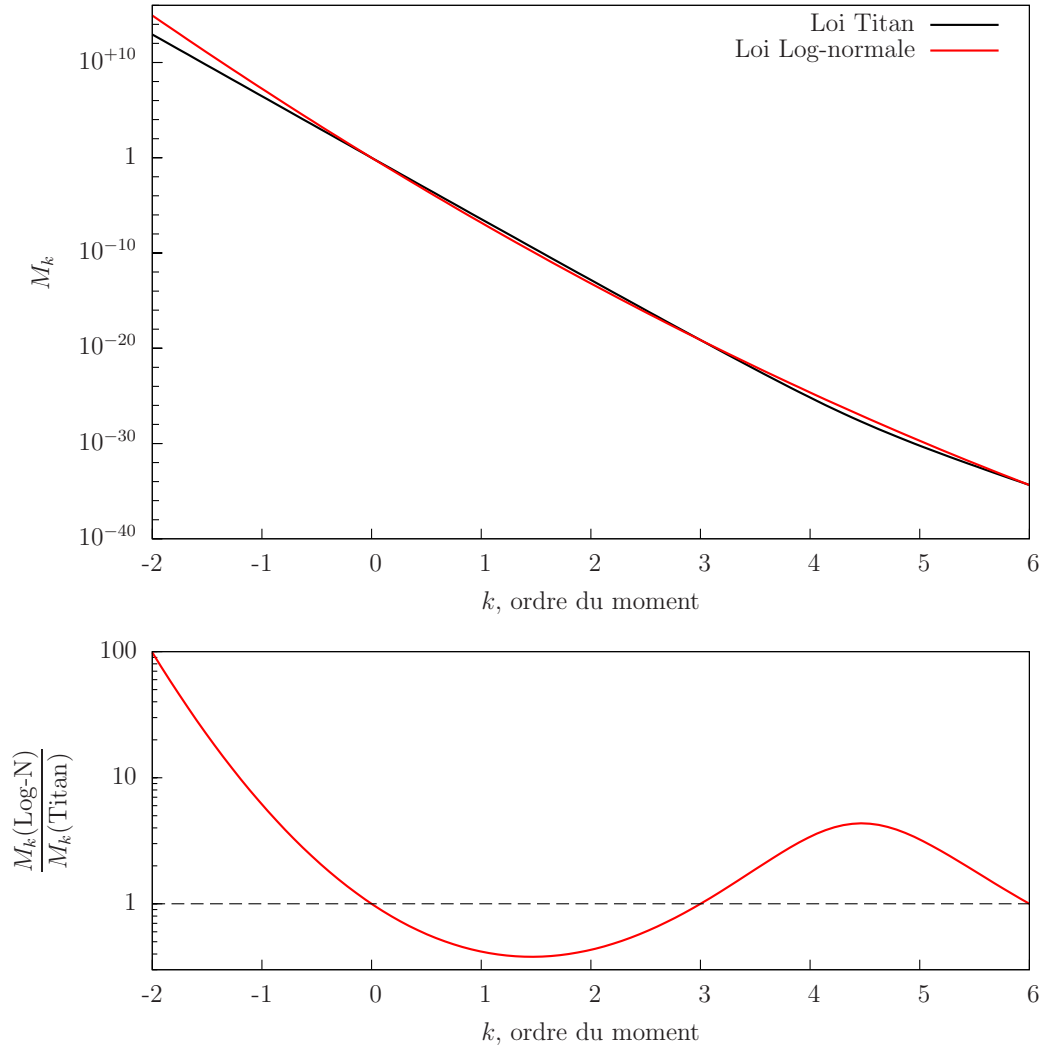


FIGURE 3.3 – **Haut** : Moments des deux lois distribution en fonction de leur ordre. **Bas** : Rapport des moments d'ordre k de la loi Log-Normale sur ceux de la loi Titan-2D (éq. 2.10). Sur cette figure les ordres 3 et 6 ont été choisis pour calculer les paramètres de la loi Log-Normale « équivalente » à la loi Titan-2D.

Le rapport des moments M_0 , M_3 et M_6 entre les loi Log-N et Titan-2D sont donc bien égaux à 1. Sur l'intervalle d'ordre considéré (domaine d'intérêt dans le

5. Cette substitution n'est valable uniquement qu'avec les choix effectués pour la loi Titan-2D, à savoir 2 paramètres libres seulement.

cas de notre étude), le rapport des moments $M_k(\text{Log-N})/M_k(\text{Titan-2D})$ peut varier d'un facteur 0.4 à 100, ce qui traduit bien les différences de comportements des deux lois vis à vis de la relation 3.1. On peut donc raisonnablement supposer que ces variations induiront des différences sur l'ensemble des lois de la microphysique générale.

3.2.3 Cas des modèles 1D

Nous avons présenté dans la section 2.1.5 la loi de distribution en taille moyenne dans la troposphère pour un modèle 1D (loi Titan-1D). Si on revient sur la figure 2.6 (page 26), on peut remarquer que sa forme est nettement plus proche de celle d'une loi Log-N que son homologue du TGCM-2D. La substitution de la loi Titan-1D (décrite par la table 2.4) par une loi Log-N paraît donc dans ce cas envisageable. Afin de s'en assurer, nous présentons ici une étude similaire à celle décrite dans les deux sections précédentes mais dans le cadre de ce modèle 1D.

La figure 3.4 présente le facteur de forme α pour la loi Titan-1D décrite par les paramètres de la table 2.4. Nous y avons superposé le facteur de forme associé à la loi Titan-2D pour comparaison (figure 3.2). L'utilisation de 4 exponentielles dans l'équation 3.4 permet d'obtenir une excellente précision ($\Delta\alpha/\alpha \approx 5 \times 10^{-8}$). Les paramètres de l'ajustement sont donnés dans la table 3.2.

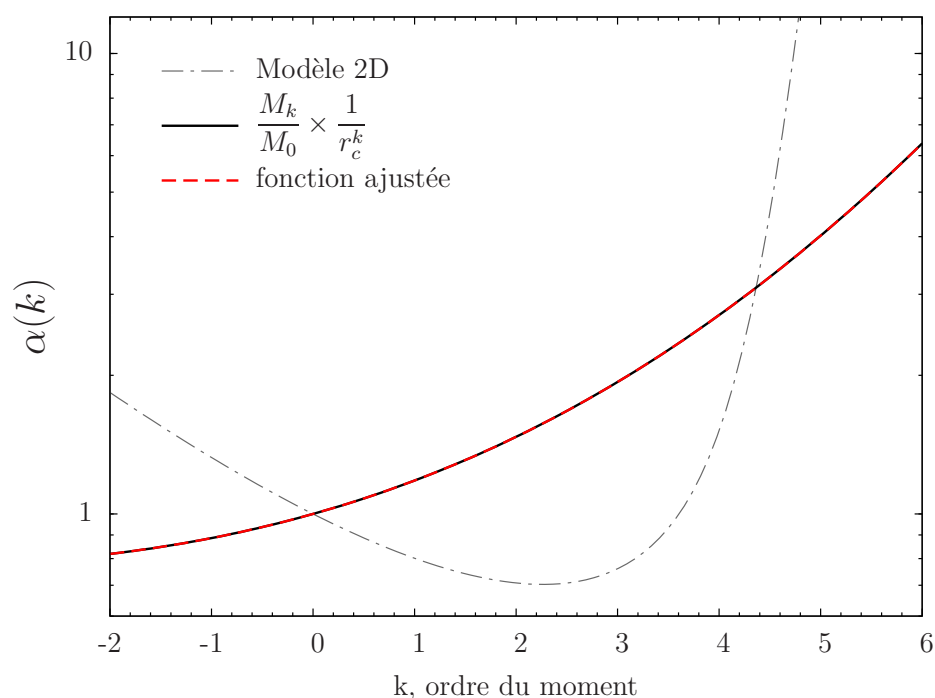


FIGURE 3.4 – Ajustement de la fonction α associée à la loi Titan-1D (voir figure 2.6). La fonction ainsi que son homologue pour le modèle 2D (figure 3.2) sont présentées pour l'intervalle $k \in [-2; 6]$.

i	a_i	b_i	c_i
1	-2.5478×10^{-2}	1.5585	$-3.5432 \times 10^{+1}$
2	9.2949×10^{-3}	3.2607×10^{-2}	-5.1130×10^{-1}
3	4.3259×10^{-2}	2.0918×10^{-1}	-3.3264
4	1.8365×10^{-2}	3.1811×10^{-1}	-1.0096

TABLE 3.2 – Valeurs des coefficients a_i , b_i et c_i de la fonction α pour le modèle 1D. Ces coefficients ne sont valables que pour la loi de distribution définie par les paramètres de la table 2.4.

La comparaison entre la loi Log-N et la loi Titan-1D est présentée dans la figure 3.5. Comme on pouvait s’y attendre, le rapport entre les moments est beaucoup plus proche que dans le cas de la figure 3.3 (modèle 2D). L’erreur commise est au maximum d’environ 6% dans l’intervalle d’ordre choisi. Cette erreur reste acceptable compte tenu des approximations que nous devons faire lors de l’écriture des équations en moments.

De fait, des tests de validations avec l’utilisation d’une loi Log-Normale ont été effectués avec le modèle 1D. Les résultats de ces tests sont décrits dans la section 4.3.3.

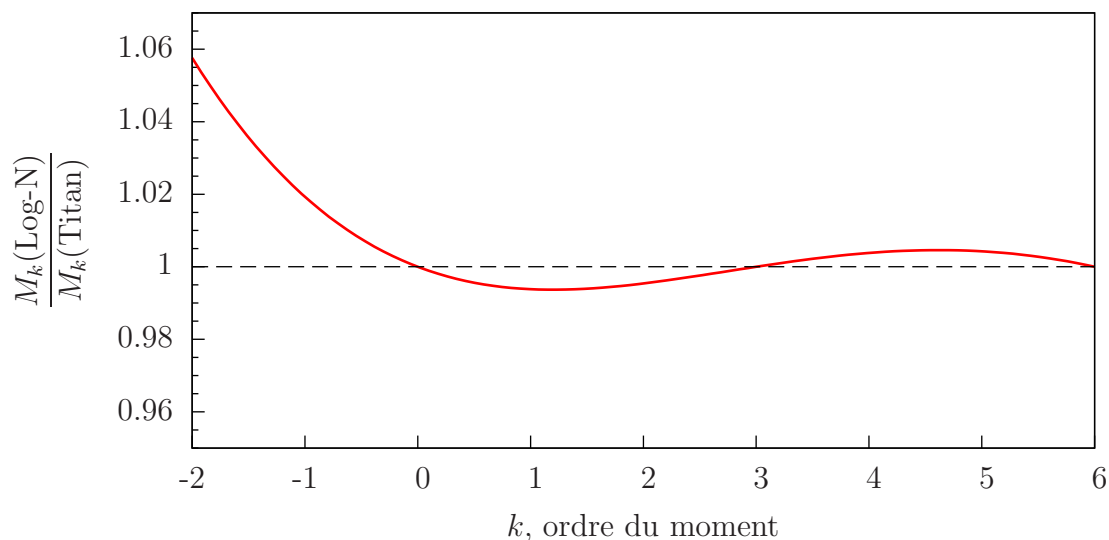


FIGURE 3.5 – Rapport des moments de la loi Log-N/loi Titan-1D sur l’intervalle $k \in [-2; 6]$.

3.3 Résolution des équations de la microphysique de la brume en moments

L’utilisation de la représentation en moments nécessite une réécriture complète des équations de la microphysique. De nombreux travaux ont été consacrés au développement théorique de ces formulations (Lee et al., 1984; Lee and Chen, 1984;

Pratsinis, 1988; Whitby and McMurry, 1997; Park et al., 1999). La plupart de ces formulations ne sont valables que dans un domaine de conditions fixées (régime particulier, propriétés de particules « fixées »). Il est néanmoins possible d'écrire ces équations dans un cadre général jusqu'à un certain point. Nous allons dans la suite reprendre un par un les processus évoqués dans le chapitre 2 et les reformuler en terme d'évolution de moments. Nous verrons alors quelles limites sont imposées à la méthode des moments dans le cadre d'un modèle tel que le TGCM avec les contraintes qu'imposent les spécificités de l'atmosphère de Titan et ses composants.

Dans les conditions spécifiques terrestres, de nombreux travaux sur la représentation paramétrisée ont été développés pour les modèles de climat depuis les années 2000 (Vignati et al., 2004; Mann et al., 2010, pour ne citer qu'eux). Ces travaux se basent généralement sur les études théoriques précédemment citées, que les observations atmosphériques ont permis de simplifier de manière (parfois) drastique tout en conservant une bonne représentativité des processus impliqués. De plus, ces récentes études traitent spécifiquement de processus observés dans l'atmosphère terrestre, qui ne sont pas forcément présents sur Titan. Dans notre cas, nous avons préféré partir des bases théoriques pour essentiellement trois raisons : Premièrement, les observations sur Titan sont beaucoup moins développées (et surtout moins faciles d'accès) que sur Terre. Ensuite, la nature fractale des aérosols modifie en profondeur les lois microphysiques. Enfin, nous voulions proposer ici un développement le plus flexible possible⁶.

Finalement, il paraissait donc plus judicieux de reprendre les lois de la microphysique classiques puis de les adapter en moments. Une fois cette première étape franchie, alors des simplifications pourraient être éventuellement envisagées à partir de comparaisons entre des modèles en sections et en moments⁷.

3.3.1 Coagulation des aérosols

La coagulation est le processus le plus complexe à écrire en terme de moment. D'une part, la nature fractale des aérosols sur Titan impose certaines contraintes dans l'écriture des équations. D'autre part, l'expression du kernel de coagulation change en fonction du régime d'écoulement de l'air autour des aérosols.

Les propriétés fractales des aérosols nécessitent de déterminer exactement la nature de l'expression du rayon dans les différentes équations de coagulation. Nous avons déjà développé dans la section 1.1.2 (page 8) les relations entre le rayon apparent d'un agrégat fractal et le rayon de la sphère équivalente (rayon bulk). La première étape est donc de déterminer si le rayon dans les différentes équations provient d'une écriture de la surface des particules (r_a) ou de leur volume (r_v). La relation entre ces deux définitions du rayon ne dépend que des propriétés fractales des aérosols à savoir, leur rayon de monomère (r_m) et leur dimension fractale (D_f). Nous rappelons ici quelques relations utiles entre le nombre de monomères N_m , le

6. Nous verrons néanmoins par la suite que certains choix doivent être pris en fonction du contexte, notamment sur les conventions de coagulation (voir p. 56).

7. Ce type d'étude n'a pas été réalisée pendant la thèse.

rayon des monomères r_m , r_v et r_a :

$$\begin{aligned} r_v &= N_m^{1/3} r_m \quad ; \quad r_a = N_m^{1/D_f} r_m \\ r_a &= r_v^{3/D_f} r_m^{\frac{D_f-3}{D_f}} \quad \left(r_v = r_a^{3/D_f} r_m^{\frac{3-D_f}{3}} \right) \end{aligned} \quad (3.7)$$

Pour une sphère compacte⁸, la dimension fractale est $D_f = 3$. On en déduit la relation entre r_a et r_v pour chacun des types sphérique et fractale.

particule sphérique	particule fractale
$r_a = r_v$	$r_a = r_v^{3/D_f} r_m^{\frac{D_f-3}{D_f}}$

Dans la suite, la variable r fera référence au rayon « bulk » et les formulations r_a et r_v ne seront utilisées que lorsqu'il sera nécessaire de distinguer le rayon apparent (r_a) du rayon de la sphère équivalente (r_v , rayon « bulk »).

Les aérosols fractals imposent une seconde contrainte à la réécriture en moments des équations : Ce type de particule est issu de la coagulation de particules de plus petite taille sphériques. Comme le montre la figure 2.2 (page 19), à haute altitude dans l'atmosphère de Titan, les deux types de particule sont présents. Afin de pouvoir développer correctement les équations, il est nécessaire de pouvoir distinguer les particules fractales des particules sphériques au sein de la population globale. Ceci peut être effectué en considérant la loi de distribution en taille des particules comme étant bi-modale, chacun des modes représentant alors un type de particule (sphérique ou fractale). Nous détaillerons par la suite ce qu'implique ce choix sur l'écriture des équations.

La transition entre les deux régimes d'écoulement (continu et moléculaire) se fait par le biais d'une correction sur le kernel de coagulation que nous avons présenté dans la section 2.3.2 dédiée à la coagulation (voir page 32). Dans les régimes continu et proche continu ($Kn \lesssim 1$), le coefficient de diffusion⁹ des particules doit lui aussi être ajusté à l'aide de la correction de Cunningham-Millikan que nous rappelons ici :

$$\begin{aligned} F_{CM} &= 1 + Kn [1.257 + 0.4 \exp(-1.1 \times Kn^{-1})] \\ \text{Où } Kn &= \frac{\lambda_g}{r_a} \end{aligned}$$

En l'état, cette correction ne permet pas d'écrire les équations de coagulation en moment car le terme $\exp(-1.1 \times Kn^{-1})$ ne peut être développé en polynôme du rayon.

Afin de résoudre ce problème et d'écrire les équations de coagulation en moments sur l'ensemble des régimes d'écoulement, Pratsinis (1988) puis Park et al. (1999) ont proposé l'utilisation d'une moyenne harmonique des deux cas extrêmes du régime

8. L'emploi de D_f pour caractériser une sphère compacte est ici quelque peu abusif, car une sphère compacte n'est pas un objet fractal.

9. Le coefficient de diffusion intervient à la fois dans le kernel de coagulation et dans la correction interpolée de Fuchs (1964).

d'écoulement. L'idée est dans un premier temps d'écrire l'équation d'évolution du moment de la distribution dans chacun des cas pour lesquels l'expression du kernel de coagulation est bien établie. Ensuite, l'application de la moyenne harmonique ($1/\mu(X) = \sum_i 1/X_i$) aux deux « kernels¹⁰ » obtenus permet de décrire l'évolution du moment dans les régions de transition de régime.

A ma connaissance, dans la littérature, l'emploi de cette méthode n'a été effectué que dans le cas de distribution mono-modale et pour un type de particule unique. L'association de deux modes composés de types de particule différents complexifie l'utilisation de ce type de méthode et nous verrons par la suite dans quelle mesure il est possible de mettre en place cette méthode.

Dans la suite de cette partie consacrée aux lois de coagulation, nous présenterons dans un premier temps, l'équation générale d'évolution du moment d'ordre k en fonction des modes de particule. Puis nous réécrivons les kernels de coagulation afin de permettre la transformation en moment et nous présenterons les équations d'évolution pour deux moments. Enfin nous discuterons d'une part de l'emploi de la moyenne harmonique et d'autre part de la représentation de l'effet de la charge électrique en moments.

3.3.1.1 Lois de coagulation en présence de 2 modes

Lors d'une coagulation entre deux particules i et j , le moment perdu correspond à $(r_i^k + r_j^k)$ et le moment gagné à $r_{ij}^k = (r_i^3 + r_j^3)^{k/3}$. Notons que la coagulation conserve le volume total lors du processus, les rayons présentés ici sont donc directement des rayons de sphère équivalente. Le passage de l'équation d'évolution de la distribution à celle de son moment d'ordre k est direct et s'écrit de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \frac{dM_k}{dt} = & \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta(r_i, r_j) (r_i^3 + r_j^3)^{k/3} n(r_i)n(r_j) dr_i dr_j}_{\text{« Gain » de moments.}} \\ & - \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta(r_i, r_j) (r_i^k + r_j^k) n(r_i)n(r_j) dr_i dr_j}_{\text{« Perte » de moments.}} \end{aligned} \quad (3.8)$$

Cette équation est valable quelque soit la forme de la fonction $n(r)$ ou le type de particule considéré et n'émet aucune hypothèse sur le kernel de coagulation $\beta(r_i, r_j)$.

Si la population d'aérosols ne comporte qu'un seul type de particule, le calcul est direct. Pour une loi de distribution bi-modale définie par $n(r) = n_1(r) + n_2(r)$, une simple substitution permet d'obtenir l'équation générale d'évolution du moment

10. A ce stade, il ne s'agit plus du coefficient de coagulation entre deux particules mais plutôt d'une forme intégrée de ce dernier sur la distribution.

d'ordre k sous l'effet de la coagulation (Whitby and McMurry (1997)) :

$$\begin{aligned}
 \frac{dM_k}{dt} &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta(r_i, r_j) (r_i^3 + r_j^3)^{k/3} [n_1(r_i) + n_2(r_j)] \\
 &\quad \times [n_1(r_i) + n_2(r_j)] dr_i dr_j \\
 &\quad - \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta(r_i, r_j) (r_i^k + r_j^k) [n_1(r_i) + n_2(r_j)] \\
 &\quad \times [n_1(r_j) + n_2(r_j)] dr_i dr_j
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

L'association d'un type de particule spécifique à chacun des modes complexifie le problème et il n'est plus possible d'écrire l'équation 3.9 telle quelle. Ce degré de complexité est dû au fait que le kernel de coagulation va changer de forme selon les différentes interactions entre type de particules. Il existe autant de kernel de coagulation que de types d'interactions possibles :

- Interaction entre particules du *mode sphérique* (coagulation intra-modale) que l'on notera SS .
- Interaction entre particules du *mode fractal* (coagulation intra-modale) que l'on notera FF .
- Interaction entre des particules du *mode sphérique* et des particules du *mode fractal* (coagulation inter-modale) que l'on notera SF .

Nous définirons désormais la loi de distribution bi-modale de la manière suivante : $n(r) = n_S(r) + n_F(r)$, les indices S (sphérique) et F (fractal) faisant référence à la fois au mode et au type de particule.

En reprenant le même raisonnement que pour l'équation 3.8 et en explicitant les trois interactions possibles, on obtient la forme la plus générale de l'équation d'évolution du moment d'ordre k pour une loi de distribution à deux modes de type de particules différents :

$$\begin{aligned}
 \frac{dM_k}{dt} &= \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{SS}(r_i, r_j) \left[(r_i^3 + r_j^3)^{k/3} - r_i^k - r_j^k \right] n_S(r_i) n_S(r_j) dr_i dr_j}_{\text{Coagulation intra-modale, particules sphériques}} \\
 &\quad + \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{FF}(r_i, r_j) \left[(r_i^3 + r_j^3)^{k/3} - r_i^k - r_j^k \right] n_F(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j}_{\text{Coagulation intra-modale, particules fractales}} \\
 &\quad + \underbrace{\int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{SF}(r_i, r_j) \left[(r_i^3 + r_j^3)^{k/3} - r_i^k - r_j^k \right] n_S(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j}_{\text{Coagulation inter-modale}} \\
 &= \left. \frac{dM_k}{dt} \right|_{SS} + \left. \frac{dM_k}{dt} \right|_{FF} + \left. \frac{dM_k}{dt} \right|_{SF}
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

Le développement de l'équation 3.10 ne peut se poursuivre sans l'adoption de conventions décrivant les règles de coagulation dans les différents cas d'interaction entre particules. Nous les citons ici :

- C1** La particule résultant de la coagulation de deux particules du mode *sphérique* peut être assignée au mode *sphérique* ou au mode *fractal* selon une probabilité à établir.
- C2** La particule résultant de la coagulation de deux particules du mode *fractal* reste dans ce même mode.
- C3** La particule résultant de la coagulation de deux particules de mode différent (inter-modale) est affectée au mode de particules fractales.

TABLE 3.3 – Conventions choisies pour les lois de coagulation en présence d’un mode de particules sphérique et d’un mode de particules fractales.

Les trois conventions de la table 3.3 représentent chacune un aspect du fait que les particules fractales sont issues de la coagulation de particules sphériques et qu’en ce sens on les considère systématiquement comme plus grandes que les particules sphériques. Nous détaillerons au fil des calculs les implications et conséquences qu’ont les conventions sur les lois de la coagulation.

A ces trois conventions, nous ajoutons un dernier point important : Les deux lois de distributions associées à chacun des modes sont totalement indépendantes l’une de l’autre. Cette notion est en partie déjà induite dans la définition de la loi bi-modale, mais il est important de la rappeler ici car elle permet de décorréler complètement les deux variables r_i et r_j . Dès lors il sera possible de séparer chaque terme des intégrales de l’équation 3.10 en fonction des moments M_k^S et M_k^F associés respectivement au mode sphérique et au mode fractal. Par exemple, pour une intégrale quelconque I faisant intervenir les deux modes, on peut écrire :

$$\begin{aligned}
 I &= \int_0^\infty \int_0^\infty (r_i^p + r_j^k) n_S(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j \\
 I &= \int_0^\infty \int_0^\infty r_i^p n_S(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j + \int_0^\infty \int_0^\infty r_j^k n_S(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j \\
 &= \int_0^\infty r_i^p n_S(r_i) dr_i \int_0^\infty n_F(r_j) dr_j + \int_0^\infty n_S(r_i) dr_i \int_0^\infty r_j^k n_F(r_j) dr_j \\
 &= M_p^S M_0^F + M_0^S M_k^F
 \end{aligned}$$

Ce type de transformation, à condition de pouvoir développer les termes de chaque intégrale en polynômes de r , représente la majeure partie des calculs effectués lors de la réécriture de la coagulation en moments.

L’équation 3.10 peut à présent être développée afin de faire apparaître les moments M_k^S et M_k^F , associés à chacun des modes de la loi de distribution qui sont en réalité les variables du problème. Par la suite nous allons décrire l’un après l’autre les 3 termes $\frac{dM_k}{dt}|_{SS}$, $\frac{dM_k}{dt}|_{FF}$ et $\frac{dM_k}{dt}|_{SF}$ en fonction des moments M_k^S et M_k^F . Le schéma présenté en figure 3.6 synthétise l’ensemble des développements nécessaires à la mise en équations des lois de coagulation dans le cas de figure que nous nous sommes fixé.

$$\begin{aligned}
 & \left. \frac{dM_k}{dt} \right|_{coag} \tag{1} \\
 & \overbrace{\left. \frac{dM_k}{dt} \right|_{SS} + \left. \frac{dM_k}{dt} \right|_{FF} + \left. \frac{dM_k}{dt} \right|_{SF}} \tag{2} \\
 & \underbrace{\left. \frac{dM_k^S}{dt} \right|_{SS} + \left. \frac{dM_k^F}{dt} \right|_{SS}} + \left. \frac{dM_k^F}{dt} \right|_{FF} + \underbrace{\left. \frac{dM_k^S}{dt} \right|_{SF} + \left. \frac{dM_k^F}{dt} \right|_{SF}} \tag{3} \\
 & \underbrace{\left. \frac{dM_k^{S,G}}{dt} \right|_{SS} + \left. \frac{dM_k^{S,P}}{dt} \right|_{SS}}
 \end{aligned}$$

FIGURE 3.6 – Schéma de développement de l'équation de la coagulation dans le cas d'une distribution bi-modale incluant deux types de particule (sphérique, fractale).

Dans ce schéma, nous chercherons à obtenir la forme de l'équation de coagulation correspondant à la ligne (3). La quatrième ligne est présentée à titre d'information : L'écriture systématique en terme de gain et de perte pour chaque cas de figure n'est pas obligatoire (et alourdit les calculs), exception faite du cas de la coagulation sphérique-sphérique à cause de la convention **C1**.

3.3.1.2 Coagulation intra-modale (SS, FF)

Les conventions que nous avons décrites ci-dessus, nous obligent, pour la coagulation intra-modale, à décrire différemment les interactions sphérique-sphérique (SS) d'une part et fractale-fractale (FF) d'autre part.

- *Intéactions entre particules du mode S (SS) :*

La coagulation intra-modale SS induit des gains et des pertes de moments. Lors de cette interaction, le mode S subit à la fois un gain et une perte de moments, tandis que le mode F ne peut que subir un gain de moments.

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{dM_k}{dt} \right|_{SS} &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{SS}(r_i, r_j) \left[(r_i^3 + r_j^3)^{k/3} - r_i^k - r_j^k \right] n_S(r_i) n_S(r_j) dr_i dr_j \\
 &= \left. \frac{dM_k^S}{dt} \right|_{SS} + \left. \frac{dM_k^F}{dt} \right|_{SS}
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

L'intégrale de l'équation 3.11 fait uniquement intervenir la fonction $n_S(r)$ associée au type sphérique. Il en résulte que seul le terme $\left. \frac{dM_k^S}{dt} \right|_{SS}$ est calculé explicitement. Nous faisons apparaître, le second terme $\left. \frac{dM_k^F}{dt} \right|_{SS}$ en conséquence de la convention **C1** qui implique qu'une partie du moment d'ordre k du mode sphérique peut se retrouver assigné au mode fractal. Pour représenter ce processus, nous allons

calculer l'évolution du moment M_k^S en séparant les termes de gain et de perte et en introduisant la probabilité p_k associée au transfert de moment entre les deux modes :

$$\left. \frac{dM_k^S}{dt} \right|_{SS} = p_k \times \frac{dM_k^{S,G}}{dt} - \frac{dM_k^{S,P}}{dt} \quad (3.12)$$

$$\left. \frac{dM_k^{S,G}}{dt} \right|_{SS} = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{SS}(r_i, r_j) (r_i^3 + r_j^3)^{k/3} n_S(r_i) n_S(r_j) dr_i dr_j$$

$$\left. \frac{dM_k^{S,P}}{dt} \right|_{SS} = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{SS}(r_i, r_j) (r_i^k + r_j^k) n_S(r_i) n_S(r_j) dr_i dr_j$$

$\left. \frac{dM_k^{S,G}}{dt} \right|_{SS}$ et $\left. \frac{dM_k^{S,P}}{dt} \right|_{SS}$ représentent respectivement le gain et la perte de moment d'ordre k du mode sphérique lors du processus. Le facteur p_k représente quant à lui, la probabilité qu'une partie du gain de moment reste dans le mode de particules sphériques (application de la convention **C1**). Il est également nécessaire d'en tenir compte pour le mode de particules fractales et donc d'actualiser son moment M_k^F (d'où la présence du terme $\left. \frac{dM_k^F}{dt} \right|_{SS}$ dans l'équation 3.11) :

$$\left. \frac{dM_k^F}{dt} \right|_{SS} = (1 - p_k) \times \left. \frac{dM_k^{S,G}}{dt} \right|_{SS} \quad (3.13)$$

La définition de cette probabilité est assez simple : Si la taille résultante de la coagulation est inférieure au rayon de monomère (r_m) alors l'aérosol reste sphérique, dans le cas contraire, il « devient » fractal. On peut alors exprimer cette probabilité en déterminant la fraction de la tendance du gain de moment restant dans le mode sphérique. Pour la calculer, il est nécessaire de revenir à la forme classique de l'équation d'évolution de la coagulation (éq. 2.15) et plus particulièrement sur la partie gain de cette expression. Nous réécrivons donc ici, uniquement cette partie en notant $dn(r)^+/dt$ le gain de particule de taille r pour la coagulation :

$$\frac{d}{dt} n(r)^+ = \frac{1}{2} \int_0^r K(u, r-u) n(u) n(r-u) du \quad (3.14)$$

Le gain de moment d'ordre k pour des particules de taille inférieure ou égale au rayon du monomère s'exprime alors simplement en intégrant la relation 3.14. Il en va de même pour le gain total (ie : sur toute la distribution) :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} M_k^{S+}(r \leq r_m) &= \int_0^{r_m} r^k \frac{d}{dt} n(r)^+ dr \\ \frac{d}{dt} M_k^{S+}(r \rightarrow \infty) &= \int_0^{+\infty} r^k \frac{d}{dt} n(r)^+ dr \end{aligned}$$

La probabilité p_k est alors simplement égal au rapport des deux tendances obtenues :

$$p_k = \frac{\int_0^{r_m} r^k \frac{d}{dt} n(r)^+ dr}{\int_0^{+\infty} r^k \frac{d}{dt} n(r)^+ dr} \quad (3.15)$$

Cette probabilité dépend de la loi de distribution utilisée, en conséquence p_k est une fonction du rayon caractéristique (r_{C_s}) de cette loi. De plus, elle dépend aussi directement du coefficient de coagulation est donc du régime d'écoulement : On distinguera donc par la suite, les deux probabilités à l'aide des exposants CO pour le régime continu et FM pour le régime moléculaire.

Les tests numériques effectués sur ces probabilités montrent que ces dernières ne dépendent pas localement de la température ni de la pression. De fait, pour un régime donné et une valeur de k fixée, elles devraient pouvoir être représentées par des fonctions à une seule variable, r_{C_s} . Ce travail est en cours de réalisation et permettra à terme de simplifier le calcul en ligne de l'équation 3.15 qui est d'une extrême lourdeur.

La figure 3.7 présente à titre d'exemple, la fonction $(1 - p_k)$, correspondant à la probabilité de transfert de moment du mode sphérique vers le mode fractal pour les deux régimes d'écoulement et deux valeurs de k .

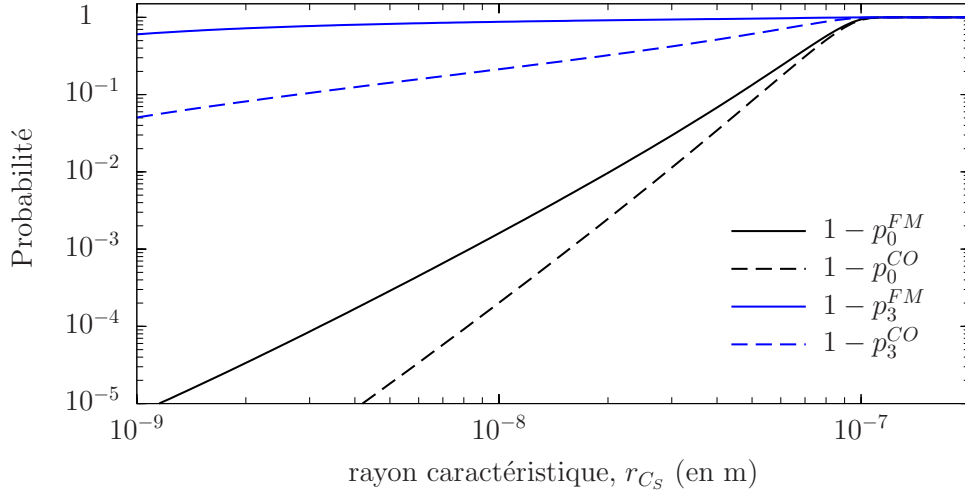


FIGURE 3.7 – Probabilité de transfert de moment du mode sphérique vers le mode fractal pour $k = 0$ (en noir) et $k = 3$ (en bleu). Les probabilités sont tracées dans les régimes d'écoulement continu (CO, en tiret) et moléculaire (FM, en trait plein).

Il est intéressant de noter ici que cette probabilité est non nulle pour le moment d'ordre 3 qui correspond au volume total du mode sphérique (voir figure 3.7) : Une conséquence de la convention **C1** est que la coagulation intra-modale sphérique ne conserve pas le volume au sein de ce mode. En revanche la coagulation dans son ensemble doit conserver le volume total de la population de particules, ce qui est assuré dans ce cas précis par l'équation 3.13.

- *Interactions entre particules du mode F (FF) :*

D'après les conventions choisies, la coagulation intra-modale FF est un cas similaire du concept appliqué à la coagulation intra-modale SS, pour lequel la probabilité de transfert serait systématiquement nulle. De ce fait, l'évolution du moment M_k^F

associé au mode de particules fractales correspond strictement à l'équation 3.8 :

$$\begin{aligned} \left. \frac{dM_k^F}{dt} \right|_{FF} &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{FF}(r_i, r_j) (r_i^3 + r_j^3)^{k/3} n_F(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{FF}(r_i, r_j) (r_i^k + r_j^k) n_F(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j \end{aligned} \quad (3.16)$$

Contrairement à la coagulation SS, les interactions FF conservent bien le volume total du mode fractal. Pour s'en assurer, il suffit de substituer la valeur 3 à k dans l'équation 3.16 pour remarquer que l'on obtient bien $dM_k^F/dt = 0$.

3.3.1.3 Coagulation inter-modale (SF)

La coagulation inter-modale fait intervenir les deux modes et donc les moments M_k^S et M_k^F . Une fois de plus, ce sont les conventions qui permettent de séparer les divers composantes de l'équation générale (voir éq. 3.8) en fonction des deux moments cités ci-dessus. D'après la convention $\mathcal{C}\mathfrak{B}$, le gain de moments, $(r_i^3 + r_j^3)^{k/3}$ ne peut être qu'assigné au mode fractal. Les pertes $(r_i^k + r_j^k)$, quant à elles, doivent être assignées aux deux modes en respectant bien l'origine des particules.

$$\left. \frac{dM_k}{dt} \right|_{SF} = \left. \frac{dM_k^S}{dt} \right|_{SF} + \left. \frac{dM_k^F}{dt} \right|_{SF}$$

$$\left. \frac{dM_k^S}{dt} \right|_{SF} = \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{SF}(r_i, r_j) (-r_i^k) n_S(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j \quad (3.17)$$

$$\left. \frac{dM_k^F}{dt} \right|_{SF} = \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{SF}(r_i, r_j) \left[(r_i^3 + r_j^3)^{k/3} - r_j^k \right] n_S(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j \quad (3.18)$$

3.3.1.4 Synthèse de l'équation de coagulation :

En (re)combinant les équations 3.12 à 3.18, on obtient finalement l'équation générale d'évolution pour le moment d'ordre k de chaque mode :

- $\frac{dM_k^S}{dt} = \left. \frac{dM_k^{S,G}}{dt} \right|_{SS} + \left. \frac{dM_k^{P,G}}{dt} \right|_{SS} + \left. \frac{dM_k^S}{dt} \right|_{SF}$
- $\frac{dM_k^S}{dt} = \frac{p_k}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{SS}(r_i, r_j) (r_i^3 + r_j^3)^{k/3} n_S(r_i) n_S(r_j) dr_i dr_j$
 $\quad - \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{SS}(r_i, r_j) (r_i^k + r_j^k) n_S(r_i) n_S(r_j) dr_i dr_j$
 $\quad + \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{SF}(r_i, r_j) (-r_i^k) n_S(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j$ (3.19)
- $\frac{dM_k^F}{dt} = \left. \frac{dM_k^F}{dt} \right|_{SS} + \left. \frac{dM_k^F}{dt} \right|_{FF} + \left. \frac{dM_k^F}{dt} \right|_{SF}$

$$\begin{aligned}
 \frac{dM_k^F}{dt} &= \frac{(1-p_k)}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{SS}(r_i, r_j) (r_i^3 + r_j^3)^{k/3} n_S(r_i) n_S(r_j) dr_i dr_j \\
 &+ \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{FF}(r_i, r_j) \left[(r_i^3 + r_j^3)^{k/3} - r_i^k - r_j^k \right] n_F(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j \quad (3.20) \\
 &+ \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{SF}(r_i, r_j) \left[(r_i^3 + r_j^3)^{k/3} - r_j^k \right] n_S(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j
 \end{aligned}$$

On peut remarquer au passage que la somme des équations 3.19 et 3.20 est bien égale à l'équation 3.10.

3.3.1.5 Coefficient de coagulation

Jusqu'ici, nous n'avons émis aucune hypothèse concernant les termes β , n_S et n_F . Les deux équations 3.19 et 3.20 sont donc valables quelque soit le kernel de coagulation utilisé et/ou les lois de distribution choisies pour n_S et n_F . Rappelons tout de même que la forme des équations n'est valable uniquement que dans le cadre fixé par les conventions choisies dans la table 3.3. Dans les paragraphes suivants nous allons présenter et développer les kernel de coagulation associés à chaque type d'interaction pour chaque cas extrême du régime d'écoulement. Puis nous finirons cette section portant sur la coagulation en présentant la forme synthétique de l'équation d'évolution pour les moments d'ordre 3 et 0. Pour la loi de distribution Titan, deux paramètres sont laissés libres (r_c , N_0 , voir page 44) et donc 2 moments suffisent. Nous portons notre choix sur ces 2 ordres pour 2 raisons :

- Ces deux moments ont une signification physique explicite : Le nombre total de particules (M_0) et le volume total (M_3 ; au facteur $\frac{4}{3}\pi$ près).
- Ces deux ordres permettent de simplifier la plupart des équations que nous traitons ici.

N'oublions pas que la fonction $\alpha(k)$ assure l'auto-cohérence des moments de la distribution. L'évolution d'un moment quelconque M_k est de toutes façons assurée quelque soit les ordres choisis.

Comme nous l'avons souligné, il est nécessaire de décrire autant de kernels de coagulation qu'il existe d'interactions entre particules. Comme nous souhaitons réécrire toutes les équations en fonction du rayon bulk, r_v , on appliquera systématiquement la relation 3.7 lorsque le rayon apparent est celui d'une particule fractale. Cette correspondance est donnée par l'association variable/distribution (par exemple $n_S(r_i)$). Ainsi dans les équations, la variable r_i est toujours associée à une particule sphérique tandis que r_j fait référence à une particule de type fractal. Ce fait est important car à partir du moment où deux particules de nature différente interagissent entre elles, le kernel de coagulation β n'est plus symétrique !

Régime continu

Dans les régimes continu et proche-continu ($Kn \lesssim 1$), le kernel de coagulation pour deux particules i et j de même nature, est donné par la relation suivante (Fuchs, 1964) :

$$\beta_{CO}(r_i, r_j) = 4\pi (r_{a_i} + r_{a_j}) \times (D_i + D_j) \quad (3.21)$$

Où $D_i = \frac{kT}{6\pi\eta r_{a_i}} (1 + A \times Kn_i)$ est le coefficient de diffusion; $Kn_i = \frac{\lambda_g}{r_{a_i}}$ est le nombre de Knudsen de la particule i (idem pour j); λ_g est le libre parcours moyen du gaz; η la viscosité de l'air; k la constante de Boltzmann et T la température.

Le terme $(1 + A \times Kn)$ représente la correction permettant d'assurer la transition entre le régime continu et proche-continu (correction « slip-flow » au premier ordre). Ce terme vient en remplacement de l'habituelle correction de Cunningham-Millikan afin de s'affranchir de la dépendance en exponentielle du rayon et permettre le développement du kernel en puissance de r . [Park et al. \(1999\)](#) propose une valeur de $A = 1.591$. La figure 3.8 présente l'erreur effectuée sur la simplification de la correction.

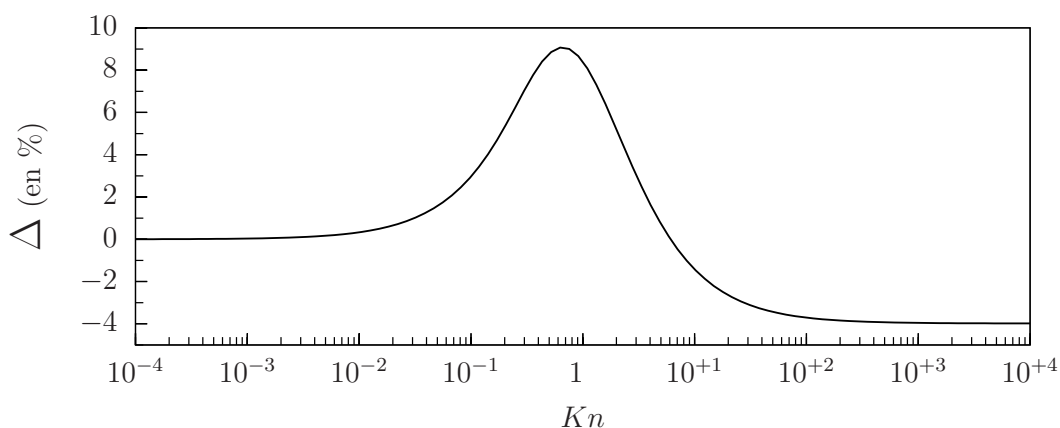


FIGURE 3.8 – Erreur relative $\Delta = \frac{F_{CM} - (1 + A \times Kn)}{F_{CM}}$ commise sur la correction slip-flow au premier ordre pour $A = 1.591$.

L'erreur est comprise entre -4% et $+9\%$ dans l'intervalle $Kn \in [0.1; 20]$. Cette erreur reste acceptable d'autant qu'aux régions correspondant à ces valeurs de Kn (basse stratosphère et troposphère), la coagulation est très faible.

Pour des valeurs de $A \in [1.5; 1.6]$, l'erreur commise est toujours du même ordre de grandeur $\Delta \pm 10\%$ comme le montre la figure 3.9. Nous choisirons donc d'utiliser la valeur de A proposée par [Park et al. \(1999\)](#) pour cette étude.

En appliquant les règles citées plus haut, Les trois kernel β_{SS} , β_{FF} et β_{SF} s'écrivent sous leur forme la plus développée de la manière suivante :

$$\beta_{CO}^{SS}(r_i, r_j) = K_{CO} \left[2 + \frac{r_i}{r_j} + \frac{r_j}{r_i} + C \left(\frac{1}{r_i} + \frac{1}{r_j} + \frac{r_j}{r_i^2} + \frac{r_i}{r_j^2} \right) \right] \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} \beta_{CO}^{FF}(r_i, r_j) = K_{CO} & \left[2 + \left(\frac{r_i}{r_j} \right)^{3/D_f} + \left(\frac{r_j}{r_i} \right)^{3/D_f} \right. \\ & \left. + \frac{C}{E} \left(\frac{1}{r_i^{3/D_f}} + \frac{1}{r_j^{3/D_f}} + \frac{r_j^{3/D_f}}{r_i^{6/D}} + \frac{r_i^{3/D_f}}{r_j^{6/D}} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.23)$$

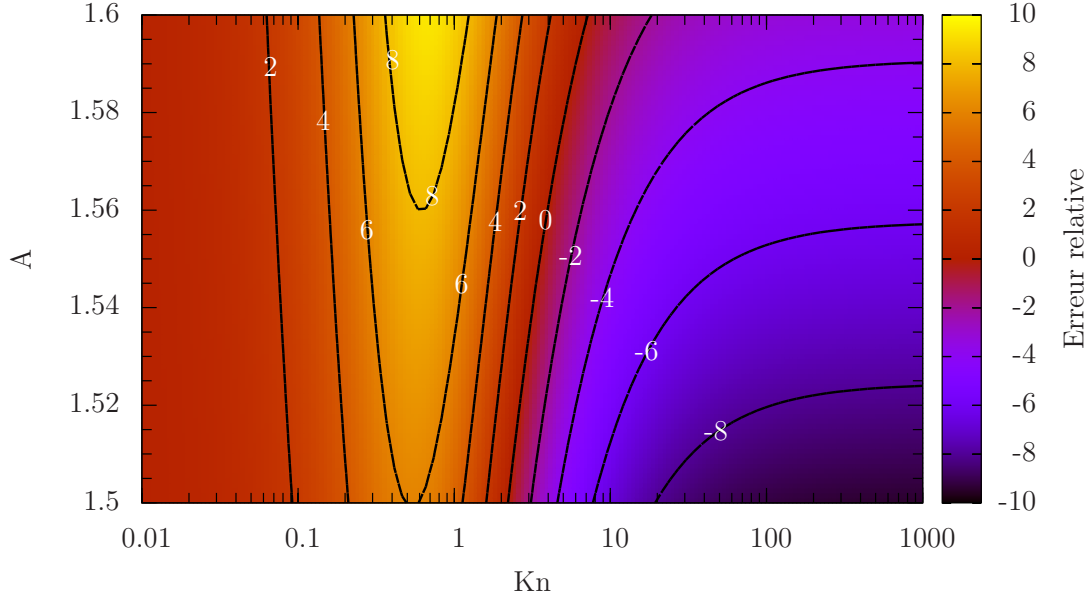


FIGURE 3.9 – Variations de l’erreur relative présentée dans la figure 3.9 en fonction du coefficient A .

$$\beta_{CO}^{SF}(r_i, r_j) = K_{CO} \left[2 + \frac{r_i}{E r_j^{3/D_f}} + \frac{E r_j^{3/D_f}}{r_i} + C \left(\frac{1}{r_i} + \frac{1}{E r_j^{3/D_f}} + \frac{E r_j^{3/D_f}}{r_i^2} + \frac{r_i}{E^2 r_j^{6/D_f}} \right) \right] \quad (3.24)$$

Dans l’ensemble de ces équations, le coefficient $E = r_m^{\frac{(D_f-3)}{D_f}}$ fait référence au terme du rayon de monomère, D représente la dimension fractale des agrégats, $C = A \times \lambda_g$ est le facteur lié à la correction Slip-flow et $K_{CO} = 2kT/3\eta$ est le pré-facteur dépendant des propriétés atmosphériques pour le régime continu.

Régime moléculaire

Dans le régime moléculaire ($Kn \gg 1$) le kernel de coagulation est obtenu à partir de la théorie cinétique des gaz et s’écrit sous la forme suivante (Friedlander, 2000) :

$$\beta_{FM}(r_i, r_j) = \left(\frac{6kT}{\rho_p} \right)^{1/2} \times (r_{a_i} + r_{a_j})^2 \sqrt{r_{v_i}^{-3} + r_{v_j}^{-3}} \quad (3.25)$$

En l’état l’expression de $\beta(r_i, r_j)$ ne permet pas de développer les intégrales en polynômes de r_i et r_j dans les équations de la coagulation (éq. 3.19 et 3.20) car le terme $\sqrt{r_{v_i}^{-3} + r_{v_j}^{-3}}$ n’est pas développable en somme ou produit de puissance de r . On introduit donc le coefficient b_k (Lee et al., 1984) afin de développer ce terme en fonction de r : On remplace alors le terme $\sqrt{r_{v_i}^{-3} + r_{v_j}^{-3}}$ par $b_k \times (r_{v_i}^{-3/2} + r_{v_j}^{-3/2})$.

Pour pouvoir calculer explicitement ce coefficient b_k , il est nécessaire de remonter aux intégrales des équations 3.19 et 3.20. Ces dernières sont toutes de la forme

suivante :

$$I = \int_0^\infty \int_0^\infty \beta(r_i, r_j) G(r_i, r_j, k) n(r_i) n'(r_j) dr_i dr_j$$

En substituant β par son expression en 3.25 puis en faisant apparaître le facteur b_k dans l'intégrale, on obtient son expression :

$$\begin{aligned} I &= \int_0^\infty \int_0^\infty \left(\frac{6kT}{\rho_p} \right)^{1/2} (r_{a_i} + r_{a_j})^2 \sqrt{r_{v_i}^{-3} + r_{v_j}^{-3}} G(r_{v_i}, r_{v_j}, k) n(r_i) n'(r_j) dr_i dr_j \\ &= \int_0^\infty \int_0^\infty \left(\frac{6kT}{\rho_p} \right)^{1/2} (r_{a_i} + r_{a_j})^2 b_k \left(r_{v_i}^{-\frac{3}{2}} + r_{v_j}^{-\frac{3}{2}} \right) G(r_{v_i}, r_{v_j}, k) n(r_i) n'(r_j) dr_i dr_j \\ &= b_k \int_0^\infty \int_0^\infty \beta(r_i, r_j) \frac{\left(r_{v_i}^{-\frac{3}{2}} + r_{v_j}^{-\frac{3}{2}} \right)}{\sqrt{r_{v_i}^{-3} + r_{v_j}^{-3}}} G(r_{v_i}, r_{v_j}, k) n(r_i) n'(r_j) dr_i dr_j \\ b_k &= \frac{\int_0^\infty \int_0^\infty \beta(r_i, r_j) G(r_{v_i}, r_{v_j}, k) n(r_i) n'(r_j) dr_i dr_j}{\int_0^\infty \int_0^\infty \beta(r_i, r_j) \frac{\left(r_{v_i}^{-\frac{3}{2}} + r_{v_j}^{-\frac{3}{2}} \right)}{\sqrt{r_{v_i}^{-3} + r_{v_j}^{-3}}} G(r_{v_i}, r_{v_j}, k) n(r_i) n'(r_j) dr_i dr_j} \end{aligned} \quad (3.26)$$

La table 3.4 dresse la liste des coefficients b_k à déterminer numériquement ainsi que les fonctions $G(r_i, r_j, k)$ et les termes des équations dont elles sont extraites dans la cas de la coagulation bi-modale.

coefficient	fonction $G(r_i, r_j, k)$	Équation (interaction) associée
b_k^{T1}	$(r_i^3 + r_j^3)^{k/3}$	Éq. 3.19 – 1 ^{er} terme (SS). Éq. 3.20 – 1 ^{er} terme (SS).
b_k^{T2}	$r_i^k + r_j^k$	Éq. 3.19 – 2 nd terme (SS).
b_k^{T3}	$(r_i^3 + r_j^3)^{k/3} - r_i^k - r_j^k$	Éq. 3.20 – 2 nd terme (FF).
b_k^{T4}	r_i^k	Éq. 3.19 – 3 ^{ème} terme (SF).
b_k^{T5}	$(r_i^3 + r_j^3)^{k/3} - r_j^k$	Éq. 3.20 – 3 ^{ème} terme (SF).

TABLE 3.4 – Définition de b_k (éq. 3.26) et leur fonctions $G(r_i, r_j, k)$ associées selon les différentes interactions possibles lors de la coagulation. Notons que le coefficient b_k^{T1} peut se calculer indifféremment à partir du 1^{er} terme des équations 3.19 ou 3.20.



Les coefficients b_k ne se calculent pas directement en substituant k par l'ordre souhaité dans la fonction $G(r_i, r_j, k)$. Il est bien nécessaire de déterminer de façon numérique b_k à partir de l'équation 3.26 !
La fonction G permet selon l'ordre k choisi de déterminer les équivalences entre les cinq formules de b_k .

Dans le cas de la coagulation intra-modale ($n'(r) = n(r)$), b_k dépend uniquement de la forme de la loi de distribution utilisée, de l'ordre k . Les coefficients b_k^{T1} , b_k^{T2} et b_k^{T3} sont donc indépendants du rayon caractéristique r_C . Dans le cas de la loi Titan telle que décrite dans la section 2.1.5 (éq. 2.10), comme nous figeons la forme de distribution, il est possible d'avoir directement accès aux valeurs de ces trois coefficients à l'ordre k . La coagulation inter-modale est plus complexe à traiter. Ce cas de figure implique deux lois de distribution dont les rayons caractéristiques ne sont a priori pas identiques. Le coefficient b_k devient alors une fonction des rayons caractéristiques des deux lois de distributions.

L'utilisation des coefficients b_k dans l'équation 3.25 permet finalement de développer le kernel de coagulation en puissance de r pour toutes les interactions possibles. Pour chacun des 5 termes des équations 3.19 et 3.20, nous définissons le kernel de coagulation $\beta_{FM}^{TX} = b_k^{TX} \beta_{FM}^{II}$, où TX (avec $X=1,2,\dots,5$) renvoie aux coefficients b_k définis dans la table 3.4 et II est le type d'interaction.

Nous présentons ici les cinq kernels $\beta(r_i, r_j)$ associés à chacun des termes des équations 3.19 et 3.20. Nous verrons dans la pratique qu'en utilisant les ordres 0 et 3, la plupart des b_k deviennent égaux entre eux (voir table 3.5) :

$$\beta_{FM}^{T1}(r_i, r_j) = b_k^{T1} \beta_{FM}^{SS}(r_i, r_j) \quad (3.27)$$

$$\beta_{FM}^{T2}(r_i, r_j) = b_k^{T2} \beta_{FM}^{SS}(r_i, r_j) \quad (3.28)$$

$$\text{Où } \beta_{FM}^{SS}(r_i, r_j) = K_{FM} \left[r_i^{1/2} + 2 r_i^{-1/2} r_j + r_i^{-3/2} r_j^2 + r_i^2 r_j^{-3/2} + 2 r_i r_j^{-1/2} + r_j^{1/2} \right]$$

$$\beta_{FM}^{T3}(r_i, r_j) = b_k^{T3} \beta_{FM}^{FF}(r_i, r_j) \quad (3.29)$$

$$\text{Où } \beta_{FM}^{FF}(r_i, r_j) = K_{FM} E^2 \left[r_i^{\frac{12-3D_f}{2D_f}} + 2 r_i^{\frac{6-3D_f}{2D_f}} r_j^{3/D_f} + r_i^{-3/2} r_j^{6/D_f} + r_i^{6/D_f} r_j^{-3/2} + 2 r_i^{3/D_f} r_j^{\frac{6-3D_f}{2D_f}} + r_j^{\frac{12-3D_f}{2D_f}} \right]$$

$$\beta_{FM}^{T4}(r_i, r_j) = b_k^{T4} \beta_{FM}^{SF}(r_i, r_j) \quad (3.30)$$

$$\beta_{FM}^{T5}(r_i, r_j) = b_k^{T5} \beta_{FM}^{SF}(r_i, r_j) \quad (3.31)$$

$$\text{Où } \beta_{FM}^{SF}(r_i, r_j) = K_{FM} \left[r_i^{1/2} + 2 E r_i^{-1/2} r_j^{3/D_f} + E^2 r_i^{-3/2} r_j^{6/D_f} + r_i^2 r_j^{-3/2} + 2 E r_i r_j^{\frac{6-3D_f}{2D_f}} + E^2 r_j^{\frac{12-3D_f}{2D_f}} \right]$$

Dans l'ensemble de ces équations relatives à la coagulation en régime moléculaire, le coefficient $E = r_m^{\frac{(D_f-3)}{D_f}}$ fait référence au terme du rayon de monomère, D_f représente la dimension fractale des agrégats et $K_{FM} = \sqrt{6kT/\rho_p}$ est le pré-facteur dépendant des propriétés atmosphériques pour le régime moléculaire.

3.3.1.6 Équations d'évolution des moments d'ordre 0 et 3

Nous ne présentons dans ce paragraphe que les formes analytiques simplifiées de l'évolution du couple $(M_0; M_3)$ pour chacun des modes et des régimes d'écoulement. La fonction $\alpha(k) \propto M_k/M_0$ précédemment décrite dans la section 3.2.1 est utilisée ici afin d'éliminer les moments d'ordre intermédiaire apparaissant lors du développement complet des équations d'évolution du moment d'ordre k .

La combinaison et le développement des équations 3.19 et 3.20 avec leur kernel de coagulation associé sont décrits étape par étape en annexe A (page 147) pour M_0^S . L'ensemble des pré-facteurs γ utilisés ci-après est défini en page 152 de cette même annexe.

- *Régime continu :*

$$\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{CO} = (p_0^{CO} - 2) \gamma_0^{SS,CO} \times M_0^{S^2} - \gamma_0^{SF,CO} \times M_0^S M_0^F \quad (3.32)$$

$$\left. \frac{dM_3^S}{dt} \right|_{CO} = (p_3^{CO} - 1) \gamma_3^{SS,CO} \times M_3^{S^2} - \gamma_3^{SF,CO} \times M_3^S M_3^F \quad (3.33)$$

$$\left. \frac{dM_0^F}{dt} \right|_{CO} = (1 - p_0^{CO}) \gamma_0^{SS,CO} \times M_0^{S^2} + \gamma_0^{FF,CO} \times M_0^{F^2} \quad (3.34)$$

$$\left. \frac{dM_3^F}{dt} \right|_{CO} = (1 - p_3^{CO}) \gamma_3^{SS,CO} \times M_3^{S^2} + \gamma_3^{SF,CO} \times M_3^S M_3^F \quad (3.35)$$

- *Régime moléculaire :*

Comme nous l'avons déjà fait remarqué, le choix des ordres 0 et 3 pour les moments permet de simplifier certains coefficients b_k nécessaires à la transformation des kernels de coagulation dans le cas du régime moléculaire. La table 3.5 dresse la liste des égalités entre les différents b_k^{TX} (voir table 3.4). Ces égalités ne peuvent apparaître qu'au sein d'un même mode (donc pour les interactions SS ou FF mais jamais SF).

Ordre	k = 0	k = 3
	$b_0^{T2} = b_0^{T1}$	$b_3^{T2} = b_3^{T1}$
Égalités	$b_0^{T5} = 0$	$b_3^{T3} = 0$
		$b_3^{T5} = b_3^{T4}$

TABLE 3.5 – Égalités des coefficients b_k dans le cas où le couple $(M_0; M_3)$ est utilisé pour paramétrer la coagulation.

On remarquera qu'un coefficient b_k^{TX} nul correspond en réalité à un cas où soit la masse est conservée lors de l'interaction traitée ($b_3^{TX} = 0$), soit le nombre est

conservé ($b_0^{TX} = 0$).

$$\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{FM} = (p_0^{FM} - 2) \gamma_0^{SS,FM} \times M_0^{S^2} - \gamma_0^{SF,FM} \times M_0^S M_0^F \quad (3.36)$$

$$\left. \frac{dM_3^S}{dt} \right|_{FM} = (p_3^{FM} - 1) \gamma_3^{SS,FM} \times M_3^{S^2} - \gamma_3^{SF,FM} \times M_3^S M_3^F \quad (3.37)$$

$$\left. \frac{dM_0^F}{dt} \right|_{FM} = (1 - p_0^{FM}) \gamma_0^{SS,FM} \times M_0^{S^2} - \gamma_0^{FF,FM} \times M_0^{F^2} \quad (3.38)$$

$$\left. \frac{dM_3^F}{dt} \right|_{FM} = (1 - p_3^{FM}) \gamma_3^{SS,FM} \times M_3^{S^2} + \gamma_3^{SF,FM} \times M_3^S M_3^F \quad (3.39)$$

3.3.1.7 Transition de régimes : Moyenne harmonique

Jusqu'ici nous n'avons traité que les deux cas « extrêmes » du régime d'écoulement. Sur Titan, le régime d'écoulement passe continument du régime moléculaire (dans la haute stratosphère) jusqu'au régime continu (troposphère). Il est donc nécessaire de gérer la transition entre ces deux régimes. Nous avons présenté dans la section 2.3.2 du chapitre 2 le facteur correctif développé par Fuchs (1964) permettant de traiter l'ensemble des cas. Nous rappelons ici son expression :

$$F(r_i, r_j, \lambda_p) = \left(\frac{r_{a_i} + r_{a_j}}{r_{a_i} + r_{a_j} + \sqrt{\delta_i^2 + \delta_j^2}} + \frac{4(D_i + D_j)}{\sqrt{G_i^2 + G_j^2} (r_{a_i} + r_{a_j})} \right)^{-1}$$

Où, pour chacune des particules i et j :

$$D = \frac{k_b T}{6\pi\eta r_a} \times \left(1 + \frac{\lambda_p}{r_a} \left[1.257 + 0.4 \exp \left(-1.1 \times \frac{r_a}{\lambda_p} \right) \right] \right)$$

$$G = \sqrt{\frac{6k_b T}{\pi^2 \rho_p r_v^3}}$$

$$\delta = \frac{1}{6\lambda_p} \left[(2r_a + \lambda_p)^3 (4r_a^2 + \lambda_p^2)^{3/2} \right] - 2r_a$$

Ici, r_v et r_a font respectivement référence au rayon bulk et au rayon apparent de la particule (voir page 53).

Cette correction n'est pas développable en polynôme de chacun des rayons r_i et r_j et n'est donc pas utilisable lors de la réécriture en moments des équations d'évolution de la coagulation. Park et al. (1999) ont donc proposé une méthode simple afin de tenir compte de la transition de régime en appliquant ce qu'ils nomment la méthode de la moyenne harmonique (éq. 3.40) des taux de coagulation dans les deux régimes extrêmes :

$$K = \frac{1}{\frac{1}{K_{CO}} + \frac{1}{K_{FM}}} = \frac{K_{CO} \times K_{FM}}{K_{CO} + K_{FM}} \quad (3.40)$$

Où K_{CO} et K_{FM} représentent l'expression de la variable K dans chacun des régimes.

En réalité, il ne s'agit pas à proprement parler d'une moyenne harmonique des coefficients de coagulation¹¹, mais plutôt d'une minimisation du coefficient K selon le régime d'écoulement. Cette minimisation est analogue à celle utilisée pour construire la loi de distribution présentée dans la section 2.1.5 (éq. 2.10).

Les auteurs ont appliqué cette méthode dans le cas d'une loi de distribution Log-Normale mono-modale. Nous étendons ici ce concept à une loi de distribution bi-modale. Pour chacune des interactions intra-modale et inter-modale, nous appliquons l'équation 3.40. Ainsi, nous obtenons un nouvel ensemble d'équations régissant les évolutions des moments d'ordre 0 et 3 pour chacun des modes indépendamment du régime d'écoulement.

Quelque soit l'ordre du moment étudié, le principe du raisonnement pour déterminer l'évolution de ce moment est toujours le même. Nous le présentons donc pour le moment d'ordre 0 du mode sphérique et donnons directement les équations d'évolution finales pour les deux ordres (0 et 3) et pour chacun des deux modes.

La première étape consiste à réorganiser les équations 3.32 et 3.36, en séparant les interactions intra-modale et inter-modale :

$$\begin{aligned} \left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{CO} &= \underbrace{\left((p_0^{CO} - 2) \gamma_0^{SS,CO} \times M_0^{S^2} \right)}_{\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{SS}^{CO}} + \underbrace{\left(-\gamma_0^{SF,CO} \times M_0^S M_0^F \right)}_{\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{SF}^{CO}} \\ \left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{FM} &= \underbrace{\left((p_0^{FM} - 2) \gamma_0^{SS,FM} \times M_0^{S^2} \right)}_{\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{SS}^{FM}} + \underbrace{\left(-\gamma_0^{SF,FM} \times M_0^S M_0^F \right)}_{\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{SF}^{FM}} \end{aligned}$$

La seconde étape consiste à appliquer la relation 3.40 pour chacun des régimes (CO , FM) à chacune des interactions (SS , SF) :

– *Interaction sphérique-sphérique :*

$$\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{SS} = \frac{\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{SS}^{CO} \times \left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{SS}^{FM}}{\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{SS}^{CO} + \left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{SS}^{FM}} = \frac{A_{SS}^{CO} \times A_{SS}^{FM}}{A_{SS}^{CO} + A_{SS}^{FM}} \times M_0^{S^2}$$

– *Interaction sphérique-fractale :*

$$\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{SF} = \frac{\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{SF}^{CO} \times \left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{SF}^{FM}}{\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{SF}^{CO} + \left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{SF}^{FM}} = -\frac{A_{SF}^{CO} \times A_{SF}^{FM}}{A_{SF}^{CO} + A_{SF}^{FM}} \times M_0^S M_0^F$$

11. Ici, le terme coefficient de coagulation est employé à « mauvais » escient, puisque les variables K_{CO} et K_{FM} font référence aux intégrales des coefficients et non pas aux coefficients eux même.

En notant par la suite que $\frac{dM_0^S}{dt} = \frac{dM_0^S}{dt}\Big|_{SS} + \frac{dM_0^S}{dt}\Big|_{SF}$ on déduit finalement l'équation d'évolution du moment M_0^S pour n'importe quel régime d'écoulement :

$$\frac{dM_0^S}{dt} = \frac{A_{SS}^{CO} \times A_{SS}^{FM}}{A_{SS}^{CO} + A_{SS}^{FM}} \times M_0^{S^2} - \frac{A_{SF}^{CO} \times A_{SF}^{FM}}{A_{SF}^{CO} + A_{SF}^{FM}} \times M_0^S M_0^F \quad (3.41)$$

En raisonnant sur le même principe pour chaque couple d'équations (3.33, 3.37); (3.34, 3.38) et (3.35, 3.39), on trouve :

$$\frac{dM_0^F}{dt} = \frac{B_{SS}^{CO} \times B_{SS}^{FM}}{B_{SS}^{CO} + B_{SS}^{FM}} \times M_0^{S^2} - \frac{B_{FF}^{CO} \times B_{FF}^{FM}}{B_{FF}^{CO} + B_{FF}^{FM}} \times M_0^{F^2} \quad (3.42)$$

$$\frac{dM_3^S}{dt} = \frac{C_{SS}^{CO} \times C_{SS}^{FM}}{C_{SS}^{CO} + C_{SS}^{FM}} \times M_3^{S^2} - \frac{C_{SF}^{CO} \times C_{SF}^{FM}}{C_{SF}^{CO} + C_{SF}^{FM}} \times M_3^S M_3^F \quad (3.43)$$

$$\frac{dM_3^F}{dt} = -\frac{C_{SS}^{CO} \times C_{SS}^{FM}}{C_{SS}^{CO} + C_{SS}^{FM}} \times M_3^{S^2} + \frac{C_{SF}^{CO} \times C_{SF}^{FM}}{C_{SF}^{CO} + C_{SF}^{FM}} \times M_3^S M_3^F \quad (3.44)$$

Où les coefficients correspondent à :

$$\begin{aligned} A_{SS}^{CO} &= (p_0^{CO} - 2) \gamma_0^{SS,CO} & ; & & A_{SS}^{FM} &= (p_0^{FM} - 2) \gamma_0^{SS,FM} \\ A_{SF}^{CO} &= \gamma_0^{SF,CO} & ; & & A_{SF}^{FM} &= \gamma_0^{SF,FM} \\ B_{SS}^{CO} &= (1 - p_0^{CO}) \gamma_0^{SS,CO} & ; & & B_{SS}^{FM} &= (1 - p_0^{FM}) \gamma_0^{SS,FM} \\ B_{FF}^{CO} &= \gamma_0^{FF,CO} & ; & & B_{FF}^{FM} &= \gamma_0^{FF,FM} \\ C_{SS}^{CO} &= (p_3^{CO} - 1) \gamma_3^{SS,CO} & ; & & C_{SS}^{FM} &= (p_3^{FM} - 1) \gamma_3^{SS,FM} \\ C_{SF}^{CO} &= \gamma_3^{SF,CO} & ; & & C_{SF}^{FM} &= \gamma_3^{SF,FM} \end{aligned}$$

On pourra remarquer que la somme des équations 3.43 et 3.44 est nulle ce qui traduit bien la conservation de la masse totale du système lors de la coagulation.

Il est possible d'estimer l'erreur introduite par la méthode de la moyenne harmonique (abrégée β_{HARM} . par la suite) par rapport à l'expression du kernel de coagulation donnée par Fuchs (1964) (β_{FUCHS} par la suite). Pour se faire, on peut se baser sur l'évolution du nombre total d'aérosols d'une distribution (ie : M_0) déduite à partir des deux méthodes. Cependant, la mise en place de tests autour de la méthode s'avère complexe dans notre cas sans préparer un modèle quasiment complet (et faute de temps, ce modèle n'a pas encore été entièrement développé). Néanmoins, certains aspects de la méthode peuvent être testés.

Premièrement il est possible de comparer l'évolution d'une distribution, indépendamment des types de particules pour β_{FUCHS} et β_{HARM} à partir d'une représentation en section. Ce test permet avant tout d'estimer l'erreur commise et de valider la méthode de la moyenne harmonique.

Pour réaliser un tel test, il suffit d'intégrer numériquement l'équation 3.8 pour $k = 0$ en utilisant respectivement, pour $\beta(r_i, r_j)$, les expressions du régime continu β_{CO} (éq. 2.16), du régime moléculaire β_{FM} (éq. 2.17) et β_{FUCHS} (éq. 2.16 \times éq. 2.18). La moyenne harmonique basée sur le même principe qu'énoncé plus haut, a

été appliquée directement sur les tendances (par unité de temps) dM_0/dt :

$$\left. \frac{dM_0}{dt} \right|_{HARM.} = \frac{\left. \frac{dM_0}{dt} \right|_{CO} \times \left. \frac{dM_0}{dt} \right|_{FM}}{\left. \frac{dM_0}{dt} \right|_{CO} + \left. \frac{dM_0}{dt} \right|_{FM}}$$

Les profils verticaux de température et pression ainsi que ceux de la loi de distribution sont respectivement obtenus à partir des données HASI et du TGCM-2D.

La figure 3.10 présente les résultats de ce test. La figure du haut est avant tout qualitative et permet de voir le comportement de dM_0/dt en fonction des différentes expressions du coefficient de coagulation β utilisé. La « moyenne harmonique » (en rouge) épouse l'allure du minimum entre les deux régimes (en tiret) comme nous l'avons évoqué plus haut. La figure du bas montre l'erreur relative entre les deux méthodes en fonction du niveau de pression :

$$\Delta = \left[\frac{\left. \frac{dM_0}{dt} \right|_{HARM.}}{\left. \frac{dM_0}{dt} \right|_{FUCHS}} - 1 \right] \times 100 \quad (3.45)$$

L'erreur est minimale pour chacun des cas extrêmes du régime d'écoulement que l'on peut associer aux bornes de la figure ($\Delta \lesssim 0.2\%$). Dans le régime transitoire, l'erreur atteint 22%. Cette valeur est du même ordre de grandeur que celle estimée par Park et al. (1999) pour la loi Log-normale. Compte tenu de la « simplicité » de l'approximation effectuée, cette erreur reste acceptable. De plus nous rappelons qu'il s'agit de la seule méthode permettant l'utilisation de la méthode des moments sur l'ensemble des régimes d'écoulement.

Le deuxième test présenté ci-après se rapproche plus du cadre de la méthode des moments. Il se base sur le même principe de comparaison, que l'on effectue cette fois-ci dans le cadre de l'auto-coagulation. On ne considère donc qu'un seul type de particule associé à une loi de distribution unique qui sera soit sphérique, soit fractal. On considère ainsi que la probabilité p_k décrite à la page 58 est égale à 1. En d'autres termes, cela revient à modifier la convention **C1** et imposer que la particule résultant d'une coagulation au sein d'un mode reste dans ce même mode. De fait, seul le premier terme de l'équation 3.41 et le second terme de l'équation 3.42 sont calculés lors de ce test. Nous les réécrivons ici afin d'éviter toute ambiguïté :

$$\frac{dM_0^S}{dt} = \frac{A_{SS}^{CO} \times A_{SS}^{FM}}{A_{SS}^{CO} + A_{SS}^{FM}} \times M_0^{S^2}$$

$$\frac{dM_0^F}{dt} = -\frac{B_{FF}^{CO} \times B_{FF}^{FM}}{B_{FF}^{CO} + B_{FF}^{FM}} \times M_0^{F^2}$$

Ce test permet à nouveau d'assurer la validité de la moyenne harmonique. Il tient compte aussi de la simplification apportée sur la correction de Cunningham-Millikan (p. 62) ainsi que de l'usage du coefficient b_k pour la coagulation en régime moléculaire (p. 63). A nouveau, les profils verticaux de température et de pression sont obtenus

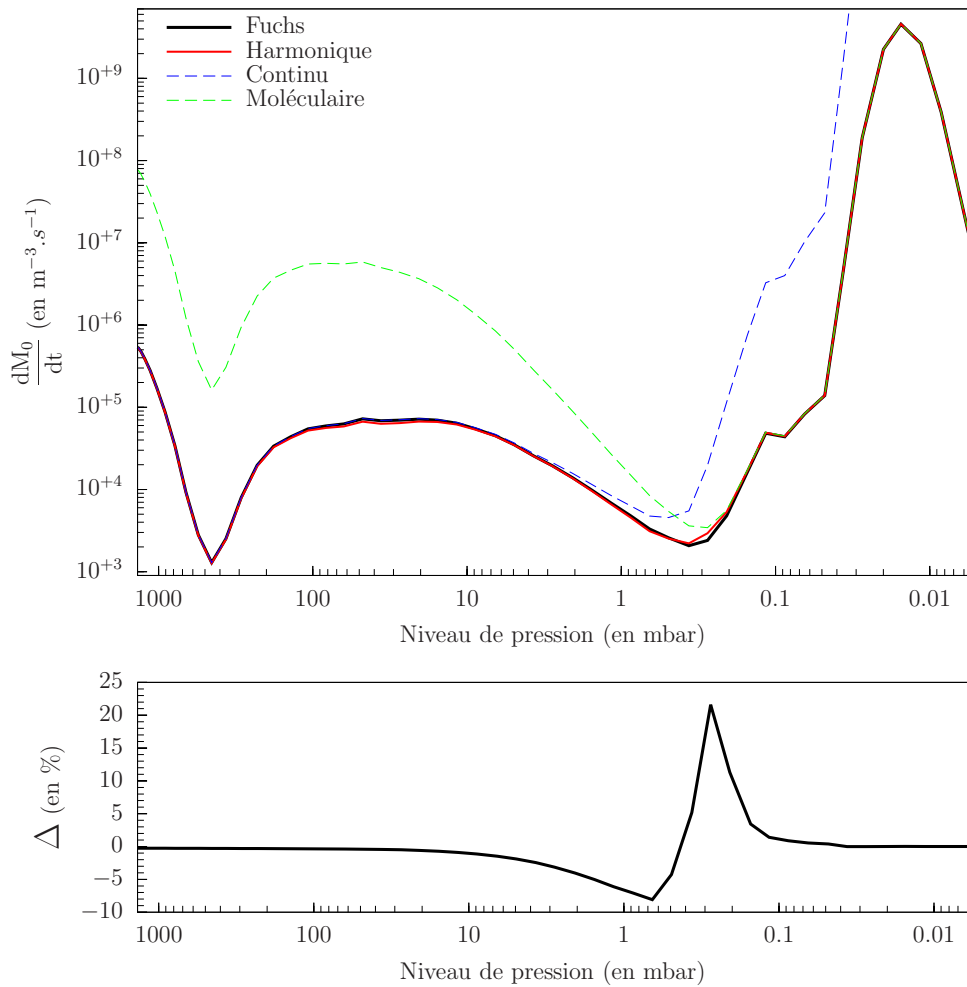


FIGURE 3.10 – *En haut* : Profil vertical de l'évolution du nombre total d'aérosols ($\frac{dM_0}{dt}$) lors de la coagulation pour les trois expressions β_{CO} , β_{FM} et β_{FUCHS} ainsi que pour $\beta_{HARM.}$. *En bas* : Erreur relative Δ (voir éq. 3.45) entre les deux méthodes en fonction du niveau de pression.

à partir des données HASI. En ce qui concerne la loi de distribution, nous utilisons le facteur de forme $\alpha(k)$ décrit dans la section 3.2.1 (voir éq. 3.4 et la table 3.1 associée). La même loi de distribution est utilisée dans chacun des cas traité et seul le rayon caractéristique est modifié. Les valeurs des rayons caractéristiques sont données dans la figure 3.11.

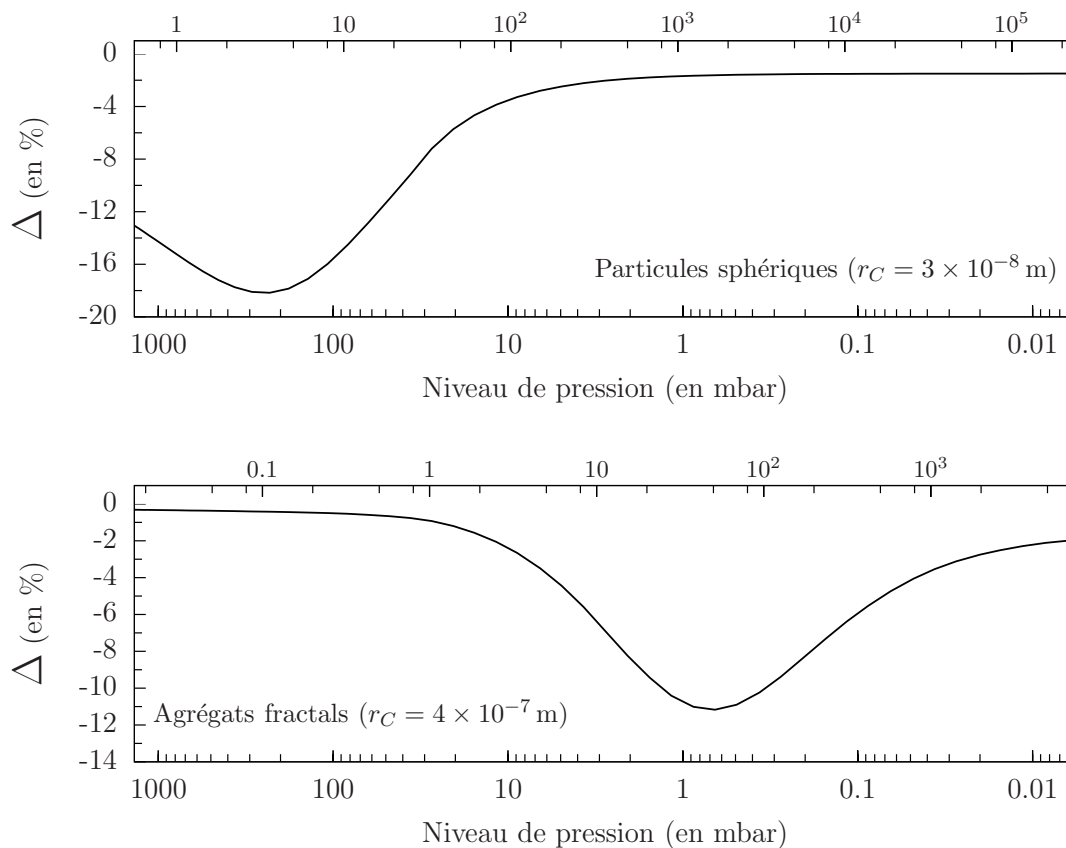


FIGURE 3.11 – Erreur relative Δ (voir éq. 3.45) pour l’auto-coagulation sphérique (en haut) et fractale (en bas). Pour chaque figure, l’axe du haut représente le nombre de Knudsen associé au rayon caractéristique r_C , de la loi de distribution.

L’évolution de l’erreur suit un comportement similaire au premier test et représente toujours la « signature » de la moyenne harmonique. L’erreur maximum est du même ordre de grandeur que dans le cas du premier test et correspond à -18% pour le cas sphérique et -11% pour le cas fractal. Le déplacement du maximum de l’erreur est principalement dû aux différences de taille des aérosols mis en jeu dans chaque cas. Le nombre de Knudsen (associé au rayon caractéristique de la loi) affiché sur l’axe du haut de chaque graphe traduit assez bien cet aspect. En modifiant la valeur des rayons caractéristiques, on déplace ainsi le maximum d’erreur¹² : La diminution de r_C déplace l’erreur vers les hautes pressions (ou encore les basses altitudes). On notera que le maximum d’erreur dans le cas des particules sphériques est en réalité (sur Titan) complètement abstrait puisqu’il apparaît dans la troposphère où les aérosols sphériques ont quasiment disparu.

12. Cette remarque est valable quelques soit l’interaction (*SS* ou *FF*) traitée.

3.3.1.8 Cas de l'effet de la charge électrique

L'ensemble des cas que nous avons traités jusqu'ici ne tient pas compte de la possible charge électrique de la population de particules. Dans l'atmosphère terrestre, cette dernière n'influe par sur la coagulation (les aérosols sont globalement neutres). Mais ce n'est pas le cas de Titan où les aérosols sont électriquement chargés (Borucki et al., 1987). Sans entrer dans les détails (voir Pruppacher and Klett, 1978, p580-584), il est possible de déterminer la correction qu'apporte la charge électrique (facteur multiplicatif) au coefficient de coagulation. Cette correction électrique, $\mathcal{Q}(r_i, r_j)$ est une fonction du rayon et de la charge électrique des deux particules mises en jeu ainsi que de la température et s'écrit :

$$\mathcal{Q}(r_i, r_j) = \frac{y}{\exp(y) - 1} \quad ; \quad y = \frac{(n_{e^-} q_{e^-})^2 r_i r_j}{4 \pi \varepsilon_0 (r_i + r_j) kT} \quad (3.46)$$

La loi de charge des particules est donnée par l'expression $n_{e^-} \times (r q_{e^-} / \sqrt{4\pi\varepsilon_0})$; avec q_{e^-} est la charge d'un électron, ε_0 la permittivité du vide et n_{e^-} représente le nombre de charge par mètre de l'aérosol.

L'expression 3.46 correspond à l'aspect répulsif des interactions électriques des particules ce qui est « représentatif » des aérosols présents dans l'atmosphère de Titan. Cette expression ne peut malheureusement pas être incluse directement dans la mise en moment des lois de coagulation car le terme en exponentiel empêche tout développement en puissance de r .

La figure 3.12 montre la forme de la correction électrique en fonction des rayons des particules à $T = 160K$. Cette dernière vaut 1 pour des interactions entre petites particules et tend vers 0 pour les agrégats fractals les plus « larges » ($r_v \gtrsim 1 \mu m$). Elle joue donc un rôle fondamental dans l'efficacité de coagulation et doit absolument être prise en compte dans notre méthode.

Jusqu'à présent, nous avons toujours traité les aérosols en les cataloguant par type et en séparant leurs différentes interactions. En reprenant ce principe, on peut dégrouper l'effet de la charge électrique en quatre zones distinctes correspondant aux différentes interactions entre les particules. Ce découpage (voir figure 3.12) nous permet déjà d'avoir une estimation au premier ordre de l'effet de la charge électrique pour les interactions SS (~ 1) et SF (~ 0.8). Par contre, son effet sur l'interaction entre particules fractales n'est pas aussi évident.

Une façon d'inclure cette correction dans la représentation en moments est de déterminer la correction électrique moyenne $\overline{\mathcal{Q}}$ pour chacune des interactions SS , SF et FF que l'on définit de manière générale :

$$\overline{\mathcal{Q}}_{XY} = \frac{\int_0^\infty \int_0^\infty \mathcal{Q}(r_i, r_j) \beta_{XY}(r_i, r_j) n_X(r_i) n_Y(r_j) dr_i dr_j}{\int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{XY}(r_i, r_j) n_X(r_i) n_Y(r_j) dr_i dr_j} \quad (3.47)$$

Dans l'équation 3.47, les indices X et Y font références aux modes présents pour une interaction donnée (SS , SF ou FF).

La pondération de \mathcal{Q} par le coefficient de coagulation β implique que $\overline{\mathcal{Q}}$ est théoriquement une fonction de la pression P , de la température T et du rayon caractéristique r_C des lois de distributions (r_{C_S} et/ou r_{C_F} en fonction de l'interaction

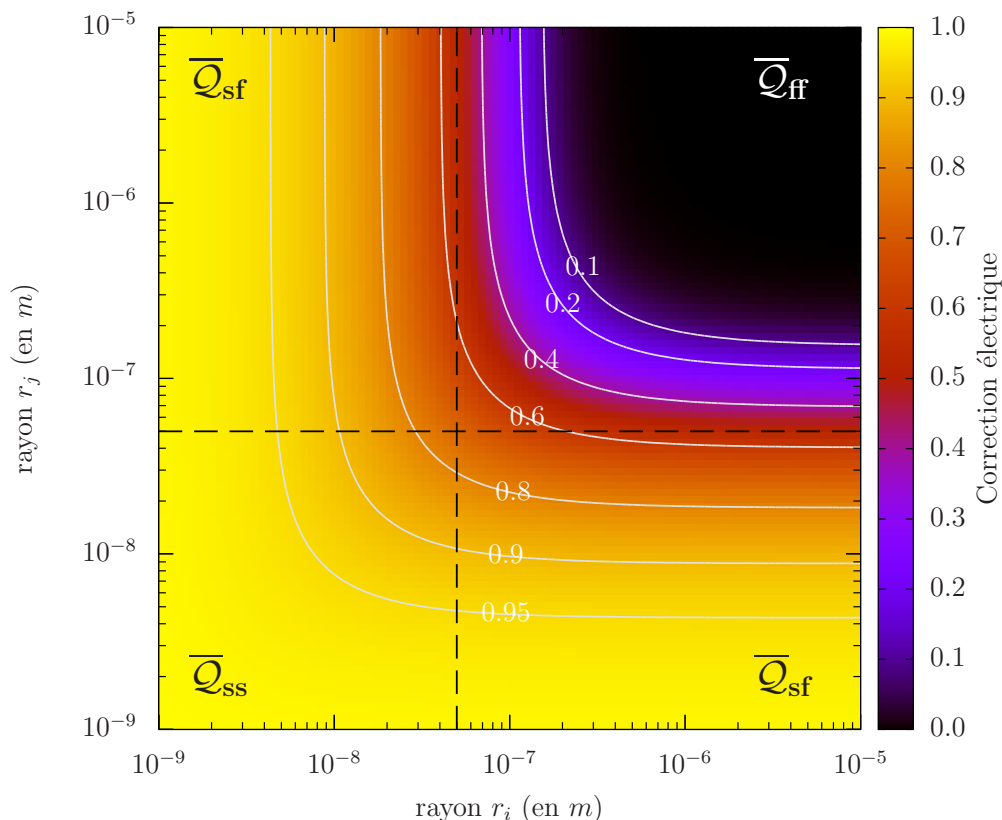


FIGURE 3.12 – Correction électrique $\mathcal{Q}(r_i, r_j)$ à $T = 160K$ et $n_{e^-} = 15 e^- \cdot \mu m^{-1}$, pour une gamme de rayon $r \in [10^{-9} m ; 10^{-5} m]$ correspondant à la granulométrie du TGCM-2D. Les deux droites en tiret correspondent au rayon du monomère. Le découpage en bloc $[\overline{\mathcal{Q}}_{ss} ; \overline{\mathcal{Q}}_{sf} ; \overline{\mathcal{Q}}_{ff}]$ représentent idéalement les différents modes de la coagulation présentés en page 55.

traitée). Néanmoins, de manière générale et quelque soit l'interaction étudiée, les variations de $\overline{\mathcal{Q}}$ en fonction de P sont négligeables devant celles des autres variables (voir figures 3.13 et 3.14). Notons enfin que $\overline{\mathcal{Q}}$ est aussi fonction d'un dernier paramètre : n_{e^-} , le nombre de charge des aérosols. Ce paramètre est fixé dans le cas de notre étude à $n_{e^-} = -15 e^- \cdot \mu m^{-1}$ et nous considérons que cette valeur est nominale pour les aérosols sur Titan. Tous les tests présentés ici, ne sont valables que pour cette valeur de n_{e^-} . Si cette valeur venait à changer, tous les calculs devraient donc être fait à nouveau.

Dans le cas des interactions SS, \mathcal{Q} étant déjà très proche de 1, $\overline{\mathcal{Q}}_{SS}$ ne dépend en réalité que faiblement de ces variables. Après avoir effectué la moyenne de $\overline{\mathcal{Q}}_{SS}$ sur une gamme de valeurs réalistes pour chaque variable r_{CS} , P et T , nous avons trouvé une valeur de $\overline{\mathcal{Q}}_{SS} = 0.98$. En première approche, nous fixons donc cette valeur unique à la correction moyenne pour les interactions SS.

Les interactions SF représentent un cas très similaire. Le rayon caractéristique r_{CS} ne devrait jamais excéder 2 à $3 \times 10^{-8} m$, sans que le nombre total d'aérosols sphériques ne devienne complètement négligeable par rapport à la population totale. En calculant à nouveau $\overline{\mathcal{Q}}_{SF}$ pour différentes valeurs de P , T , r_{CS} et r_{CF} , on s'aperçoit que $\overline{\mathcal{Q}}_{SF}$ excède toujours 0.9 et ce choix de valeur par défaut peut

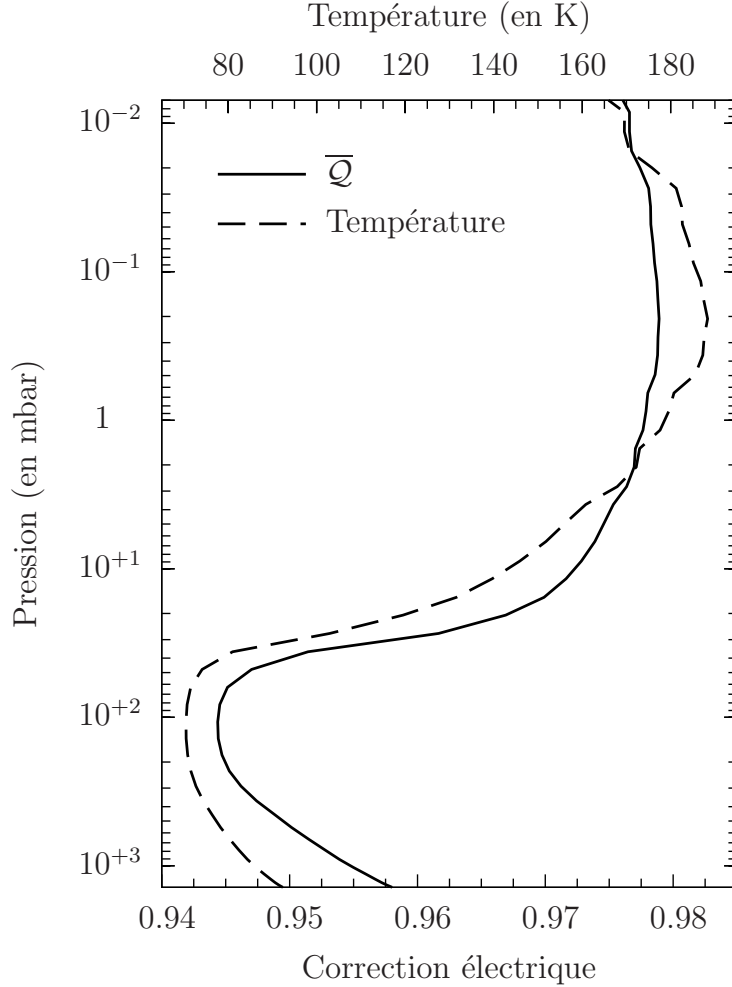


FIGURE 3.13 – Variations de la correction électrique moyenne \overline{Q}_{SS} en fonction du niveau de pression pour $r_{C_S} = 8 \times 10^{-9} m$. Le profil vertical de température utilisé est tracé sur la figure à des fins comparatives. La forte similitude entre les deux profils montre bien la forte dépendance de \overline{Q}_{SS} en température pour une valeur donnée de r_{C_S} .

raisonnablement être adopté.

Pour les interactions FF, les calculs montrent que les dépendances en T et r_{C_F} peuvent être l'une et l'autre très importantes (voir figure 3.14). Le choix d'une valeur moyenne n'a alors que peu de sens. L'ajustement par une fonction analytique s'avère complexe dû au nombre de variables liées à cette correction. De fait, nous choisissons l'usage d'une table pré-calculée à partir de laquelle la valeur de \overline{Q}_{FF} est interpolée en fonction de la température et du rayon caractéristique.

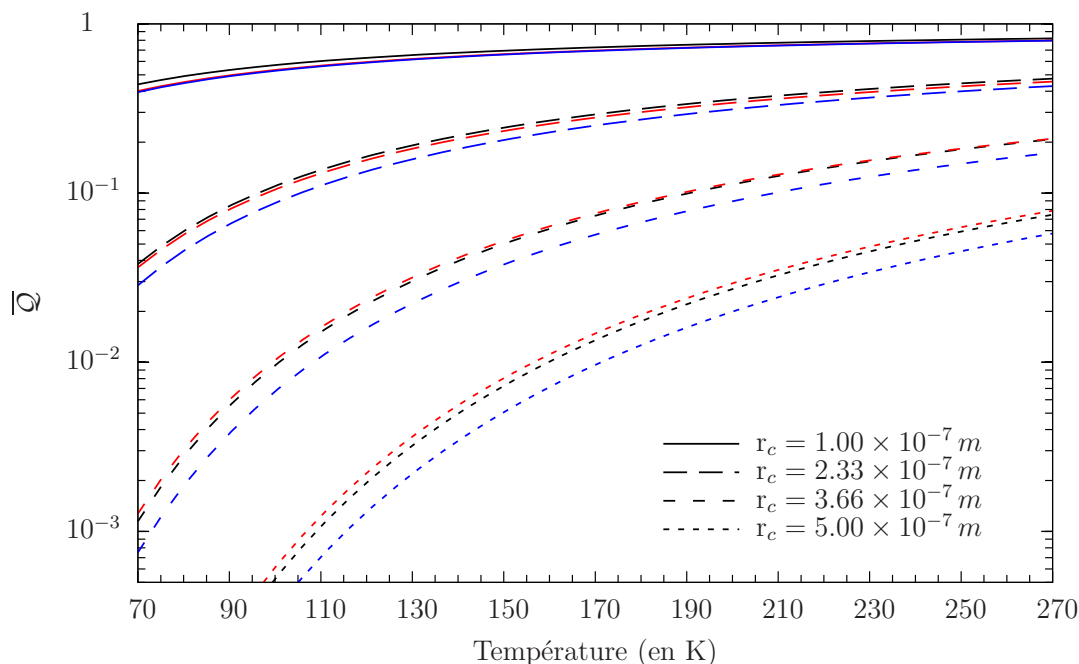


FIGURE 3.14 – Variations de la correction électrique moyenne \overline{Q}_{FF} pour les interactions FF en fonction de la température pour différentes valeurs de r_{CF} . Le jeu de couleur décrit les niveaux de pressions, 10^3 mbar (en noir), 3 mbar (en rouge) et 10^{-2} mbar (en bleu) pour lesquels sont présentées les variations.

3.3.2 Sédimentation des aérosols

Le passage de l'évolution de la loi de distribution sous l'effet de la sédimentation à celle de ces moments est un problème complexe à traiter. Comme dans le cas de la coagulation, la transition de régime et la nature fractale d'une partie de la population d'aérosols en sont la cause.

Comme il a déjà été précisé dans la section 2.1.1, la dimension fractale des aérosols joue un rôle important dans la mise en équation de leur vitesse de sédimentation. De fait, un aérosol fractal n'aura absolument pas le même comportement que son homologue sphérique. Il est donc nécessaire de traiter les deux types de particules séparément. Cette partie du problème est déjà levée puisqu'il nous a été nécessaire de distinguer deux modes de particules pour traiter les lois de la coagulation. Nous en ferons donc de même en ce qui concerne la sédimentation et traiterons deux cas indépendants, à savoir l'évolution des moments M_k^S et M_k^F associés à chacun des modes de la loi de distribution.

L'autre partie du problème concerne la transition de régime. Comme nous l'avons déjà précisé, la correction de Cunningham-Millikan (abrégée *FCM*) ne se développe pas en puissance de r . La simplification au premier ordre (*AKn* par la suite) de la correction telle que nous l'avons utilisée pour les lois de la coagulation (voir page 61) peut aussi être mise en place ici. La correction slip-flow s'applique directement à la formule de la vitesse de Stokes. On s'attend donc à obtenir une erreur du même ordre de grandeur ($\sim 10\%$) que celle présentée dans la figure 3.8.

Le principal avantage de cette représentation de la correction est qu'elle simplifie grandement le calcul du flux de sédimentation. La vitesse de sédimentation s'écrit

en tenant compte de la dimension fractale, de la manière suivante :

$$\begin{aligned}\omega(r, z) &= \frac{2\rho g}{9\eta} r^{\frac{3D_f-3}{D_f}} r_m^{\frac{3-D_f}{D_f}} \times (1 + A \times Kn) \\ \omega(r, z) &= \frac{2\rho g}{9\eta E} \times \left(r^{\frac{3D_f-3}{D_f}} + \frac{A \lambda_g}{E} r^{\frac{3D_f-6}{D_f}} \right)\end{aligned}\quad (3.48)$$

Où $E = r_m^{\frac{D_f-3}{D_f}}$ est un pré-facteur ne dépendant que de la dimension fractale de l'agrégat, D_f et du rayon de monomère r_m , A est le facteur de la correction slip-flow au premier ordre (voir page 62) et λ_g est le libre parcours moyen du gaz.

Cette approximation permet de développer directement le flux de sédimentation en puissance de r en substituant $\omega(r, z)$ par la relation 3.48.

$$\begin{aligned}\Phi(\Delta r, z) &= \int_r^{r+dr} n(r', z) \omega(r', z) dr' \\ \Phi(\Delta r, z) &\approx \int_r^{r+dr} \frac{2\rho g}{9\eta E} n(r, z) \times \left(r^{\frac{3D_f-3}{D_f}} + \frac{A \lambda_g}{E} r^{\frac{3D_f-6}{D_f}} \right) dr\end{aligned}\quad (3.49)$$

On peut étendre l'équation 3.49 au concept de flux du moment d'ordre k en appliquant la relation 3.1 :

$$\begin{aligned}\Phi_{M_k}(z) &= \int_0^\infty r^k n(r, z) \omega(r, z) dr \\ \Phi_{M_k}(z) &= \frac{C_{Stokes}}{E} \left(M_{\frac{D_f(k+3)-3}{D_f}} + \frac{A \lambda_g}{E} M_{\frac{D_f(k+3)-6}{D_f}} \right)\end{aligned}\quad (3.50)$$

$$\text{Où } C_{Stoke} = \frac{2\rho g}{9\eta}$$

En appliquant la valeur $D_f = 3$, on obtient l'équation du flux pour le mode sphérique. On obtient alors les deux expressions du flux de moment d'ordre k pour chacun des modes :

$$\Phi_{M_k^S}(z) = C_{Stokes} (M_{k+2} + A \lambda_g M_k) \quad (3.51)$$

$$\Phi_{M_k^F}(z) = \frac{C_{Stokes}}{E} \left(M_{\frac{D_f(k+3)-3}{3}} + \frac{A \lambda_g}{E} M_{\frac{D_f(k+3)-6}{3}} \right) \quad (3.52)$$

Nous avons déjà discuté de la valeur de facteur A dans la section précédente. Dans le cas présent, l'erreur Δ (voir éq. 3.53) commise sur le flux de sédimentation est directement liée à ce coefficient qui contraint sa valeur maximum. La figure 3.15 présente les variations cette erreur pour le moment M_0^F en fonction du niveau de pression pour deux valeurs de A (1.591, figure du haut, et 1.657, figure du bas) et différents rayons caractéristiques.

$$\Delta = \left[\frac{\Phi_{sed}(AKn)}{\Phi_{sed}(FCM)} - 1 \right] \times 100 \quad (3.53)$$

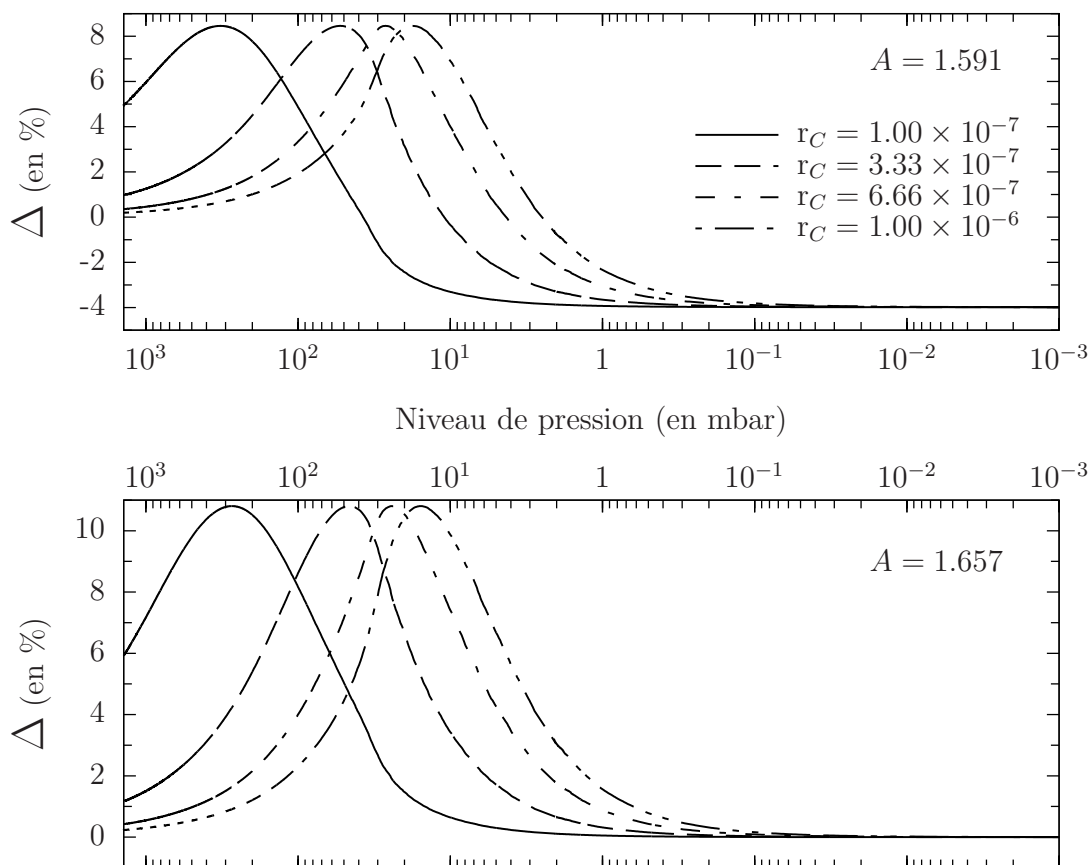


FIGURE 3.15 – Variation de l’erreur relative Δ (éq. 3.53) du flux de sédimentation du moment M_0^F calculé avec la correction Slip-Flow au premier ordre $(1 + A \times Kn)$. Les rayons caractéristiques utilisés dans chaque figure sont identiques (voir la légende).

Nous avons déjà utilisé, $A = 1.591$ (Park et al., 1999) dans le cas de la coagulation et l’erreur obtenue avec ce coefficient est quasiment identique avec $\Delta_{max} = +9/-4\%$.

La valeur $A = 1.657$, correspond quant à elle, à la limite de la correction Cunningham-Millikan lorsque Kn vers l’infini. Cette valeur permet en théorie d’obtenir la valeur exacte de la vitesse corrigée pour les deux cas extrêmes du régime d’écoulement. Ce point est vérifié dans la figure 3.15 (en bas) pour laquelle Δ tend vers 0 dans les plus hautes couches. En contre-partie, dans le régime transitoire, l’erreur est plus élevée et atteint $\Delta_{max} \sim 11\%$.

On pourra aussi remarquer que l’erreur se « déplace » en altitude selon r_c : Une diminution de ce rayon entraîne un décalage de Δ_{max} vers les basses couches de l’atmosphère. L’erreur est indépendante du type de particules¹³ considéré et n’est en fait liée qu’au nombre de Knudsen.

13. Pour être plus précis, l’erreur ne dépend pas de la dimension fractale. Elle dépend indirectement du type de particule qui conditionne la valeur de r_C .

3.3.3 Zone de production

Le dernier point à traiter concernant la microphysique de la brume afin de compléter l'étude est la réécriture en moment de la fonction de production d'aérosols. Cette dernière est de loin la plus aisée à transcrire en terme de moment. On peut tout simplement l'écrire de la manière suivante :

$$Q_{M_k}(z) = \overline{Q_k} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{z - z_0}{\Delta z} \right)^2 \right] \quad (3.54)$$

L'équation 3.54 est exactement la même que celle présentée en page 28 au détail près que le taux de production $\overline{Q_k}$ est calculé directement en terme de moment d'ordre k du mode sphérique.

3.4 Résolution des équations de la microphysique des nuages en moments

3.4.1 Nucléation

Intéressons nous maintenant au phénomène de nucléation. Nous avons présenté dans la section 2.4.2, le taux de nucléation permettant d'obtenir le nombre de particules franchissant le seuil du rayon critique, formant ainsi des noyaux de condensation. L'équation d'évolution de la loi de distribution des noyaux liée à ce phénomène s'écrit pour une particule de taille r :

$$\frac{dn_{noy}(r)}{dt} = J_{het} S_{surf} n_{aer}(r) \quad (3.55)$$

Avec $J_{het} = \frac{A}{f(m, x)} \exp \left(-\frac{4\pi r^* 2\sigma}{3kT} f(m, x) \right)$ (voir section 2.4.2).

Dans la formule 3.55, n_{aer} et n_{noy} sont respectivement les lois de distribution des aérosols et des noyaux de nucléation. S_{surf} correspond à la surface offerte pour la nucléation.

La dépendance en rayon du taux de nucléation J_{het} n'intervient que dans l'expression du facteur de forme $f(m, x)$. Dans le TGCM, la nucléation n'est effective que dans la troposphère, où seules les particules fractales subsistent. Il n'est donc pas incohérent, en première approximation de considérer que le rayon de courbure est celui du monomère ($x = r_m/r^*$) et donc de s'affranchir de la dépendance en rayon du facteur de forme. Sans cette simplification, le facteur de forme dont l'expression est extrêmement complexe, empêcherait l'écriture en moment de ce processus.

Dès lors que cette simplification est envisagée, la transformation de l'équation 3.55 est quasiment directe. La surface offerte à la nucléation, S_{surf} , correspond alors à la surface totale couverte par les monomères de l'agrégat :

$$S_{surf} = 4\pi N_m r_m^2 = 4\pi \frac{r^3}{r_m}$$

En substituant S_{surf} par cette expression dans la relation 3.55, on obtient finalement l'équation 3.56 à la suite des transformations suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n_{noy}(r) &= 4\pi J_{het} \frac{r^3}{r_m} n_{aer}(r) \\ \frac{d}{dt} \left(\int_0^\infty r^k n_{noy}(r) dr \right) &= \int_0^\infty 4\pi J_{het} r^{k+3} r_m^{-1} n_{aer}(r) dr \\ \frac{d}{dt} M_k^{noy} &= 4\pi J_{het} r_m^{-1} \times M_{k+3}^{aer} \end{aligned} \quad (3.56)$$

Où r_m est le rayon du monomère. On notera qu'en choisissant le monomère comme rayon de courbure, l'évolution du moment d'ordre k ne dépend pas de la dimension fractale des aérosols.

La nucléation impliquant uniquement un échange entre noyaux et aérosols, l'évolution du moment d'ordre k des aérosols est l'opposé de celle pour les noyaux. On obtient alors l'ensemble d'équations suivant pour l'évolution des moments d'ordre 0 et 3 des noyaux de nucléation :

$$\begin{aligned} \frac{dM_0^{noy}}{dt} &= 4\pi \frac{J_{het}}{r_m} M_3^{aer} \\ \frac{dM_3^{noy}}{dt} &= 4\pi \frac{J_{het}}{r_m} M_6^{aer} \end{aligned}$$

L'application de la relation inter-moment $\alpha(k)$ (voir section 3.2.1) permet finalement d'obtenir l'évolution de chaque moment en fonction de ce même moment :

$$\frac{dM_0^{noy}}{dt} = -\frac{dM_0^{aer}}{dt} = 4\pi \frac{J_{het}}{r_m} \alpha_{aer}(3) M_0^{aer} \quad (3.57)$$

$$\frac{dM_3^{noy}}{dt} = -\frac{dM_3^{aer}}{dt} = 4\pi \frac{J_{het}}{r_m} \frac{\alpha_{aer}(6)}{\alpha_{aer}(3)} r_{C_{aer}}^3 M_3^{aer} \quad (3.58)$$

Pour ce processus, nous n'avons pas traité les moments du mode sphérique. Néanmoins, comme nous l'avons signalé, dans la troposphère de Titan seul le mode fractal subsiste. On considère donc ici que tous les moments associés aux aérosols sont ceux du mode fractal (il en va donc de même pour la fonction α utilisée).

Si le mode sphérique était présent lui aussi dans la troposphère, le passage en moments des équations serait nettement plus délicat car il faudrait tenir compte de ce type de particule pour la nucléation. Le concept de la séparation complète des modes telle que présentée dans la section dédiée à la coagulation pourrait éventuellement s'appliquer dans ce cas. Le calcul du facteur de forme $f(m, x)$ serait par contre à nouveau un problème.

3.4.2 Condensation

La condensation contrôle uniquement l'évolution en taille des gouttes. On comprend donc qu'elle affecte le volume de condensat composant la goutte et que le

nombre de noyaux, lui reste constant. Dans le modèle actuel, chacune des espèces condensables est considérée comme indépendante des autres vis à vis de la condensation et il n'existe aucun mélange entre espèces (voir figure 3.16). De plus, les gouttes sont traitées comme des particules sphériques liquides. Sur Titan, les gouttes devraient plutôt être de composition multiple dans la troposphère où le méthane peut condenser sur les gouttes d'éthane formées dès la tropopause (Barth and Toon, 2006). Si la structure exacte des gouttes n'est pas clairement définie, Tokano et al. (2006) suggère la présence de gouttes liquides d'un mélange $CH_4 - N_2$ jusqu'à ≈ 15 km puis des gouttes « solides » de glace de méthane.

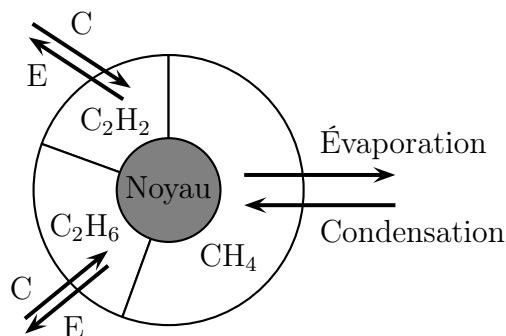


FIGURE 3.16 – Schéma de la gestion de la microphysique des nuages dans le modèle. Chaque espèce agit indépendamment des autres. La restitution du noyau aux aérosols ne se fait que lorsqu'il ne reste plus aucun condensat.

Nous garderons néanmoins les hypothèses du modèle actuel pour calculer l'évolution du volume de condensat associé au processus de condensation pour deux raisons essentiellement. D'une part les connaissances actuelles sur la composition et la structure des gouttes restent peu documentées et localisées. D'autre part ce modèle, bien qu'incomplet se révèle toutefois représentatif de la distribution spatiale des nuages (Rannou et al., 2006). De plus pour l'ensemble des calculs, nous considérerons une taille de goutte unique correspondant au rapport de la somme des volumes des constituants de la goutte sur le nombre de noyaux (voir équation 3.59). Cette hypothèse permet de simplifier grandement le calcul de la condensation et se justifie par le fait que la distribution des gouttes est étroite dans le modèle (voir section 2.1.4, page 22).

Avec cette simplification, on définit le volume total des gouttes (M_3^{goutte}) comme le produit du volume de la goutte unique (\bar{v}_g) par le nombre total de gouttes (M_0^{noy}).

$$M_3^{goutte} = \frac{4}{3}\pi M_3^{noy} + \sum_i M_{3_i}^\chi = M_0^{noy} \times \bar{v}_g$$

Où $\frac{4}{3}\pi M_3^{noy}$ représente le volume total des noyaux et $M_{3_i}^\chi$ est le volume total du condensat de l'espèce χ . En reprenant nos hypothèses, nous savons que :

- Le nombre et la masse totale de noyaux ne varient pas au cours du processus $\left(\frac{dM_3^{noy}}{dt} = \frac{dM_0^{noy}}{dt} = 0\right)$.

- Le calcul se fait indépendamment pour chaque condensat : on peut travailler sur un condensat i en considérant tous les autres condensats $j \neq i$ constants ($\frac{dM_{3j}^X}{dt} = 0$).

Pour un condensat donné, la variation de masse de la goutte correspond donc uniquement à la variation de la masse de condensat dans cette dernière et on peut écrire :

$$\frac{dm_\chi}{dt} = \rho_\chi 4\pi r_g^2 \frac{dr_g}{dt} \quad (3.59)$$

$$r_g = \left[\frac{1}{C_\pi} \frac{C_\pi M_3^{noy} + \sum_i M_{3i}^X}{M_0^{noy}} \right]^{1/3} ; \quad C_\pi = \frac{4}{3}\pi$$

Où m_χ représente la masse du condensat, ρ_χ sa masse volumique et r_g le rayon de la goutte.

Le taux d'accroissement de la goutte, $r_g \times dr_g/dt$ se déduit de la relation 2.27 en calculant la saturation à l'équilibre, S^* pour le rayon moyen de la goutte, r_g .

$$r_g \frac{dr_g}{dt} = \frac{S - S^*}{R_c + R_d} \quad \text{avec} \quad S^* = \exp\left(\frac{2\sigma M_\chi}{\rho_\chi RT r_g}\right)$$

L'évolution du volume total de condensat associé aux gouttes correspond par la suite au produit de l'évolution du volume de notre goutte effective par le nombre total de noyaux disponibles. On en déduit la relation suivante :

$$\frac{dM_3^X}{dt} = 4\pi r_g \times \frac{S - S^*}{R_c + R_d} M_0^{noy} \quad (3.60)$$

3.4.3 Sédimentation des gouttes

Compte tenu de l'approximation faite sur la taille des gouttes, L'écriture en moment du processus de sédimentation des gouttes se fait instantanément (et instinctivement d'ailleurs). L'évolution de la concentration d'une particule de taille r s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{dN(r, z)}{dt} = -\frac{d\Phi(r, z)}{dz} = -N(r, z) \frac{d\omega(r, z)}{dz} - \omega(r, z) \frac{dN(r, z)}{dz} \quad (3.61)$$

Où $N(r, z)$ représente la concentration de particules de rayon r à l'altitude z et $\omega(r, z)$ la vitesse de sédimentation de cette particule à l'altitude z .

Si l'on considère une taille de goutte unique, la concentration en particule devient égale au nombre de total de noyaux $M_0^{noy}(z)$ par unité de volume. La vitesse de sédimentation quant à elle, devient celle de la goutte de rayon r_g . On en déduit simplement la relation suivante :

$$\frac{dM_0^{noy}(z)}{dt} = -\frac{d}{dz} (\Phi_{M_0^{noy}}) = -\frac{d}{dz} (M_0^{noy}(z) \omega(r_g, z)) \quad (3.62)$$

Les composants de la goutte sous l'effet de la sédimentation, suivent tous la même loi. La forme de l'équation 3.62 s'étend donc aux moments associés à chaque composant de la goutte. Il suffira donc de remplacer M_0^{noy} par le moment traité (par exemple : M_3^X pour le condensat) dans l'équation 3.62 pour en connaître l'équation d'évolution.

3.5 Résumé

Nous avons présenté de ce chapitre, le contexte et l'intérêt du développement d'une représentation en moments des processus microphysiques. L'ensemble de ces développements n'auraient pas eu de sens sans une étude approfondie de la granulométrie des aérosols de Titan comme cela a été présenté dans le chapitre 2.

L'accent a été principalement mis dans ce chapitre sur les lois de coagulation qui représentent, ici le principal défi. Le cas particulier de Titan implique la présence d'aérosols fractals, un effet de la charge électrique, ou encore une transition de régime d'écoulement. Ces particularités nous ont obligé à repenser la mise en moments des équations de la coagulation (et des lois microphysiques en général) par rapport aux études présentées sur le sujet dans la littérature.

Certains des développements autour de ces points n'ont pas pu être validés faute de temps. D'autres encore restent sujet à caution et sont en réalité plus des pistes de développement que des théories bien ancrées. C'est notamment le cas de la probabilité de transfert présentée en page 58. Si l'idée de cette probabilité reste cohérente, son application reste encore à vérifier. Dans le même cadre, l'application du coefficient b_k dans le cas de la coagulation en régime moléculaire (p. 63) n'est pas totalement terminé et des efforts doivent encore être fournis de ce côté. Cet aspect reste technique et se résume surtout à la manière de modéliser le coefficient b_k pour la coagulation inter-modale.

La comparaison entre les expressions exactes (Fuchs, 1964) avec leur équivalent en moments des processus présentés ici ont permis d'exprimer les écarts possibles entre les deux méthodes et de valider les processus de coagulation et de sédimentation des aérosols en moments. L'application de l'effet moyen de la charge électrique est une solution viable de prime abord qui permet de tenir compte de cet aspect primordial pour la coagulation sur Titan. Dans l'ensemble, si la modélisation complète de ces processus n'a pas pu être achevée faute de temps, la majeure partie des difficultés ont été aplanies. Il n'y a plus d'obstacle théoriques au développement d'une telle méthode dans le cadre de Titan.

Concrètement l'application de la méthode en moment dans le cadre du GCM nécessiterait finalement 7 traceurs moments représentant pour les 4 premiers, le nombre total (M_0) et le volume total (M_3) des aérosol et des noyaux. Ces deux ordres de moments sont choisis essentiellement car ils représentent des quantités physiques mais surtout car ils permettent de simplifier les équations de la coagulation. Les trois derniers moments représentent quant à eux, le volume total (M_3) associés à chaque condensat (CH_4 , C_2H_6 et C_2H_2) interagissant avec les aérosols dans la microphysique des nuages. En comparaison des 50 traceurs (5 types \times 10 cases) actuellement utilisés, cette réduction à 7 variables implique forcément un gain de temps.

La représentation en moments de la microphysique des nuages est par contre beaucoup plus accessible au prix des approximations présentées dans ce chapitre. Son application dans le cadre du GCM est quasiment immédiate, essentiellement car les dites approximations sont déjà employées dans ce modèle. Les tests présentés dans le chapitre suivant montreront que globalement les deux représentations exposées en début de chapitre donnent des résultats très similaires dans le cas de la microphysique des nuages.

Modélisation et test de la méthode des moments

Sommaire

4.1 Représentation « mixte » : conversion des représentations en sections et en moments	86
4.2 Description du modèle et protocole des tests	89
4.3 Simulations et résultats des tests	90
4.3.1 Cycle annuel	91
4.3.2 Cycle diurne	99
4.3.3 Test de la loi Log-Normale	102
4.4 Résumé	105

Ce chapitre présente les travaux effectués sur la modélisation de la représentation en moment des lois microphysiques. Comme nous l'avons plusieurs fois exposé dans les sections précédentes, la microphysique de la brume dans le contexte de Titan s'avère complexe à traiter en moments. Elle passe par la caractérisation de multiples fonctions et coefficients n'ayant pas de forme analytique et qui doivent donc être définis numériquement. Certains aspects de la théorie nécessitent un travail plus approfondi comme le calcul des coefficients b_k dans le cas de la coagulation intermodale (p. 64), l'effet de la charge électrique (p. 73) où encore l'approximation de la vitesse de sédimentation (p. 76). Le changement de représentation des traceurs affecte en profondeur les équations d'évolution pour la coagulation et il devient impossible de baser leur modélisation sur le schéma numérique (représentation en sections) déjà existant dans le TGCM. Finalement, un nouveau modèle doit être entièrement conçu pour traiter les aérosols.

Les lois de la microphysique des nuages, telles que nous les avons décrites diffèrent par contre très peu. Ceci est principalement dû au fait que nous ne traitons qu'une taille unique de goutte. Les schémas numériques employés dans le modèle de nuages du TGCM-2D peuvent être repris dans leur quasi-totalité comme base de travail ce qui accélère grandement le développement du modèle.

L'ensemble des ces outils mathématiques et numériques relatifs à la méthode des moments pour la microphysique de la brume n'ont pas été totalement développés

essentiellement par manque de temps. Il ne m'a pas été possible de terminer le développement du modèle de microphysique de la brume dans le but de l'intégrer au TGCM-3D durant le temps imparti de la thèse.

Néanmoins, la « simplicité » de l'écriture des lois de la microphysique des nuages et la base existante du modèle de nuages dans le TGCM m'ont permis d'effectuer des tests sur cet aspect de la méthode. La brume et les nuages étant couplés, il a tout de même été nécessaire de prévoir un schéma de conversion permettant de passer de la représentation en section à celle en moments et *vice versa*. Cette conversion est obligatoire puisque la nucléation se base sur l'échange aérosols-noyaux.

Nous présenterons donc tout d'abord dans ce chapitre, le schéma de conversion de représentation mis au point. Puis nous décrirons de manière générale le modèle 1D utilisé pour effectuer les tests, ainsi que les protocoles de ces tests. Enfin nous présenterons les résultats de la méthode avant de tirer les conclusions et d'ouvrir sur les perspectives de cette méthode.

4.1 Représentation « mixte » : conversion des représentations en sections et en moments

Avant toute chose, soyons précis sur le principe évoqué ici. Il ne s'agit pas de faire interagir les deux types de représentations au sein d'un même processus. Cette « représentation » permet plutôt d'être capable à tout instant dans le modèle de choisir l'une des deux méthodes pour traiter l'évolution des traceurs tout au long d'un processus.

L'idée de départ de cette conversion était de pouvoir traiter directement en moments les processus pour lesquels le rayon des aérosols n'était pas discriminant. Ces processus sont globalement, dans le TGCM-2D, l'advection des traceurs par la circulation et l'ajustement convectif. L'intérêt d'un tel traitement est bien évidemment de diminuer le temps de calcul de ces processus en réduisant temporairement (et de manière efficace) le nombre de traceurs. Le second intérêt de cette conversion est qu'il permet, dans une moindre mesure, de tester la validité de la loi de distribution type choisie (éq. 2.10) pour représenter la population d'aérosols. Ceci peut être effectué en comparant les résultats d'un modèle utilisant uniquement une représentation en section avec ceux d'un modèle pour lequel la loi de distribution est forcée par cette conversion.

Dans la philosophie du TGCM-2D, chaque routine associée à un processus physique reçoit en entrée la valeur du traceur et retourne en sortie la tendance (variation par unité de temps) de ce traceur. De plus, à chaque pas de temps, tous les processus reçoivent la même distribution initiale. Dans le cas d'une représentation mixte des traceurs, certaines routines du modèle ne traiteront que des moments et d'autres uniquement des concentrations d'aérosols par case de rayon. Comme la description initiale de la population des aérosols est donnée sous forme de moments, le schéma de conversion doit être à même d'effectuer deux transformations :

- (1) D'une part, cette conversion doit pouvoir discrétiser la loi de distribution type sur une grille de rayons à partir des moments de la distribution.

- (2) D'autre part, elle doit permettre la migration de tendances en sections vers leur équivalence en moments de distribution.

En résumé, cette représentation mixte repose sur la possibilité de convertir une distribution décrite avec des moments en une distribution discrétisée sur N sections de rayons, et de reconverter les tendances de sections en moments de distribution.

Pour le premier point, la conversion d'une représentation en moments vers une représentation en sections est assez simple (et directe) grâce à la connaissance de la loi de distribution type préalablement choisie, $n(r/r_C)$.

En réalité, il est nécessaire de calculer pour tout couple de moments M_0 et M_3 , les concentrations d'aérosols associées à chaque case de rayon. Pour y parvenir, nous récupérons d'abord le rayon caractéristique de la fonction à l'aide du couple $(M_0 ; M_3)$. Si la loi de distribution est normalisée de telle sorte que $\int_0^\infty n(r/r_C) dr = 1$, alors la concentration d'aérosols dans chaque case de rayon est donnée par le produit de M_0 et de l'intégration de la loi $n(r/r_C)$ entre les bornes r_1 et r_2 de la case :

$$r_C = \left[\frac{1}{\alpha(3)} \times \frac{M_3}{M_0} \right]^{1/3}$$

$$\Delta N_i = M_0 \int_{r_1}^{r_2} n(r/r_C) dr$$

Dans la pratique, l'intégration numérique associée à chaque case de rayons sur l'ensemble de la grille physique du modèle et à chaque pas de temps serait bien trop coûteuse (et ce même avec une méthode de quadrature de Gauss). De fait, il est préférable d'utiliser une table pré-calculée. Avec la définition de la loi de distribution, on peut définir, pour une valeur du rayon caractéristique¹ r_C , l'ensemble des ΔN_i^* associés à chaque case d'une grille de rayon préalablement établie tel que :

$$\Delta N_i^* = \int_{r_1}^{r_2} n(r/r_C) dr \quad \Longrightarrow \quad \sum_{i=1}^n \Delta N_i^* = 1$$

En calculant cette relation pour différentes valeurs de r_C , on obtient la table de la distribution de concentrations en rayons. Le principe d'utilisation de la table est présenté dans la figure 4.1. Pour passer de la représentation en moments à la discrétisation en sections, il suffira d'interpoler les ΔN_i^* à deux valeurs de r_C de la table puis d'en multiplier le résultat par le moment M_0 ($\Delta N_i = M_0 \times \Delta N_i^*$).

Dans le cas de notre schéma de conversion, nous avons ainsi tabulé la distribution sur 40 sections pour 800 valeurs de $r_C \in [10^{-8}m ; 10^{-6}m]$ et mis au point une interpolation quadratique des ΔN_i^* dans l'espace logarithmique ($\log \Delta N_i^* - \log r_C$). L'intervalle de r_C est choisi en fonction de la grille en rayons utilisée et un « garde-fou » est déclenché si r_C se situe en dehors des bornes de la table. Dans ce cas, on ramène le rayon caractéristique r_C à la valeur obtenue pour la loi de distribution moyenne dans la troposphère ($r_C \approx 5 \times 10^{-7} m$ voir table 2.3). Ce garde-fou est mis en place essentiellement pour éviter des problèmes numériques liés aux faibles valeurs possibles de M_3 et M_0 ou si le rapport M_3/M_0 ne suit pas la règle imposée

1. On rappelle qu'à une valeur donnée de r_C correspond un couple unique $(M_0 ; M_3)$.

par le facteur de forme α (voir page 45). Dans la pratique, ce garde-fou n'est jamais activé².

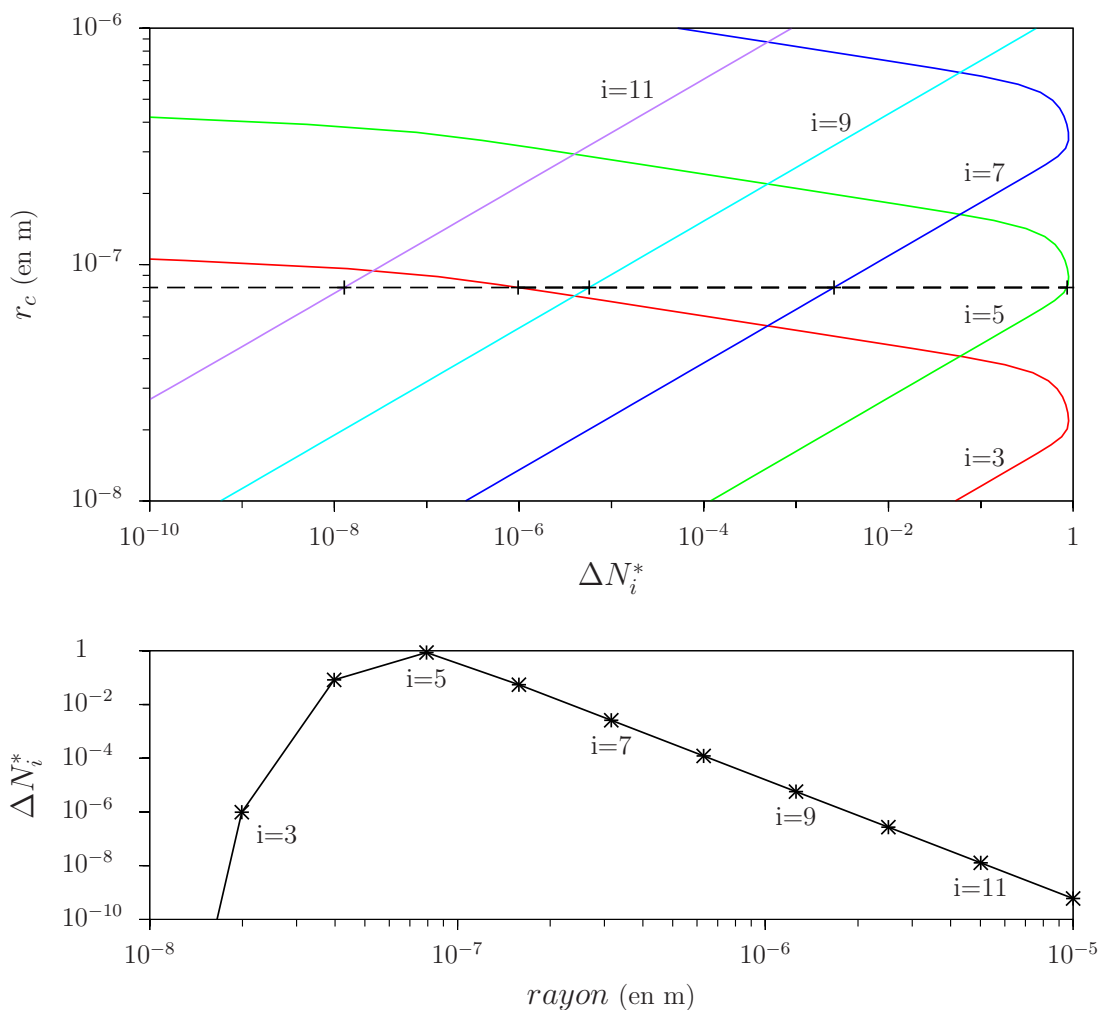


FIGURE 4.1 – Schéma de principe d'utilisation de la table pré-calculée des distributions de concentration d'aérosols discrétisées sur N sections. La figure du haut représente la valeur du rayon caractéristique, r_C , en fonction de ΔN_i^* pour $i = 3, 5, 7, 9$ et 11 (i référant à une section de la grille). Les intersections entre les courbes et la droite $r_C = 8 \times 10^{-8} m$ donnent les valeurs de la distribution des concentrations d'aérosols (ΔN_i^*) pour la loi de distribution *normalisée* correspondant à ce rayon caractéristique (figure du bas).

Le second point est associé au passage des tendances en sections vers leur équivalent en moments pour restituer les tendances des routines fonctionnant en sections. Une fois les tendances calculées par chaque routine du modèle, on incrémente chaque valeur initiale des moments. Pour le moment d'ordre k et p différents processus, on a :

$$M_k^{t+1} = M_k^t + \sum_{j=1}^p dM_k^j$$

2. En réalité l'activation de ce garde-fou peut intervenir lors de la première itération de la première simulation mais ce problème est lié à l'établissement des fichiers de démarrage du modèle et non au modèle lui même.

Si le processus est traité en moment, le calcul est direct (la tendance est retournée sous forme de moment). Dans le cas contraire, on effectue la conversion des tendances en sections vers leur représentation moment à l'aide d'une règle simple. La répartition des tendances en sections ΔN_i varie selon les processus traités et ne suit donc pas une distribution générale. De fait, nous ne connaissons pas de loi spécifique pour la conversion « sections \rightarrow moments ». La projection des variations relatives du moment « approximatif » M_k^* sur le moment de référence M_k devient l'unique moyen de convertir de manière simple et rapide les tendances.

On évalue tout d'abord le moment de la loi de distribution correspondant à la somme des N sections :

$$M_k^* = \sum_i^N \Delta N_i \times r_i^k$$

Ce moment est comparable au moment initial M_k mais induit des différences du au schéma d'intégration (simple somme). Le même calcul est effectué pour les tendances de sorte que :

$$\delta M_k^* = \sum_i^N \delta \Delta N_i \times r_i^k \quad (4.1)$$

Finalement, on déduit les tendances finales en appliquant une mise à l'échelle de l'équation 4.1 :

$$\delta M_k = \delta M_k^* \times \left(\frac{M_k}{M_k^*} \right)$$

4.2 Description du modèle et protocole des tests

Afin de tester la représentation en moments de la microphysique des nuages, ainsi que la représentation « mixte », nous avons utilisé un modèle à une dimension simulant une colonne atmosphérique proche des conditions de Titan. Le modèle ne reproduit pas *stricto sensu* les observations de Titan mais tend à s'en approcher. Ce modèle sert avant tout pour comparer les deux méthodes présentées dans les chapitres précédents.

Le modèle hérite de la structure du TGCM-2D qui se compose de deux grandes parties, le cœur dynamique et la partie physique. La migration vers un modèle 1D se fait principalement en désactivant la partie dynamique. Techniquement, certains ajustements du code doivent être appliqués afin de pouvoir utiliser correctement le modèle mais ils ne seront pas présentés ici. A cette base, nous avons intégré le schéma de représentation mixte ainsi que la méthode des moments pour la microphysique des nuages seulement. Tous les autres processus sont gérés en sections. On obtient alors un modèle 1D à N colonnes indépendantes gérant les processus suivants :

- Microphysique de la brume et des nuages.
- Calcul des propriétés optiques et transfert radiatif.
- Diffusion des traceurs³.

3. La diffusion est appliqué à tous les traceurs du modèle (microphysique et chimique) mais n'est indispensable que pour le CH_4 dont les sources se situent à la surface.

Dans le cadre de notre étude, nous avons préparé trois colonnes de tests :

La première colonne correspond au modèle de référence (*modèle R* par la suite) dans lequel tous les processus sont représentés en sections. Les schémas utilisés pour la microphysique de la brume et des nuages sont respectivement similaires à ceux développés par Cabane et al. (1993) et Rannou et al. (2006). Le calcul de la grille de rayons se base sur le même schéma que celui présenté en page 18 avec le paramétrage suivant : $r_1 = 1.64 \times 10^{-9} m$; $V_{rat} = 2.347$ et $N = 40$ cases. L'intervalle de rayons ainsi couvert est $r \in [1.64 \times 10^{-9} m; 1.07 \times 10^{-4} m]$.

Le second modèle (*modèle C*) se base sur le processus de conversion. Dans ce modèle, la loi de distribution est initialement définie par ses moments mais tous les processus sont traités en sections avec les mêmes schémas que pour le *modèle R*. Le *modèle C* diffère du *modèle R* uniquement par l'utilisation du schéma de conversion appliqué au début et à la fin de chaque pas de temps. Le *modèle C* permet donc de tester d'une part la procédure de conversion et de valider d'autre part la loi de distribution en taille prescrite (éq. 2.10) en comparant avec le modèle en sections original.

Dans le troisième modèle, nous appliquons le même processus de conversion que dans le *modèle C*, mais cette fois, la microphysique des nuages est traitée directement en représentation paramétrisée à l'aide des moments de la loi de distribution. Les autres processus (microphysique de la brume, transfert radiatif et diffusion) restent traités en sections. Ce modèle teste donc principalement l'application de la méthode des moments. Par la suite, ce modèle hybride sera simplement nommé *modèle H*.

Nous avons effectué plusieurs simulations à partir de ce modèle 1D à 3 colonnes dans différents cas de figure dont nous dressons la liste ci-dessous :

- (1) Test avec cycle annuel.
- (2) Test avec cycle diurne.
- (3) Utilisation d'une loi Log-Normale (cycle annuel).

Le test sur la loi Log-Normale vaut surtout pour valider nos propos dans la section 3.2.2 aussi nous ne détaillerons pas autant les comparaisons que pour les deux premiers tests. L'emploi de cette loi Log-Normale s'effectue simplement en deux étapes : Tout d'abord, il faut changer la table pré-calculée des distributions pour le schéma de conversion. Ensuite il est nécessaire d'utiliser la relation inter-moments associée à cette loi. Le paramètre σ_0 est fixé à l'aide des moments M_3 et M_6 de la loi de distribution Titan (voir section 3.2.2).

4.3 Simulations et résultats des tests

Pour chacun des tests effectués, nous effectuerons des comparaisons entre les trois modèles *R*, *C* et *H* pour certains champs atmosphériques. Nous focalisons notre étude sur trois de ces champs d'intérêt : la température, l'opacité de la brume et enfin l'opacité des nuages.

4.3.1 Cycle annuel

Pour ce test, chaque modèle utilise un cycle saisonnier d'insolation. Les variations de l'incidence solaire et de la fraction jour/nuit sont calculées pour la latitude de 30°N. Les caractéristiques orbitales (excentricité, date du périhélie, ...) correspondent à celles de Titan. Les opacités de la brume et des nuages sont évaluées environ deux fois par jour.

La figure 4.2 présente les variations de température et d'opacité de la brume au niveau 60 mbar (~ 55 km). Les figures 4.3, 4.4 et 4.5 présentent respectivement, la température, l'opacité des nuages ainsi que l'opacité de la brume à 3 niveaux de pression différents ainsi qu'à la surface. Les niveaux de pression sont 1000, 700 et 400 mbars et correspondent respectivement à ~ 6 , ~ 15 et ~ 25 kilomètres d'altitude. Par soucis de clarté, chacune des figures ne comporte qu'une seule légende valable pour toutes les sous-figures.

Dans la figure 4.4, l'opacité de nuages est un proxy correspondant à la section géométrique des gouttes ($\tau \approx \pi r_g^2$) et représentatif de l'opacité dans le visible. Son calcul est effectué à chaque pas de temps puis moyenné une fois par jour. Ce proxy évite l'évaluation à chaque itération des sections efficaces qui augmente considérablement les temps d'exécution.

Dans la stratosphère, les trois modèles prédisent le même profil de température avec des différences inférieures à 0.5%. Pour la colonne d'opacité, l'erreur ne dépasse pas 1%. Dans ces couches, les modèles *C* et *H* donnent exactement le même résultat. Ceci est attendu compte tenu du fait qu'ils exécutent strictement les mêmes calculs : la conversion sections \leftrightarrow moments et la microphysique de la brume en sections.

A la tropopause, les modèles présentent de légères différences (figure 4.2). Ces dernières sont principalement dues au fait que le plafond des nuages n'est pas strictement identique pour chacun des modèles. L'erreur commise sur l'opacité de la brume à ce niveau pour le modèle *H* est de l'ordre de 0.25% ce qui se traduit par une différence relative de 0.18% sur la température à la tropopause.

Dans la troposphère, les modèles présentent des différences à peine plus importantes pour ces deux champs (fig. 4.3 et 4.5). La température produite par les trois modèles est quasiment identique avec une erreur relative maximum de 0.2%, voir identique à certains niveaux. A titre d'exemple, l'erreur commise au niveau 700 mbar conduit à une différence (maximum) de température de 0.2 K. Une telle différence à ce niveau, pour une température de 84 K, correspond à une différence de fraction molaire du méthane à saturation d'environ 0.002. L'opacité de la brume est extrêmement stable dans la troposphère (fig. 4.4) et ne varie pas de plus de 1.5%. Le focus sur la brume présenté dans la figure 4.5 montre clairement qu'il n'est pas possible de déterminer si le schéma de conversion ou celui de la microphysique des nuages en moments est responsable de ces différences.

L'évolution de l'opacité des nuages (fig. 4.4) indique que les trois modèles sont virtuellement équivalents à 400 et 700 mbars. Sur le cycle saisonnier, le niveau absolu d'opacité (à la surface donc) est identique à 10% près. De plus, les trois modèles ont le même type de variations saisonnières, particulièrement pour les saisons les plus froides qui correspondent au maximum d'activité nuageuses dans les modèles (fig. 4.4 a,b). Dans les couches les plus basses ($P \sim 1000$ mbar), l'opacité des nuages

du modèle H est environ 16% plus faible que dans les deux autres modèles pour la période de faible activité (ie : l'été). Néanmoins, l'activité dans ce modèle reste très similaire aux deux autres pour la période de grande activité (hiver) (fig. 4.4 c).

La figure 4.6 présente les profils verticaux de la brume, des nuages ainsi que de la température sur toute la colonne atmosphérique. Les figures de gauche correspondent à la période de faible activité nuageuse (en été) et celles de droite à la période de forte activité (l'hiver). Elles donnent une vision globale des différences entre les trois modèles et de l'impact de ces différences sur le profil de température (quasi-nul).

La figure 4.4 ne permet pas d'effectuer une comparaison détaillée des prédictions nuageuses. Nous présentons donc pour clore cette partie sur le cycle annuel la figure 4.7. Cette dernière montre les densités d'occurrences de nuages en fonction de leur opacité, pour les trois niveaux de pressions et les deux saisons d'intérêt. Statistiquement, les distributions d'opacité nuageuse des trois modèles restent globalement similaires quelque soit la saison étudiée. Les différences observées dans la figure 4.4 peuvent engendrer des écarts de température d'environ 0.2 K dans le modèle H comparé au modèles C et R .

Dans le cadre du GCM (2D ou 3D), ces différences mineures devraient pouvoir être « gommées » à l'aide d'ajustement mineurs sur les paramètres du modèle.

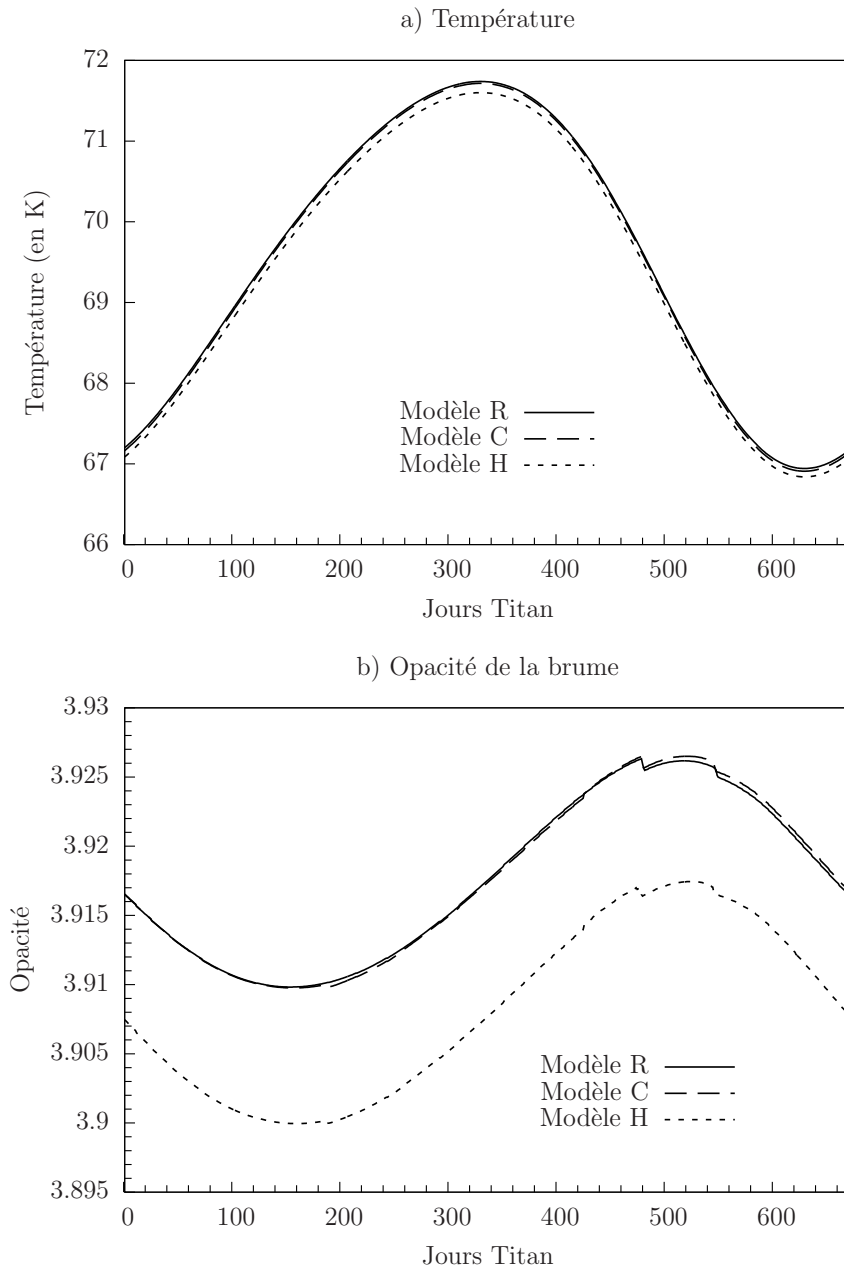


FIGURE 4.2 – Variations annuelles de la température (en haut) et de l'opacité de la brume (en bas) à la tropopause pour les trois modèles.

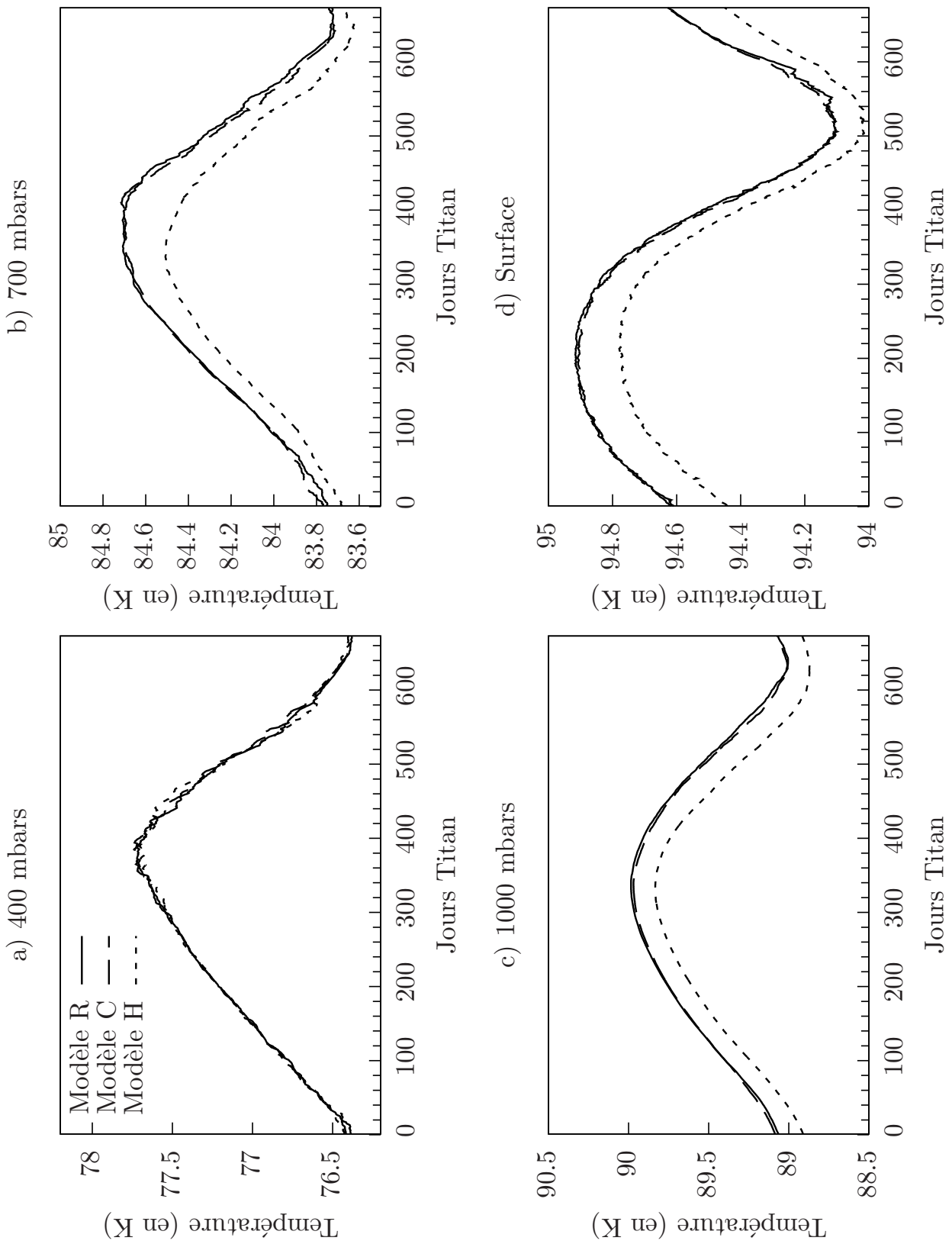


FIGURE 4.3 – Variations annuelles (673 jours Titan) de température pour les modèles R (courbe pleine) et C (tiret long) et H (tiret court) à trois niveaux d'altitude et à la surface.

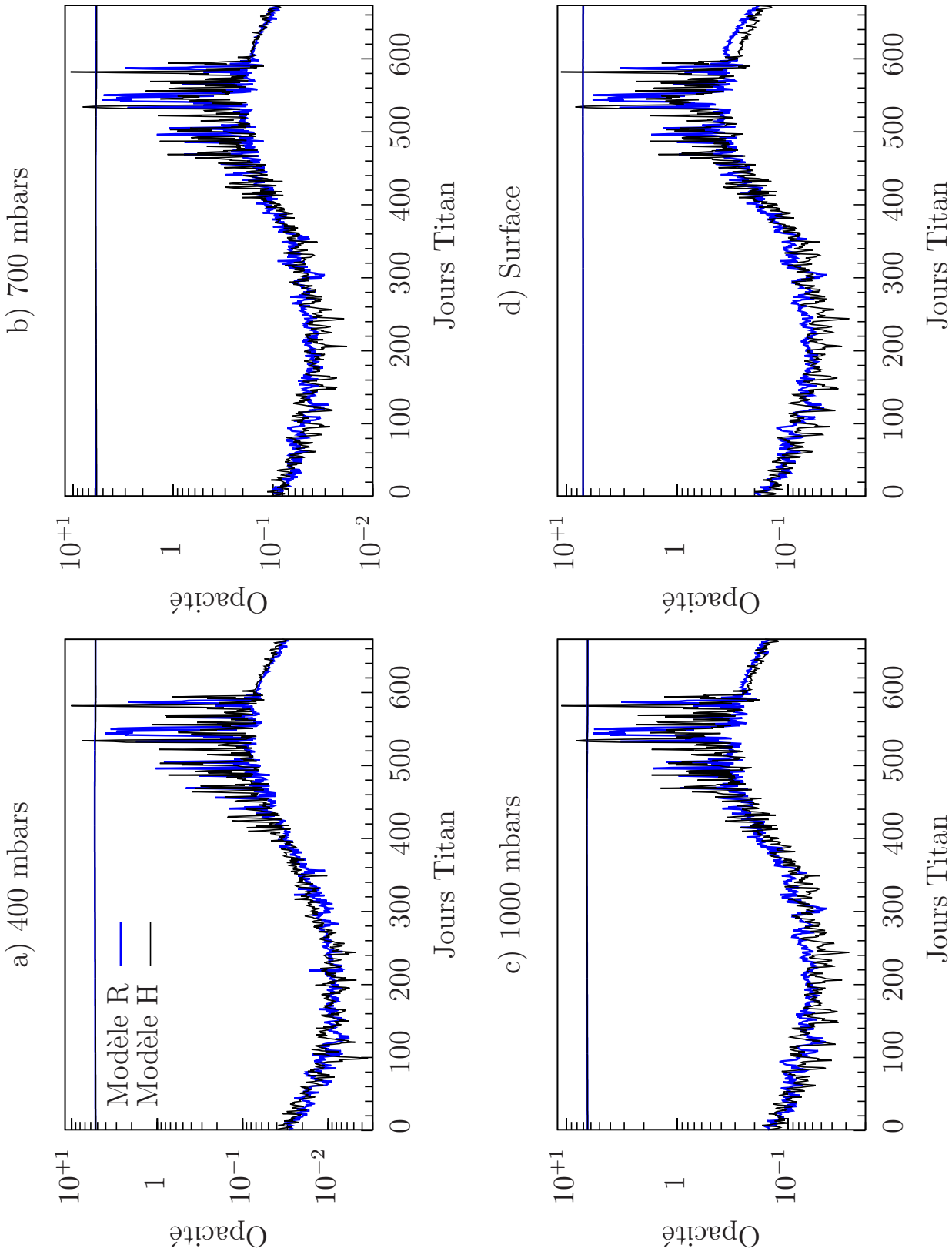


FIGURE 4.4 – Variations annuelles (673 jours Titan) de l'opacité des *nuages* pour les modèles *R* (courbe bleue) et *H* (courbe noire) à trois niveaux d'altitudes et à la surface. L'opacité de la *brume* (courbe d'opacité ~ 5.7) est aussi tracée pour chaque niveau. Ses variations sont présentées dans la figure 4.5.

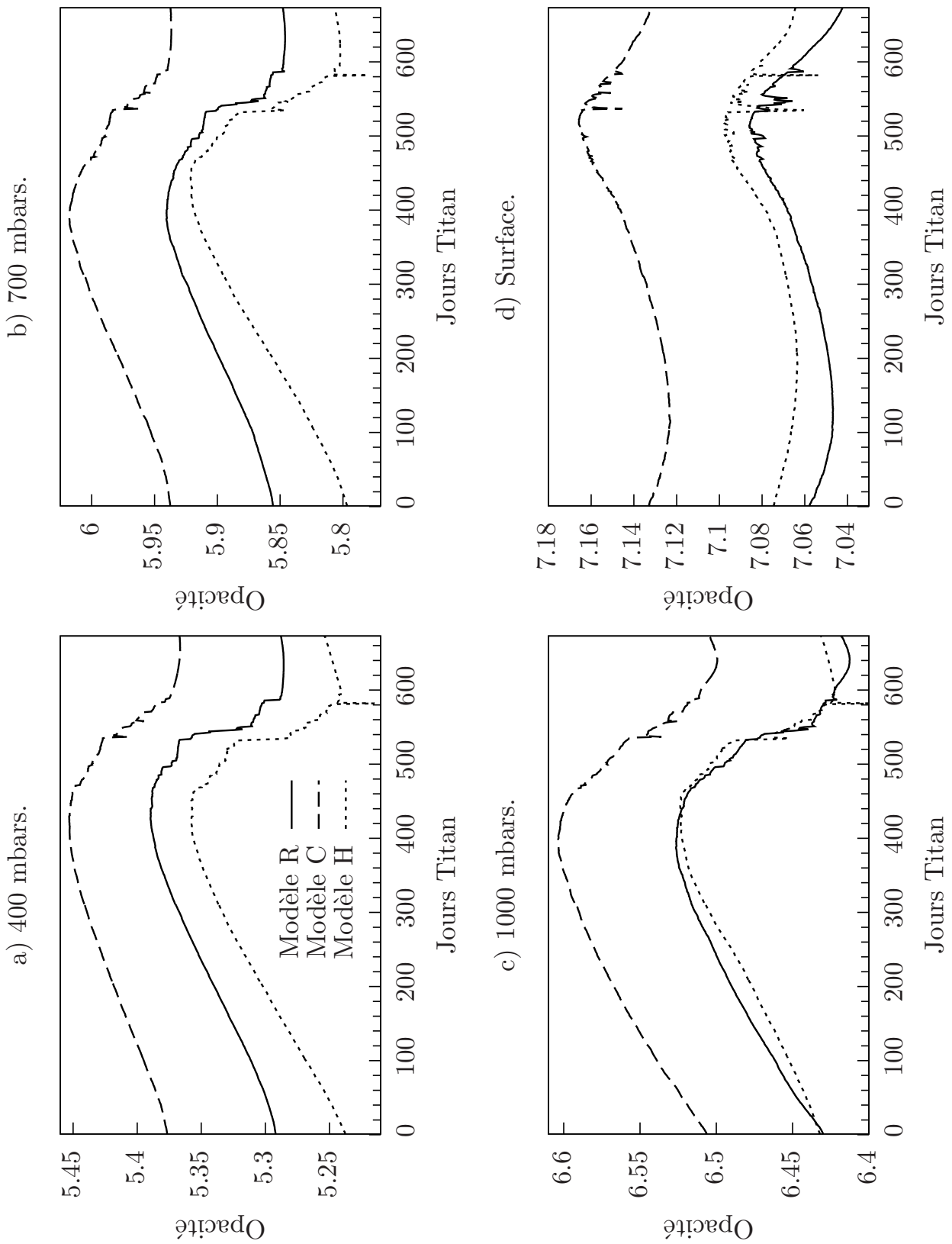


FIGURE 4.5 – Variations annuelles (673 jours Titan) de l'opacité de la *brume* pour les modèles *R* (courbe pleine) et *C* (tiret long) et *H* (tiret court) à trois niveaux d'altitudes et à la surface.

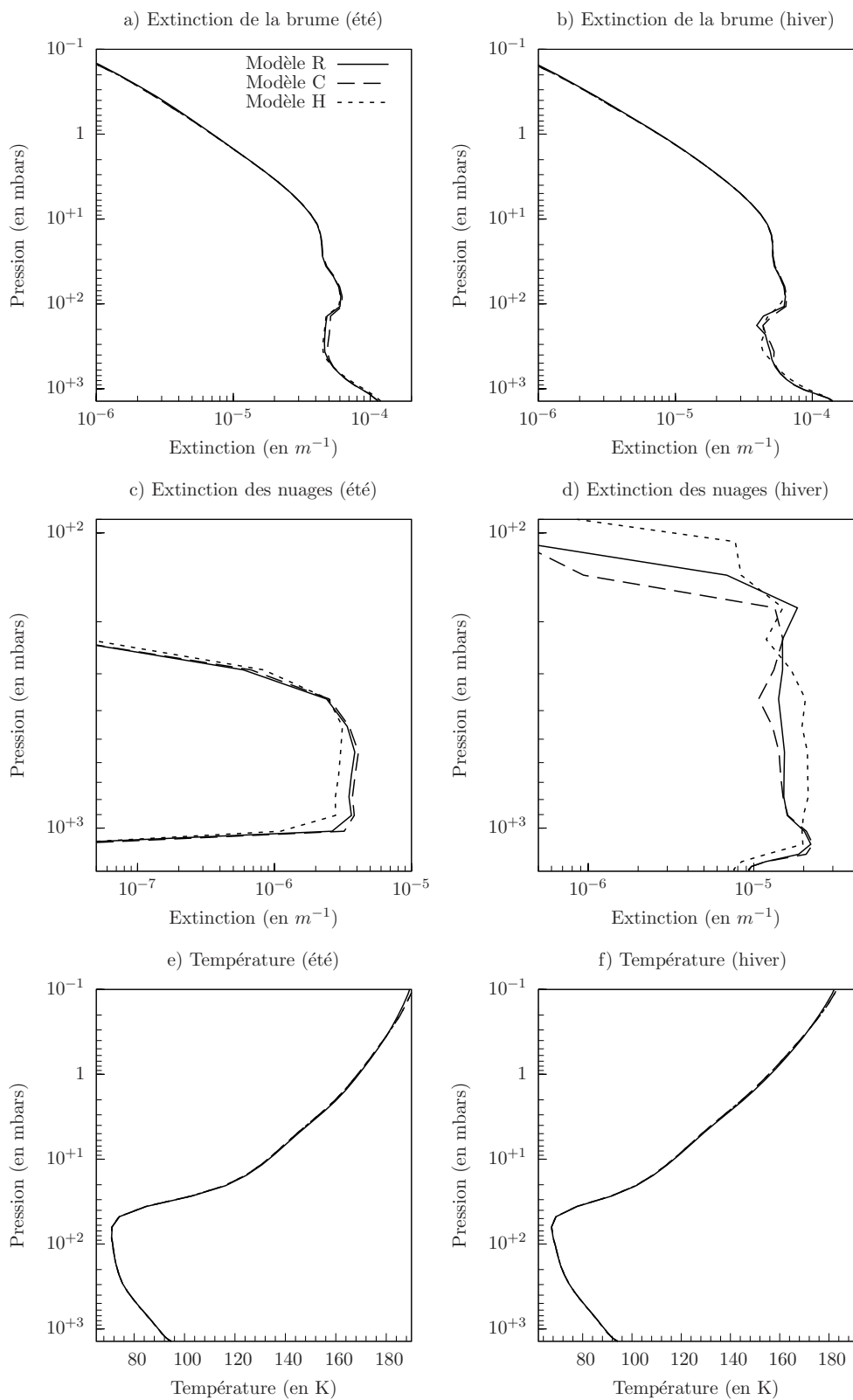


FIGURE 4.6 – Profils verticaux de l’extinction de la brume, des nuages et de la température pour les trois modèle à deux saisons : $L_s = 90^\circ$ (été); $L_s = 270^\circ$ (hiver). Pour chaque figure, la quantité est moyennée sur une saison complète (90° de Longitude Solaire).

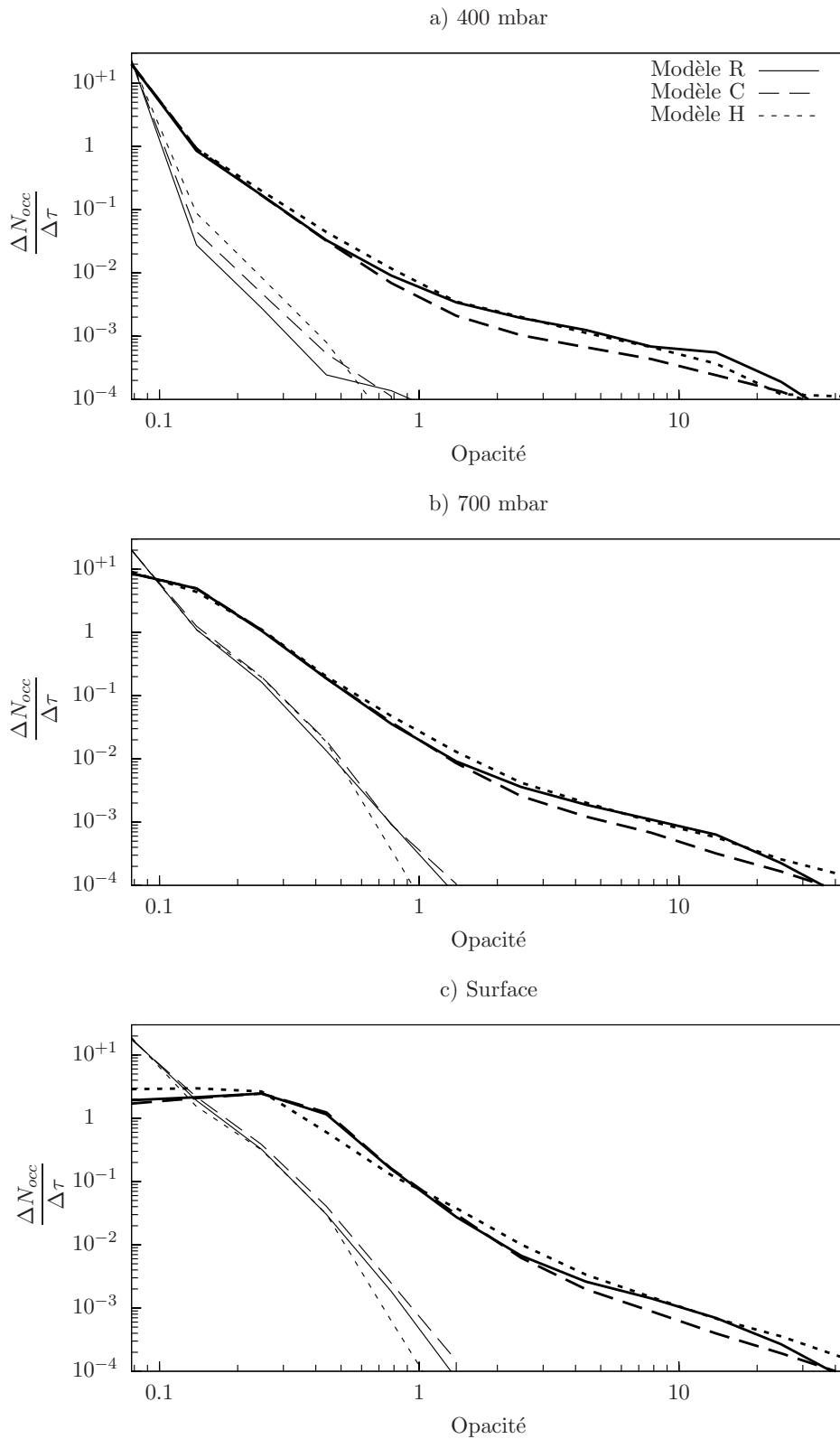


FIGURE 4.7 – Densité moyenne d’occurrences de la couche nuageuse en fonction de l’opacité pour trois niveaux de pressions en été (lignes fines) et en hiver (lignes épaisses). La moyenne est effectuée sur une saison complète (90° de Longitude Solaire).

4.3.2 Cycle diurne

La structure du modèle 1D permet facilement d'inclure un cycle diurne en modifiant les paramètres d'insolation. L'angle d'incidence est alors calculé de manière rigoureuse en fonction de l'heure de la journée et la fraction jour/nuit est directement déduite de cet angle. Pour ces tests, nous portons notre choix sur les deux périodes de l'année $Ls = 90^\circ$ (\sim jour #170) et $Ls = 270^\circ$ (\sim jour #500) correspondant respectivement au minimum d'activité nuageuse (été) et à son maximum en hiver (voir figure 4.4). Pour chacun des tests effectués, nous lançons une simulation de 100 jours à partir d'un état de l'atmosphère provenant des simulations dédiées au cycle annuel et correspondant à la période concernée. Les simulations démarrent donc avec un état déjà convergé et les paramètres du modèle restent inchangés (pas de temps, paramètres libres) à l'exception du transfert radiatif et du calcul des propriétés optiques. Ces deux processus sont évalués à chaque itération, soit 200 fois par jour afin de décrire au mieux le cycle diurne et obtenir la meilleure statistique possible pour les opacités. De fait, les opacités tracées dans les figures de cette section dérivent des véritables calculs de la section géométrique des gouttes à 715 nm.

La figure 4.8 montre les variations journalières de l'opacité des nuages sur une période de 5 jours pour les deux modèles R et H et aux deux saisons. Ces deux séries montrent clairement un cycle diurne marqué apparaissant dans chacun des modèles et plus particulièrement lors des périodes de plus faibles activités. Les nuages apparaissent généralement la nuit et persistent une partie du jour. A première vue, les deux modèles ont un comportement similaire comme dans le cas du cycle annuel.

De la même manière que pour le cycle annuel, nous pouvons mettre en évidence ces similitudes à l'aide des densités d'occurrence. Afin de tester le contraste matin/soir, nous traçons dans la figure 4.9, la densité moyenne d'occurrence de l'opacité des nuages sur un intervalle de 2 heures autour du lever et du coucher de soleil pour les 100 jours de simulation. Statistiquement, les deux modèles produisent les mêmes opacités et le même contraste diurne entre le matin et le soir. Les modèles R et H ont donc un comportement similaire et la méthode des moments est capable de produire des résultats satisfaisant de ce point de vue. Ces résultats sont motivants pour la mise en place de cette méthode dans le TGCM-3D qui peut conduire des simulations avec le cycle diurne.

Autour de $Ls = 90^\circ$, il ne fait aucun doute que la couche nuageuse est plus épaisse le matin que le soir. Autour de $Ls = 270^\circ$, les variations de l'opacité sont plus importantes et ce contraste n'est plus aussi évident. Il est intéressant de noter qu'un tel contraste a été rapporté par [Hirtzig et al. \(2006\)](#). Les auteurs ont utilisé plusieurs observations au sol effectuées entre 2001 et 2005 (durant le solstice d'été de l'hémisphère sud) et ont étudié la différence d'intensité au limbe côté matin et côté soir. Au cours du déplacement de Titan et de la Terre le long de leur orbite respective, l'angle de phase ϕ pour les observations au sol de Titan n'excède jamais 6° . Un effet assez évident apparaît sur les intensités observées qui sont légèrement plus grandes au limbe situé du même côté que le point sub-solaire. Il en résulte que le rapport d'intensité au limbe soir/matin varie autour de 1 quand ϕ varie entre -6° et $+6^\circ$ (ϕ est négatif quand le point sub-solaire se situe du côté matin). L'effet diurne apparaît en réalité lors que ϕ passe des valeurs négatives aux valeurs positives. En

passant par 0° , le rapport soir/matin n'est pas égal à 1 mais est légèrement inférieur à l'unité (voir figure 4.10). Cette asymétrie entre le limbe du matin et celui du soir révèle clairement la présence d'un effet diurne. Le test simple effectué ici montre que la couche nuageuse varie aussi selon un cycle diurne marqué durant l'été (fig. 4.9.a).

Le modèle 1D n'est certainement pas le meilleur outil pour traiter ce phénomène en détails mais donne qualitativement un comportement similaire aux observations. Ces premiers résultats sur le cycle diurne sont motivant pour développer le même type d'étude avec le TGCM-3D incluant le cycle diurne et la microphysique des nuages.

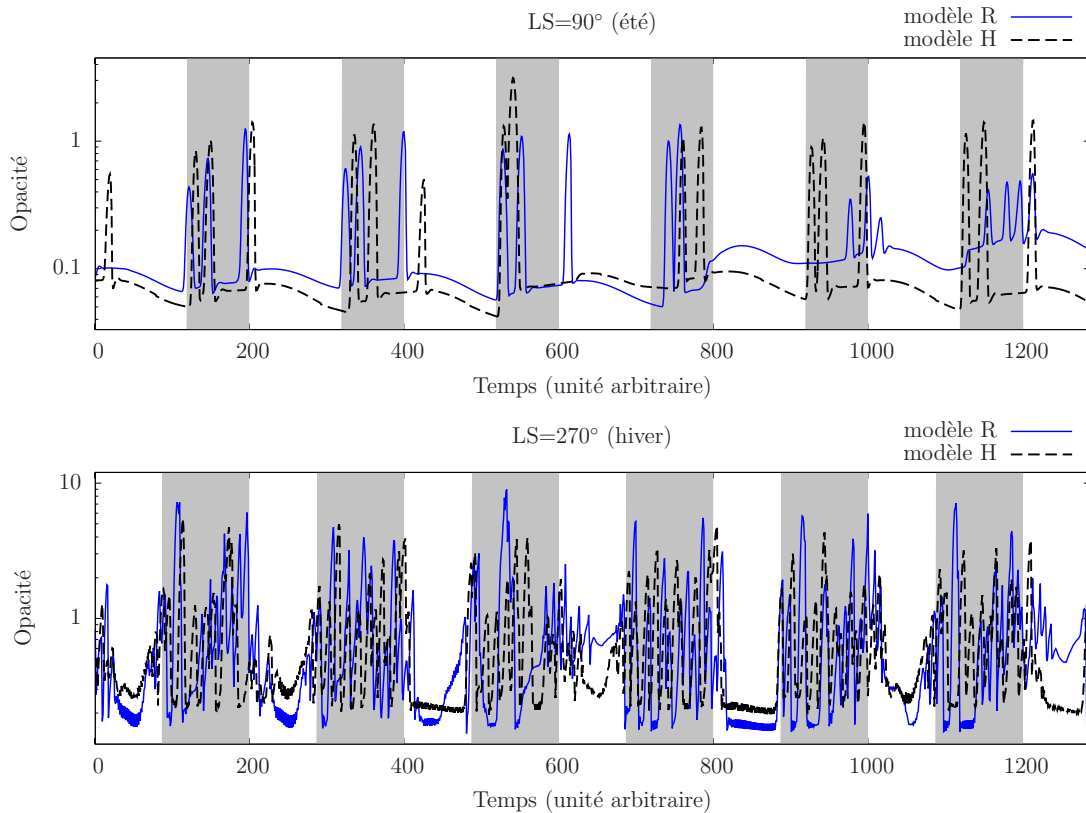


FIGURE 4.8 – Variations journalières de la colonne d'opacité total des nuages (à 715 nm) en été (figure a) et en hiver (figure b) sur 5 jours de simulation. Les zones blanches et grises en arrière plan représentent respectivement le jour et la nuit.

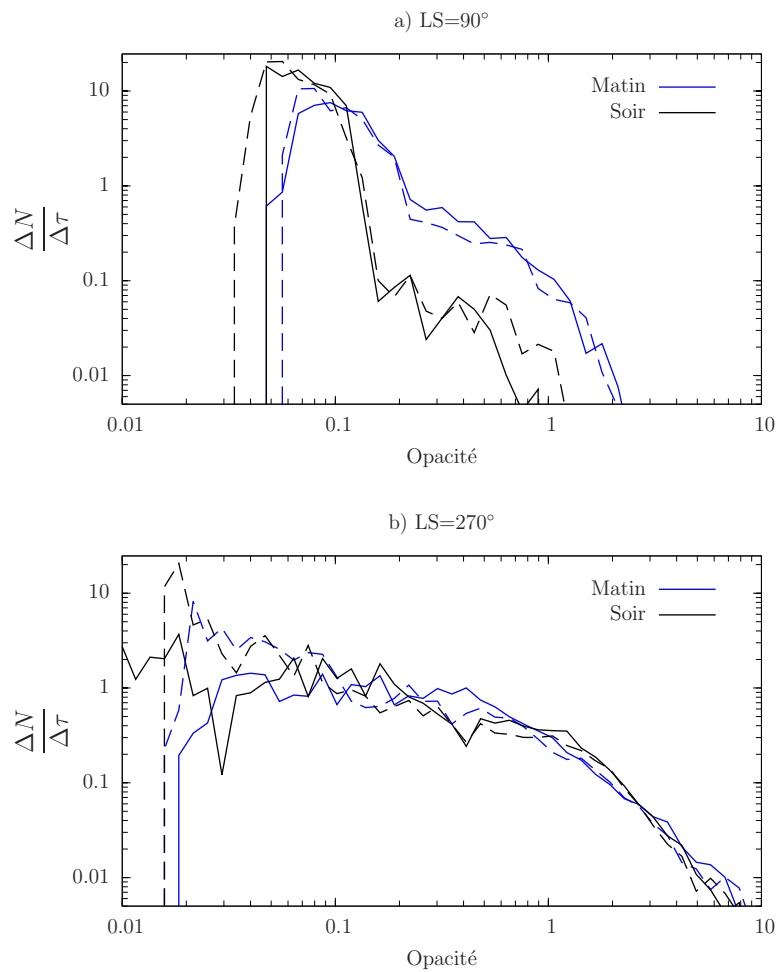


FIGURE 4.9 – Densité moyenne d’occurrences de la couche nuageuse en fonction de l’opacité au matin (en bleu) et au soir (en noir) pour le modèle R (trait continu) et le modèle H (tirets longs).

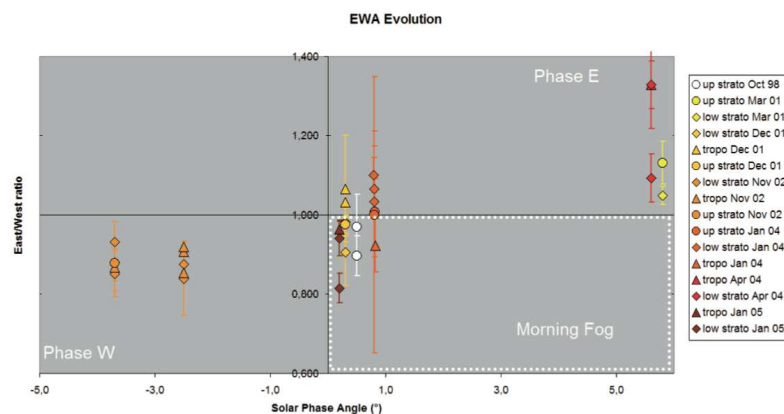


FIGURE 4.10 – Figure extraite de [Hirtzig et al. \(2006\)](#) présentant le rapport d’intensité au limbe Soir/Matin en fonction de l’angle de phase φ . Lorsque φ passe des valeurs négatives aux valeurs positives, le rapport n’est pas supérieur à 1 comme on s’y attendrait. Ce rapport traduit une asymétrie entre les deux limbes (voir texte).

4.3.3 Test de la loi Log-Normale

Dans cette courte section, nous présentons les résultats des tests associés à la substitution de loi de distribution Titan par une loi Log-Normale équivalente. Cette substitution est effectuée uniquement dans le schéma en moments et la méthode de conversion. Nous pouvons donc comparer directement l'impact du choix de la fonction analytique prescrite pour la méthode. Pour l'ensemble de ces tests, nous ne présentons uniquement que la comparaison entre les deux modèles hybride (que nous appellerons *modèles H_{Titan} et H_{Log-N}*).

La figure 4.11 présente les variations annuelles d'opacité totale (ie : à la surface) des nuages (en haut) et de la brume (en bas). La figure 4.12 présente les variations de température pour 3 niveaux de pressions ainsi qu'à la surface. Sur toute la troposphère, les différences relatives d'opacité pour les nuages entre les deux modèles H_{Log-N} et H_{Titan} sont au maximum de 6% (fig. 4.11). En ce qui concerne la brume, les différences n'excèdent jamais plus de 0.2%. Ces « erreurs » conduisent à une différence relative de température d'au maximum 0.01%. L'ensemble de ces différences est totalement négligeable devant les différences entre le modèle de référence et le modèle hybride.

Comme nous l'avons déjà supposé dans la section 3.2.2, les résultats entre les deux modèles H_{Titan} et H_{Log-N} sont très similaires. Cela tient au fait que la loi de distribution du modèle 1D (voir figure 2.6) est plus symétrique que son homologue en 2D et sa forme se rapproche d'une loi log-normale. Par extension, le facteur de forme $\alpha(k)$ associée à chacune des lois (Titan-1D et Log-N) est quasiment identiques. De plus, nous rappelons que les paramètres initiaux de la loi log-normale ont été calculés de manière à ce que les moments d'ordre 0, 3 et 6 (qui sont les seuls utilisés pour la microphysique des nuages dans le cas de notre étude⁴) soient identiques entre les deux lois.

Nous rappelons tout de même que ces fortes similitudes ne sont dues qu'au point exposé ci-dessus. Dans un modèle 2D (ou 3D par extension), la loi de distribution Titan n'est plus la même et les propriétés des deux fonctions (Titan, Log-N) ne seront plus (quasi) identiques comme ici. Si ce test valide l'emploi d'une loi Log-Normale *pour la microphysique des nuages* dans un modèle 1D, rien n'indique *à priori*, que cette dernière puisse être utilisée dans le GCM.

4. Pour un rappel des détails concernant cet aspect, voir section 3.2.2, p. 48.

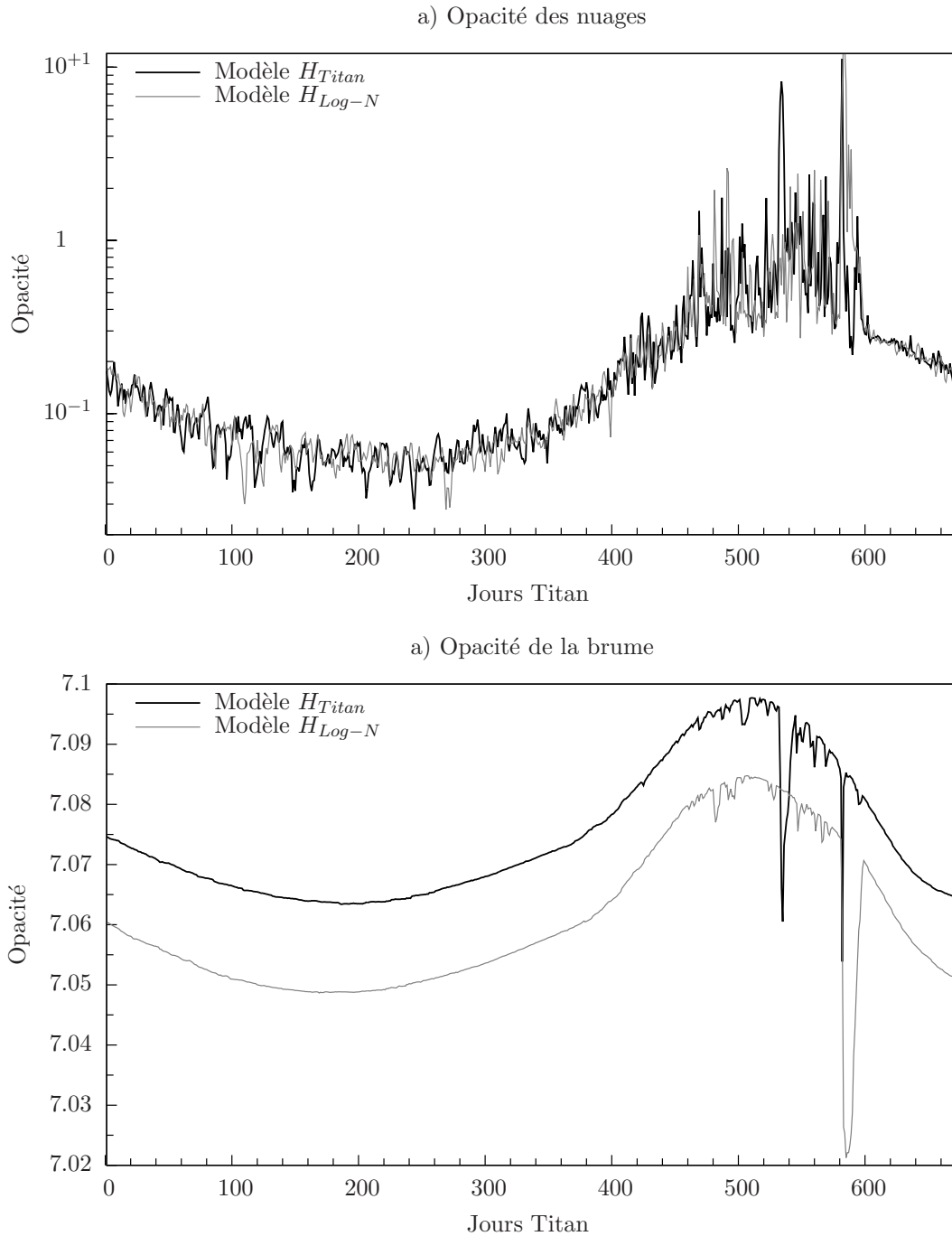


FIGURE 4.11 – Variations annuelles de la colonne d’opacité totale des nuages (en haut) et de la brume (en bas) pour les modèles H_{Titan} et H_{Log-N} .

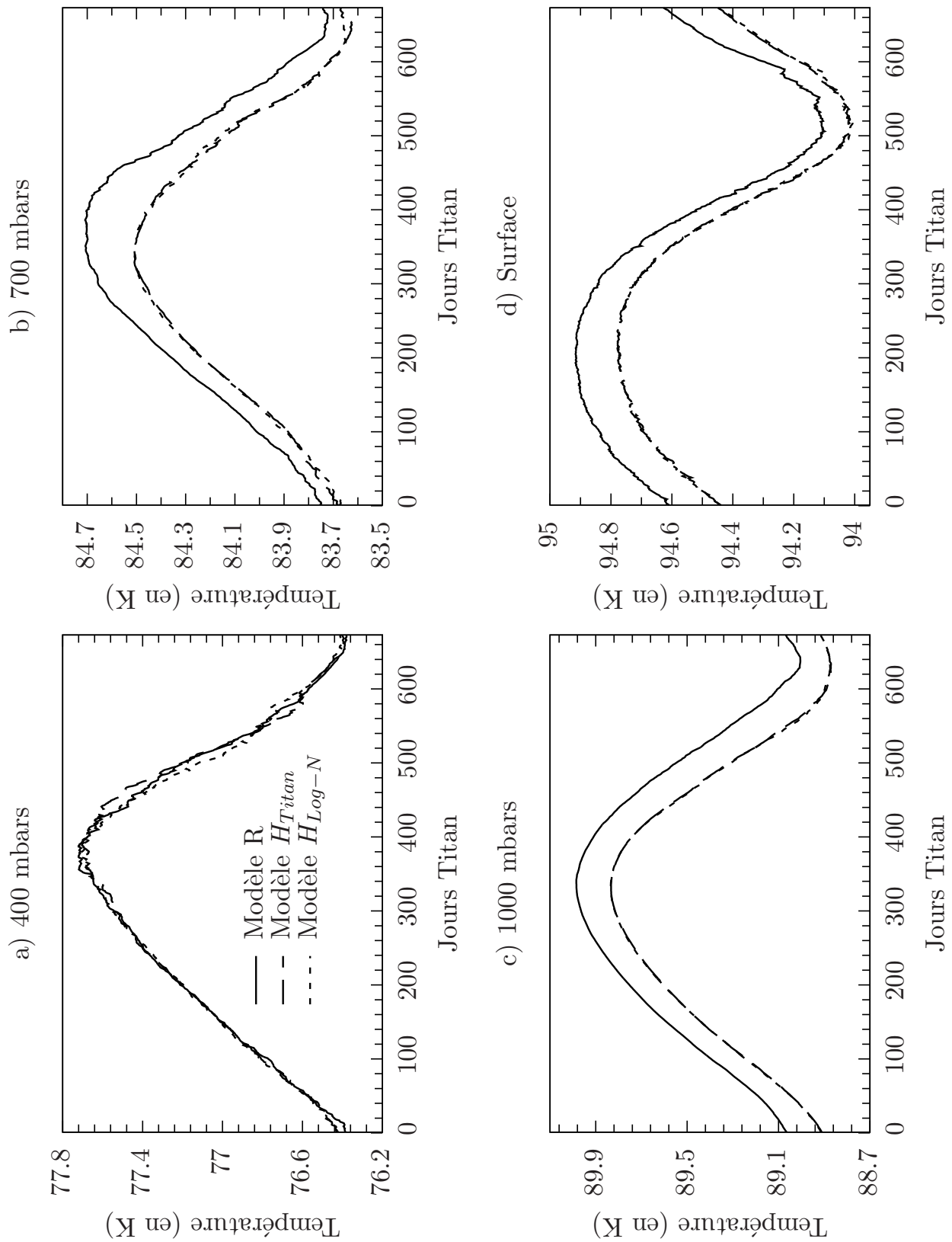


FIGURE 4.12 – Variations annuelles de température pour les modèles H_{Titan} et H_{Log-N} à 3 niveaux de pressions ainsi qu'à la surface.

4.4 Résumé

Le modèle 1D que nous avons développé ici, permet de traiter la microphysique des nuages selon deux représentations des lois de distribution en taille des aérosols. Une méthode de conversion entre ces deux représentations a aussi été mise au point afin de pouvoir traiter la partie microphysique des nuages sous les deux formes. Ces trois modèles ont été testés selon deux types de variations de l'insolation : un cycle annuel et un cycle diurne.

Pour le cycle annuel, la description en moments produit des résultats similaires à la représentation en sections avec une erreur relative d'environ 1% pour l'opacité de la brume, $\sim 10\%$ pour les nuages, se traduisant pas 0.2% de différence sur la température. Les erreurs sur les profils d'extinction sont plus larges et peuvent atteindre 5 à 15% pour la brume et $\sim 30\%$ pour les nuages. Les densités de distribution des nuages sont comparables et globalement identiques.

Les simulations effectuées avec le cycle diurne permettent de tester la réponse à court terme des modèles sur la couche nuageuse. Ces tests montrent que la réponse à court terme des modèles est aussi identique et suit les même tendances journalières. Ce résultat intéressant montre que le modèle « en moments » suit correctement le cycle diurne.

Les résultats associés au modèle de conversion (modèle *C*) montrent que l'emploi de la loi de distribution moyenne troposphérique pour l'ajustement de la fonction analytique présentée dans la section 2.1.5 (p. 2.10) est valide.

La représentation en moments des lois de la microphysique de la brume a été mise de côté pour le moment. Cette dernière est beaucoup plus complexe à traiter en moments et l'ensemble des développements n'est malheureusement pas terminé à cet instant.

CHAPITRE 5

Modèle de climat global : application à Titan

Sommaire

5.1	Historique du GCM-Titan de l'IPSL	107
5.2	Études en lien avec le TGCM-2D	110
5.2.1	Étude de la couche détachée	110
5.2.2	Test de sensibilité de la couche nuageuse	122
5.3	TGCM-3D : mise à niveau du modèle	125
5.3.1	Modèle microphysique et simplifications du modèle 3D	125
5.3.2	Premiers résultats du TGCM-3D	127

Avec l'arrivée de la sonde Cassini dans le système Saturnien en 2005, la dernière décennie a été marquée dans la communauté par le développement de nombreux modèles de climat global (GCM) de Titan. Ces modèles, souvent hérités de leurs « parents » terrestres, ne possèdent pas systématiquement les mêmes schémas numériques et traitent parfois les processus de manière différente mais ont tous un point commun : comprendre la machine climatique des planètes et permettre d'interpréter au mieux les observations par le biais des équations physiques.

5.1 Historique du GCM-Titan de l'IPSL

Le premier modèle de climat global de l'IPSL dédié à Titan (TGCM), a été développé il y a plus d'une quinzaine d'années maintenant au Laboratoire de Météorologie Dynamique (LMD) par [Hourdin et al. \(1995\)](#). Cette version tri-dimensionnelle héritait des modèles analogues terrestres développés de plus longue date au LMD. A l'époque, le modèle couvrait la troposphère et la stratosphère, du sol jusqu'à 250 km et ne disposait d'aucun couplage microphysique et chimique.

Ce modèle a permis d'avoir une vue d'ensemble du système atmosphérique de Titan. Il produisait des jets stratosphériques avec des vitesses de vent de plus de 100 m/s. Ce travail a permis de montrer que la formation de la super-rotation atmosphérique de Titan était bien similaire au mécanisme proposé par [Gierasch \(1975\)](#).

Cependant dans ce modèle, les contrastes de température n'étaient pas assez marqués et le jet stratosphérique plus faible que les observations de l'époque (Hubbard et al., 1993). Ces défauts étaient principalement dus au profil de brume uniforme en latitude utilisé à l'époque.

A la même époque des outils plus spécifiques à la physique de l'atmosphère du satellite avaient été mis au point en parallèle :

- Un modèle microphysique des aérosols développé Cabane et al. (1993). Ce modèle 1D utilisant une description eulérienne, simule l'ensemble des lois de la microphysique dans les conditions de Titan en tenant compte de la nature fractale des aérosols. Comme nous l'avons maintes fois suggéré dans les chapitres 2 et 3.
- Un modèle photochimique produit par Lebonnois et al. (2001). Ce modèle permet de décrire (en partie) les multiples interactions entre les espèces chimiques créées par la photo-dissociation de l'azote et du méthane à haute altitude puis la recombinaison de produits intermédiaires dans l'atmosphère du satellite.

La suite logique des événements voulait que l'ensemble de ces modèles soient couplés afin d'avoir une vue complète des interactions entre la dynamique de l'atmosphère et ses constituants. La « lourdeur » d'un tel modèle n'aurait pas permis à l'époque de traiter l'ensemble des couplages en trois dimensions. Une version axi-symétrique du GCM a donc été développée. Dans cette version du modèle en deux dimensions, les variations longitudinales n'étaient pas prises en compte et cette dimension n'était définie que par une seule maille. Les processus non axi-symétriques (principalement la dissipation liée aux ondes barotropes) ont alors été paramétrisés afin d'obtenir un modèle 2D représentatif de l'atmosphère (Luz and Hourdin, 2003; Luz et al., 2003).

Finalement, un modèle couplé opérationnel a vu le jour au début des années 2000. Ce modèle a d'abord donné lieu à deux études complètes sur les couplages brume/dynamique (Rannou et al., 2002, 2004) d'une part et chimie/dynamique (Lebonnois et al., 2003) d'autre part.

Le modèle couplé de brume a permis de déterminer l'origine de la couche détachée et des structures à grande échelle de la brume comme le contraste inter-hémisphérique ou encore la capuche polaire (voir figure 5.1). Ces structures s'expliquent par la circulation stratosphérique. Le modèle a par la même occasion permis de mettre en évidence la forte rétroaction entre la brume et la dynamique par le biais du transfert radiatif. La circulation stratosphérique est composée d'une large cellule allant de l'hémisphère d'été à celui d'hiver qui crée une accumulation de brume au niveau de ce pôle (la capuche polaire). Les aérosols sont de puissants radiateurs qui réémettent en infra-rouge et refroidissent ces couches, situées dans la nuit polaire. Cet effet augmente les contrastes de température et renforce la circulation (Rannou et al., 2004) qui, en retour, renforce les contrastes de la couche de brume.

L'étude menée par Lebonnois et al. (2003) sur le couplage des espèces chimiques et de la dynamique, montre que la circulation stratosphérique est aussi responsable de la distribution à grande échelle des espèces chimiques (voir fig 5.2). La distribution en latitude des gaz est donc similaire à celle de la brume et conduit, dans une moindre mesure, au même type de rétroaction.

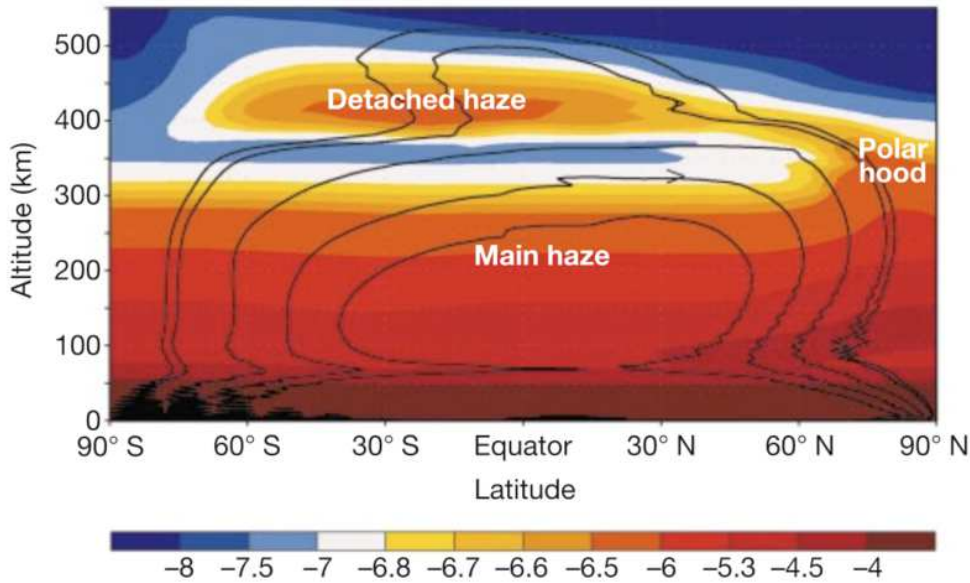


FIGURE 5.1 – Variations méridiennes de la brume du sol jusqu’à la couche détachée dans le TGCM-2D (Rannou et al., 2002). La circulation est représentée les contours en noir.

La détection des nuages à la fin des années 1990 (Griffith et al., 1998) puis leur observations (Roe et al., 2002) ont motivé la mise en place d’un modèle de microphysique des nuages (Rannou et al., 2006). A nouveau, des résultats très intéressants ont pu être mis en avant grâce à de nouvelles simulations. Le modèle a permis d’éclaircir le lien entre les nuages aux moyennes latitudes de l’hémisphère d’été et la dynamique. En été, la branche ascendante de la circulation située à ces latitudes ($\sim 40^\circ\text{S}$ sur la figure 5.3) transporte le méthane gazeux en altitude où il condense pour former les nuages maintes fois observés (Roe et al., 2005; Griffith et al., 2005; Rodriguez et al., 2009). Le modèle explique aussi la formation des nuages polaires, principalement composés d’éthane, par le refroidissement des masses d’air lors de leur descente depuis la stratosphère. Au passage du piège froid de la tropopause, l’éthane condense et forme les nuages observés entre autre par Griffith et al. (2006) ou encore Le Mouélic et al. (2012).

Après les succès obtenus par le modèle, les nouvelles observations de Titan par Cassini révèle la nécessité d’aller plus loin. La topographie, la distribution en longitude des nuages, observées par Cassini ou encore les ondes sont autant de structures tri-dimensionnelles que le modèle 2D ne peut pas prendre en compte ou prédire. Depuis 2007, le projet ANR *Exoclimats* (officiellement terminé en 2011), porté par Sébastien Lebonnois, a eu pour but de remettre le modèle à niveau. Le modèle fait ainsi peau neuve, avec entre autres, un nouveau cœur dynamique en 3D (LMDZ-4, Hourdin et al. 2006), une mise à jour du schéma de couche limite, la possibilité d’inclure un cycle diurne, la prise en compte des ondes gravitationnelles (Lebonnois et al., 2012). Une première étude sur la couche limite a d’ailleurs déjà été publiée à l’aide des résultats de ce nouveau modèle (Charnay and Lebonnois, 2012), dans laquelle les auteurs parviennent à la conclusion que la basse troposphère de Titan est composée de deux couches limites contrôlant la structure des vents ainsi que la formation de nuages à basse altitude.

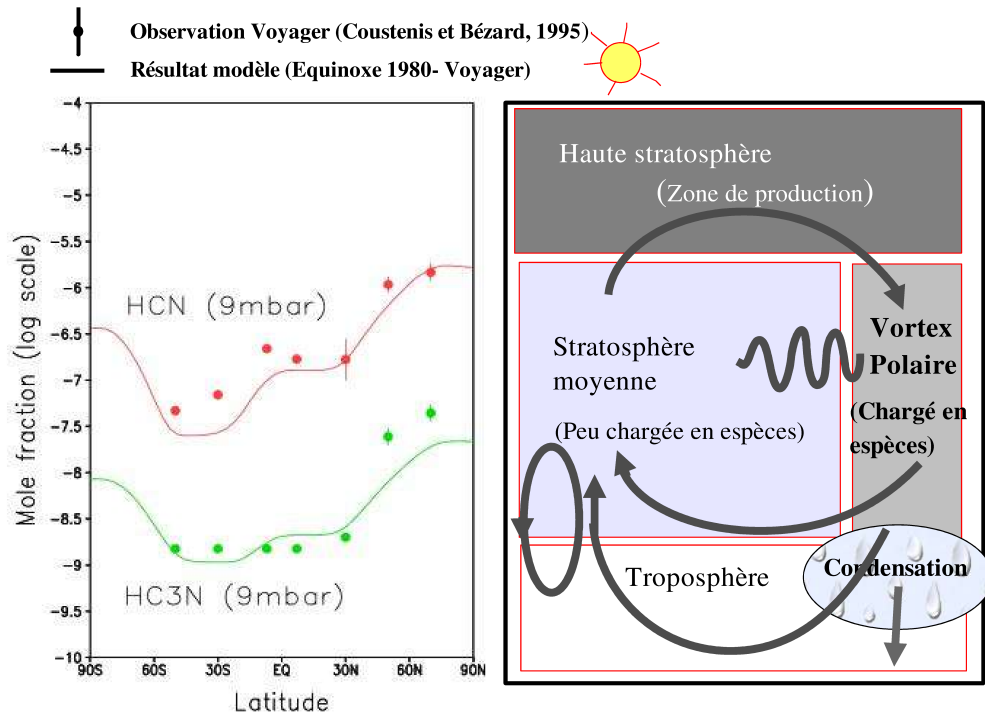


FIGURE 5.2 – A gauche : Distribution méridienne des molécules HCN et HC_3N déduites des observations faites par Voyager (Coustenis and Bezard, 1995) et reproduite par le TGCM-2D Lebonnois et al. (2003). A droite : Schéma de principe du transport des espèces dans le modèle.

5.2 Études en lien avec le TGCM-2D

En parallèle au développement de la « méthode des moments » et de la mise en place du modèle microphysique pour le TGCM-3D, l'occasion m'a été donnée de prendre en main la version 2D du modèle et de l'utiliser dans le cadre d'études et de tests.

Durant cette période de thèse, deux travaux intégrant l'utilisation du TGCM ont été menés. Le premier de ces deux travaux concerne la caractérisation de la couche détachée et a donné lieu à une publication (Cours et al., 2011). Cette étude sera présentée dans la section suivante. Le second travail que nous avons mené consistait en une série de tests sur les paramètres susceptibles d'affecter la microphysique des nuages et donc la distribution des nuages. Ces tests seront présentés dans la section 5.2.2.

5.2.1 Étude de la couche détachée

Les études sur la couche détachée ont débutées dès le début des années 80, peu de temps après le passage éclair des sondes Pioneer puis Voyager à proximité de Titan. Rages and Pollack (1983) ont été les premiers à estimer la taille effective des aérosols caractérisant la couche détachée. Pour cela, ils ont utilisé deux images de Titan prises par Voyager 2 dans le même filtre et à deux angles de phase différents ($\phi = 155^\circ$ et $\phi = 140^\circ$). A grand angle de phase, la fonction de phase des aérosols

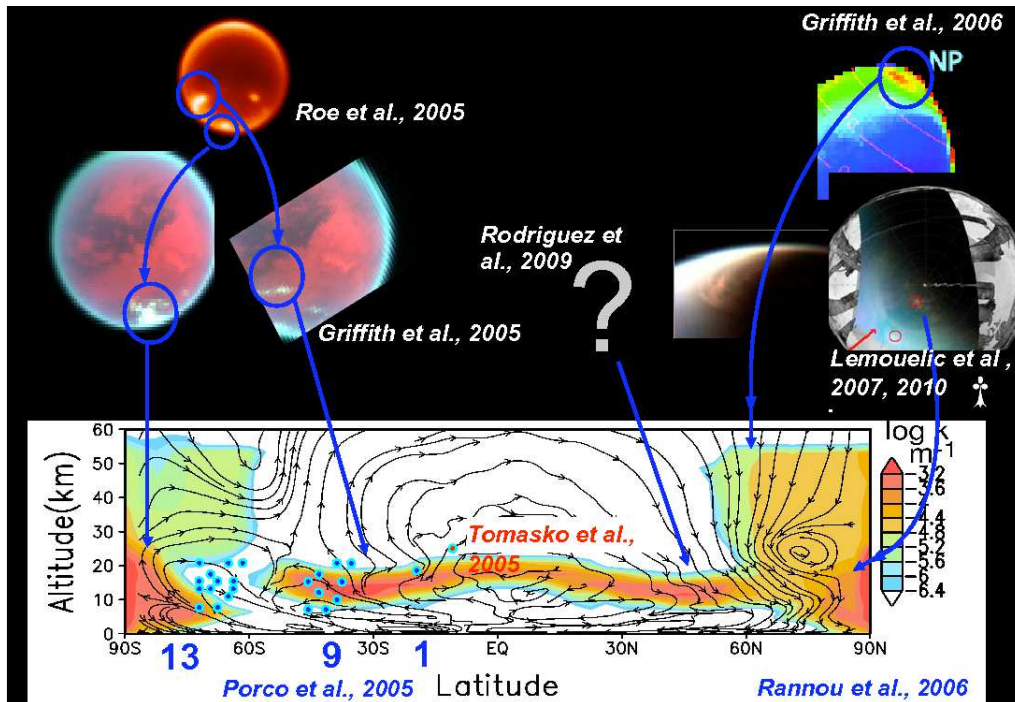


FIGURE 5.3 – Distribution méridienne de l'extinction des nuages et correspondance avec une collection d'observations.

présente une forte dépendance au paramètre de taille ($2\pi r/\lambda$). Les images étant prises dans le même filtre, les auteurs ont donc tenté de reproduire le rapport des intensités maximum obtenues à ces deux angles de phase afin de contraindre la taille des aérosols. Il ressort de leur étude que des particules avec une taille effective de $0.3\mu m$ permet de reproduire au mieux les données photométrique de Voyager.

Par la suite, West (1991) et West and Smith (1991) ont montré qu'une forme irrégulière, comme celle d'agrégat de sphères, était nécessaire pour expliquer les résultats obtenus par l'analyse de la photométrie (Rages et al., 1983; Rages and Pollack, 1983) et des observations polarimétriques dans la couche principale (Tomasko and Smith, 1982). Des agrégats de sphères composés de monomères de $0.066\mu m$ présentaient alors les meilleurs candidats à la résolution du problème.

Peu de temps après, Cabane et al. (1992, 1993) ont montré, sur la base des lois microphysiques, que la formation d'un tel type de particule était cohérent sur dans la couche principale. Cependant des tailles aussi importantes que quelques microns à l'altitude de la couche détachée ne sont pas compatibles avec les lois microphysiques. Les particules ne restent pas suffisamment longtemps dans ces couches pour atteindre des tailles supérieures à celle du monomère.

Plus tard, l'ajout du modèle de microphysique de brume (Cabane et al., 1993) dans le TGCM-2D à permis de proposer une interprétation cohérente à la présence d'aérosols aussi larges dans la couche détachée. Rannou et al. (2002) ont ainsi montré que la circulation était à même de transporter des aérosols taille micrométriques jusque dans la couche détachée (~ 400 km dans le modèle).

Avec l'arrivée de Cassini, de nombreuses images de Titan ont été prises par les instruments à bord de la sonde sous différentes géométries. La caméra ISS (Imaging

Science Subsystem) a notamment pris de nombreux clichés du satellite à grand angle de phase où apparaît très clairement la couche détachée.

Cours et al. (2011) a mené une étude caractéristique de la couche détachée à l'aide de ses images à laquelle j'ai participé. L'idée de départ était d'une part de contraindre la loi de distribution des aérosols à l'aide des observations en s'appuyant sur les résultats du TGCM-2D et d'autre part de présenter les caractéristiques optiques ainsi qu'un bilan thermique de la couche détachée.

5.2.1.1 Caractérisation des aérosols en taille

Dans un premier temps, une analyse des intensités observées a été effectuée. Cette analyse repose sur le même principe que les travaux de Rages and Pollack (1983). Nous sélectionnons des images obtenues dans deux filtres différents (BL1, $\lambda = 460 \text{ nm}$ et UV3, $\lambda = 338 \text{ nm}$) et pour lesquelles la couche détachée apparaît clairement. Après traitement des images, nous obtenons les rapports I/F (où I est l'intensité et πF et le flux solaire incident) observés à différents angles de phase (voir figure 5.4). Les images prises lors du changement d'altitude de la couche détachée (West et al., 2011) sont écartées des traitements.

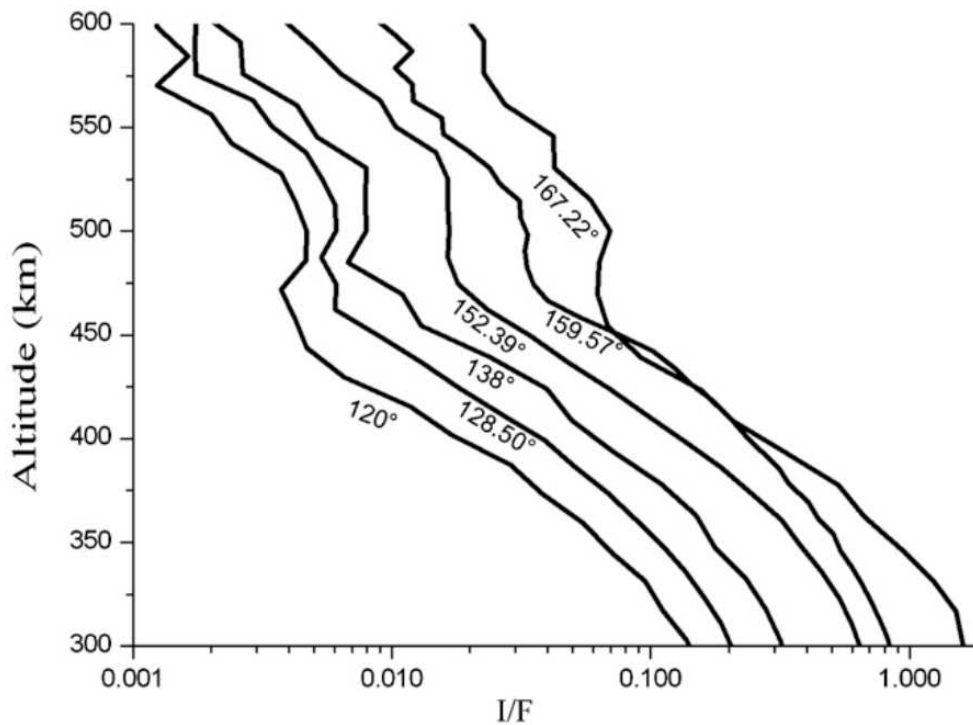


FIGURE 5.4 – Exemples de profils verticaux du rapport I/F (filtre bleu) observés entre 300 et 600 km pour différents (grands) angles de phase (Cours et al., 2011). La couche détachée se démarque dans les profils par le rebond situé entre 500 et 530 km.

La seconde étape consiste à calculer un rapport I/F en fonction des caractéristiques des aérosols. Pour cela nous calculons d'abord la diffusion simple au limbe à l'aide d'un modèle de ray tracing. Les calculs de transfert radiatif sont effectués avec le modèle SHDOMPP (Evans, 1998) qui permet d'accéder au champ d'intensité

dans l'atmosphère et d'évaluer la contribution de la diffusion multiple. Par la suite, l'ajustement se fait en déterminant le minimum du χ^2 entre les rapports I/F calculé et observé (figure 5.5). Le détail du calcul est donné dans Cours et al. (2011).

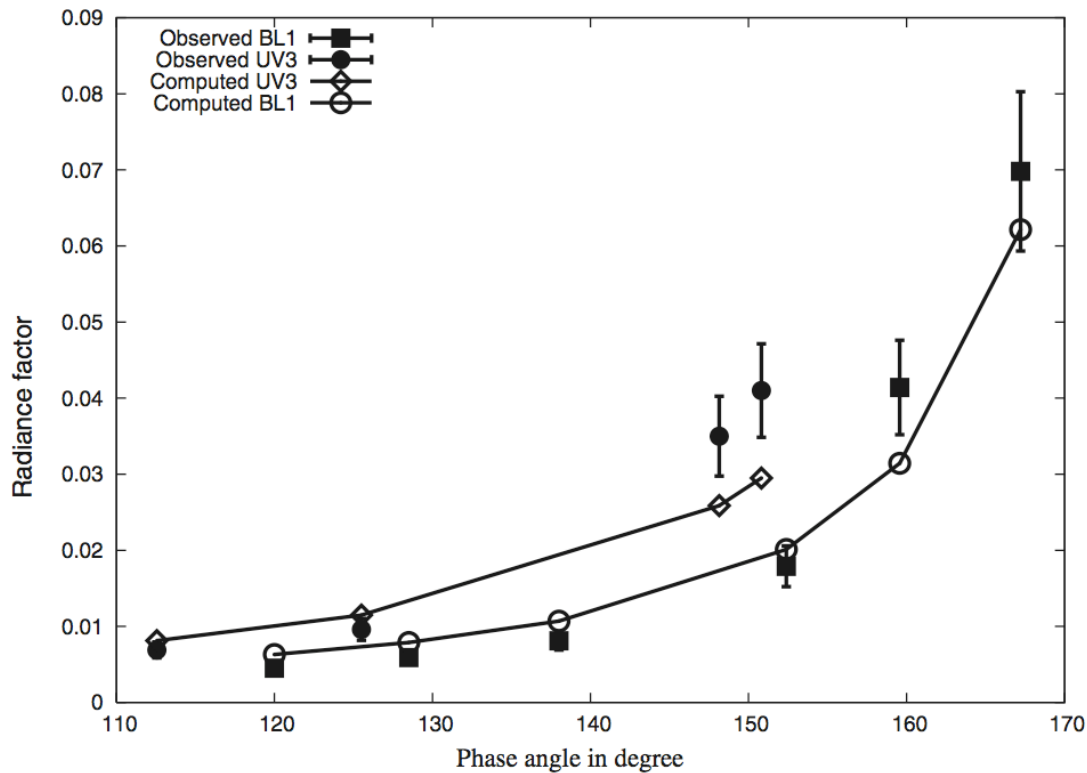


FIGURE 5.5 – Rapports I/F observés et calculés à l'altitude correspondant au maximum de I/F (observé) dans la couche détachée en fonction de l'angle de phase (Cours et al., 2011). Le rapport I/F calculé correspond à l'ajustement des observations avec l'utilisation d'une loi de distribution en taille des aérosols (voir texte).

Dans le cas où l'on ne considère qu'une seule taille d'aérosol fractal ($D_f = 2$) composé de N_m monomères de rayon $r_m = 50 \text{ nm}$, on s'aperçoit que toutes les particules de plus de 20 monomères ($r_{\text{eff}}^1 = 0.22 \mu\text{m}$) sont dans les barres d'erreurs associées aux calculs.

Comme nous l'avons précisé plus haut, on s'attend à ce que la population soit distribuée en taille dans la couche détachée. Des tests ont donc été effectués en remplaçant la particule effective par une loi de distribution en taille. Cette loi est définie par l'équation 5.1 et possède les mêmes propriétés que celle définie dans le chapitre 2.

$$n(r) = \frac{2 \times n_m}{\left(\frac{r}{r_m}\right)^{-a} + \left(\frac{r}{r_m}\right)^{-b}} \quad (5.1)$$

Où $r_m = 50 \text{ nm}$ correspond au rayon du monomère tel que déduit par Tomasko et al. (2009) tandis que a , b et n_m sont les paramètres libres du modèle que l'on cherche à ajuster.

1. Le rayon effectif, r_{eff} , correspond au rayon apparent de l'agrégat, r_a , défini dans la section 3.3.1. Pour rappel : $r_a = N_m^{1/D_f} r_m$

L'équation 5.1 permet de virtuellement séparer la population d'aérosols en deux catégories : des aérosols sphériques si $r < r_m$ et des agrégats fractals dans le cas contraire. L'ensemble des calculs effectués dans le modèle avec cette loi de distribution repose sur ce point.

Les résultats pertinents de cette partie de l'étude sont synthétisés dans la table 5.1. Les observations ISS permet de contraindre la pente b liée aux aérosols fractals mais ces observations contraignent très peu la « partie » des aérosols sphériques (pente a). Ce problème est directement lié à la diffusion des aérosols. Ces derniers ne diffusent presque pas aux petites tailles. Nous en discuterons dans la seconde partie de cette étude (p. 118).

Pour remédier à ce problème, nous avons ajouté une seconde contrainte dans le test du χ^2 portant sur les opacités aux courtes longueurs d'onde ($\lambda = 187 \text{ nm}$) obtenues par occultations stellaires UVIS (Liang et al., 2007). On obtient alors une valeur $a = -4.30_{-0.6}^{+0.6}$. L'apport des données aux courtes longueurs d'ondes permet d'apporter une contrainte forte sur la distribution en taille des petites particules sphériques composant la couche détachée. En effet, les petites particules sont essentiellement absorbantes. La distribution du GCM dans la couche détachée est cohérente avec les valeurs obtenues. Ces résultats montrent clairement la coexistence de petites particules sphériques avec des agrégats fractals de plus larges tailles.

Paramètres	ISS	ISS+UVIS
a	$-1.90_{-3.20}^{+0.80}$	$-4.30_{-0.60}^{+0.60}$
b	$-4.70_{-0.80}^{+0.80}$	$-4.70_{-0.80}^{+0.80}$
$n_m(m^{-4})$	$6.60_{-1.5}^{+34.5} \times 10^{13}$	$9.40_{-2.5}^{+1.1} \times 10^{13}$
χ^2	2.533×10^{-3}	2.924×10^{-3}

TABLE 5.1 – Paramètres de la loi de distribution des aérosols dans la couche détachée contraints par les données ISS et UVIS. Les valeurs du χ^2 données ici correspondent à l'ajustement avec les données ISS seules.

Si la coexistence des deux types de particules est confirmé par les observations, ces dernières ne permettent pas déterminer les mécanismes sous-jacents à l'établissement d'une telle population d'aérosols. Le temps nécessaire pour produire des aérosols aussi grand que des monomères de 50 nm est de 3×10^6 secondes (McKay et al., 1989; Rannou et al., 1993; Lavvas et al., 2009). Ce temps est comparable au temps caractéristique de sédimentation de ces aérosols (évaluée à partir de H/v_m où H est l'échelle de hauteur de l'atmosphère et v_m la vitesse de sédimentation des monomères). Sur la base des processus microphysiques seuls, le temps de croissance pour un aérosols de plusieurs dizaines de monomère dépasse 1×10^9 secondes (Rannou et al., 1993; Hutzell et al., 1996) et dépasse de loin leur temps caractéristique de sédimentation. Par conséquent, les processus microphysiques ne peuvent pas être responsables d'une telle distribution à ces altitudes.

5.2.1.2 Bilan thermique de la couche détachée

La seconde partie de l'étude que nous avons menée consistait à établir le bilan thermique de la couche détachée. Ce développement permet d'apporter de nouvelles informations sur cette couche et de présenter le rôle de la dynamique dans sa structure thermique.

Température d'équilibre radiatif

Dans un première partie, nous allons déterminer les flux radiatifs pour une couche optiquement mince ($\tau \ll 1$) en équilibre avec le reste de l'atmosphère (voir figure 5.6). Nous considérons que cette couche est uniquement composée d'aérosols et que les gaz n'interviennent pas dans le bilan radiatif. Nous verrons par la suite que ce modèle simple ne permet pas de calculer la température exacte d'équilibre radiatif mais ce n'est pas le but recherché ici.

Dans notre cadre d'étude, l'approximation en couche mince permet de formuler les flux radiatifs pour une épaisseur de couche dz entre z_1 et z_2 de la manière suivante :

$$F_s = \int_{\lambda} \phi_s(\lambda) d\tau(\lambda) d\lambda \quad (5.2)$$

$$F_h^{IR} = \int_{\lambda} \pi B(\lambda, T_{eff}) d\tau(\lambda) d\lambda \quad (5.3)$$

$$F_c^{IR} = \int_{\lambda} \pi B(\lambda, T) d\tau(\lambda) d\lambda \quad (5.4)$$

$$F_{net} = F_s + F_h^{IR} - 2 \times F_c^{IR} \quad (5.5)$$

$$\text{Avec } d\tau(\lambda) = \int_{z_1}^{z_2} \int_r \sigma_{abs}(\lambda, r) \times n(r) dr dz = \int_{z_1}^{z_2} k(\lambda, z) dz \quad (5.6)$$

$B(\lambda, T)$ est la fonction de Planck à la longueur d'onde λ et à la température T . L'équation 5.5 représente le flux net de la couche correspondant à la somme des flux entrants (éq. 5.2 et éq. 5.3), notés positivement et des flux sortants (éq. 5.4) notés négativement. La dérivée du flux net par rapport à l'altitude est reliée au taux de chauffage radiatif par la relation suivante :

$$\frac{dF_{net}}{dz} = \frac{1}{\rho c_p} \left. \frac{dT}{dt} \right|_{rad} \quad (5.7)$$

Où c_p est la capacité thermique massique ($c_p = 1050 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ pour Titan).

En réalité, les gaz à ces altitudes peuvent avoir une absorption non négligeable et participent au chauffage de la couche détachée. Dans la gamme $[150 \text{ K} ; 200 \text{ K}]$ (rayonnement de la couche), la contribution se situe entre $\sim 2\%$ et $\sim 10\%$ (avec HCN). A ces altitudes De plus, à ces altitudes, on commence à sortir du domaine d'application de l'approximation LTE. Néanmoins, nous le rappelons, le but recherché ici n'est pas d'obtenir exactement la température d'équilibre de la couche

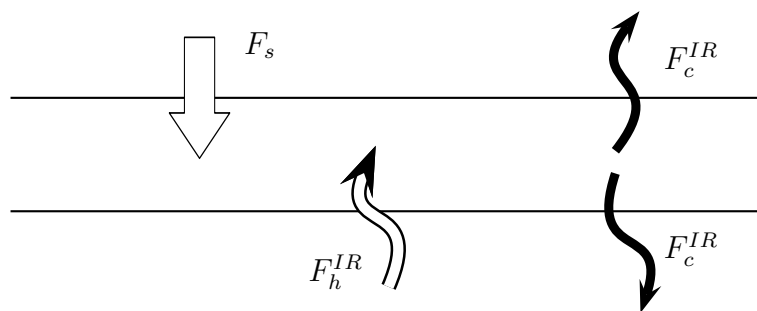


FIGURE 5.6 – Modèle à deux couches représentant la couche détachée. Les flèches représentent les différents flux dans la couche. F_s représente le flux solaire, F_c^{IR} le flux dû à l'émission IR des aérosols et F_h^{IR} le flux venant de la couche de dessous (supposée être à la température effective de Titan, $T_{eff} = 86K$).

détachée mais d'étudier l'impact des caractéristiques des aérosols (telle que déduites par Cours et al. 2011) sur cette température.

Afin de calculer les opacités, nous utilisons les constantes optiques calculées par Rannou et al. (2010) et nous utilisons deux coefficients multiplicatifs ($FHIR$ et $FHVI$) nous permettant de faire varier les constantes optiques². L'indice imaginaire de réfraction a deux effets selon la gamme de longueur d'onde. Dans le visible, il contrôle l'absorption des aérosols et donc réchauffe la couche. Dans l'infra-rouge, l'indice de réfraction joue sur le rôle de radiateur des aérosols : plus l'indice est grand, plus les particules réémettent de rayonnement ce qui refroidit la couche (fig. 5.7). L'opacité totale des aérosols dépend fortement de l'indice optique imaginaire. A l'époque, ce paramètre était assez mal contraint dans le domaine infra-rouge³. On peut donc observer une large gamme de température d'équilibre pour la couche selon les valeurs choisies des deux coefficients $FHIR$ et $FHVI$. La figure 5.7 présente ces variations autour de la valeur nominale $FHIR = FHVI = 1$. Pour cette valeur des deux coefficients, la température d'équilibre est de 156K soit environ 20K de moins que la température obtenue par HASI. Même en négligeant l'effet des gaz, on voit déjà ici que sans contraintes solides sur les indices optiques des aérosols, la température d'équilibre ne peut pas être obtenue de manière rigoureuse. Ce point s'étend au delà du calcul à l'équilibre, et la figure 5.7 montre qu'il est indispensable de contraindre les indices optiques afin de représenter au mieux l'état thermique de la couche détachée.

Rôle de la distribution dans le chauffage radiatif

En injectant l'équation 5.6 dans les équations 5.2 et 5.4 on peut facilement calculer les contributions à l'absorption et à l'émission de chaque taille de particule

2. Les coefficients $FHIR$ et $FHVI$ ne sont pas variables en longueur d'onde et s'appliquent pour tout leurs domaines respectifs

3. L'étude a été effectuée fin 2010, mais depuis Vinatier et al. (2012) ont déterminé les constantes optiques des aérosols dans l'infra-rouge entre 6.7 et 143 μm à partir des observations CIRS.

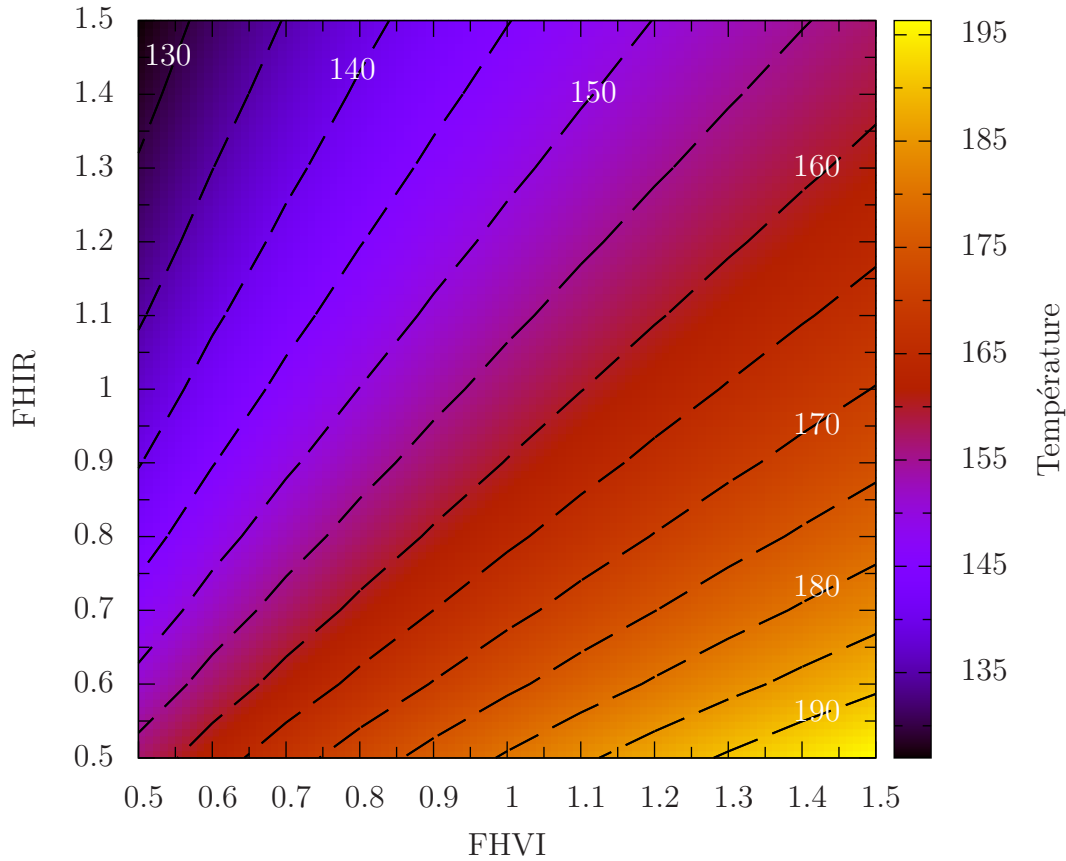


FIGURE 5.7 – Impact des coefficients FH utilisés pour la correction de la partie imaginaire de l'indice de réfraction sur la température d'équilibre radiatif. $FHVI$ (resp. $FHIR$) correspond au coefficient utilisé aux courtes (resp. longues) longueurs d'ondes. La température est calculée à partir de l'équation 5.7. Les contours sont tracés tous les 5 degrés Kelvin.

pour une distribution donnée. L'équation 5.8 permet quant à elle de calculer les contributions à la diffusion des aérosols pour un angle de phase donné.

$$F_{sca} = \int_{\lambda} \phi_s(\lambda) \int_{z_1}^{z_2} \int_r \sigma_{sca}(\lambda, r) \times n(r) \times P(\varphi, \lambda, r) dr dz d\lambda \quad (5.8)$$

La figure 5.8 présente ces contributions pour la loi de distribution décrite par l'équation 5.1. Pour le calcul, nous avons utilisé les valeurs nominales de $FHVI$ et $FHIR$ (=1), ainsi que les valeurs nominales de la table 5.1 pour a , b , et n_m .

La somme de chaque contribution donne l'absorption totale (idem pour la diffusion et l'émission). A grand angle de phase, la diffusion est dominée par les grands aérosols ce qui indique que les mesures par diffusion de la lumière (ce que sonde ISS) n'est pas sensible aux petits aérosols et sonde essentiellement les particules dans l'intervalle 0.05 à 0.15 μm . L'intégration des données UVIS dans l'étude de Cours et al. (2011) permet en revanche d'étudier le rôle d'absorption de la couche du aux petits aérosols. Les contributions à l'absorption et à l'émission permettent de comprendre

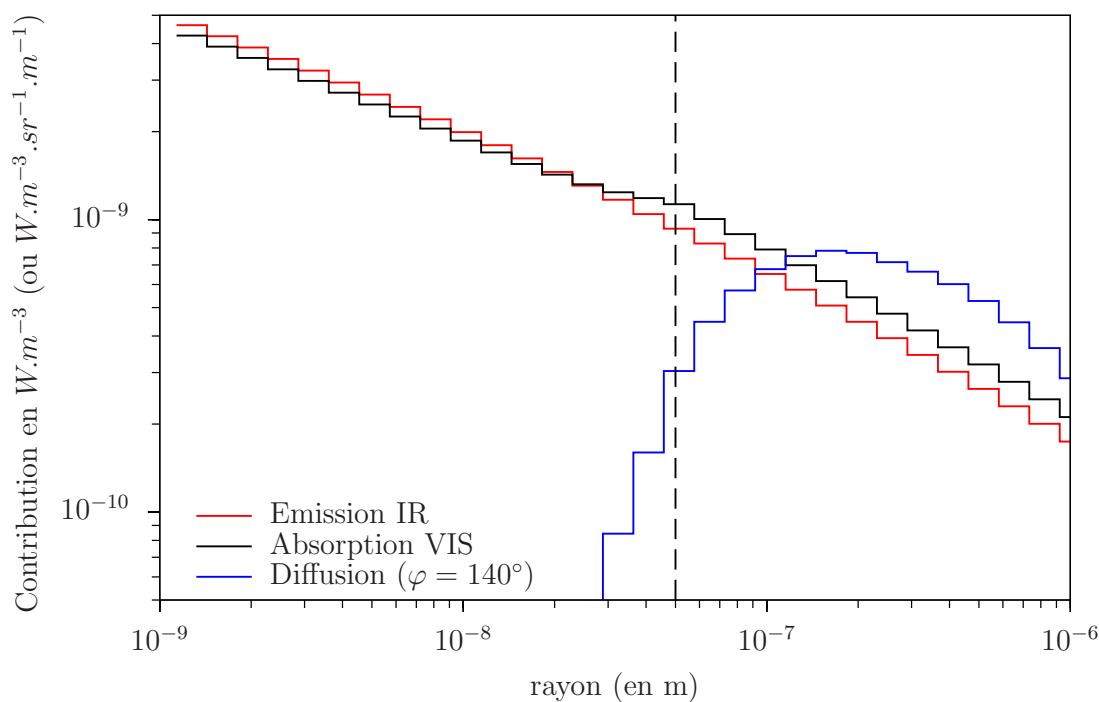


FIGURE 5.8 – Contribution des tailles d’aérosols à la diffusion (en bleu), à l’absorption dans la domaine visible (en noir) et à l’émission infrarouge (en rouge) à l’équilibre radiatif. Les contributions à la diffusion sont calculées pour $\varphi = 140^\circ$ et $\lambda = 460 \text{ nm}$. La ligne séparatrice à $r = 0.05 \mu\text{m}$ délimite le type de particule (à gauche agrégats fractals).

le rôle de chaque taille de aérosols dans le bilan radiatif. A l’équilibre radiatif, le flux d’émission infra-rouge compense exactement le flux d’absorption visible. Néanmoins si l’on étudie de plus près les contributions, on s’aperçoit que les petites particules émettent plus qu’elles n’absorbent. L’effet s’inverse pour les grosses particules. On en déduit que les petites particules ont tendance à refroidir de la couche. Cet effet n’est pas spécifiquement du aux particules fractales. En effet, si la distribution était composée uniquement de particules sphériques le résultat serait le même.

La forme de la loi de distribution peut donc jouer sur la température obtenue pour une couche optiquement mince et donc par extension dans la couche détachée. Cet effet est présenté dans la figure 5.9 pour laquelle nous traçons la température d’équilibre définie par l’équation 5.7 en fonction des pentes a et b de l’équation 5.1. Les intervalles de a et b sont choisis pour refléter les barres d’erreurs obtenues par Cours et al. (2011) (voir table 5.1). Nous ne modifions pas la valeur de n_m puisque la résolution de l’équation 5.7 à l’équilibre (ie : $dT/dt = 0$) implique que le nombre de particule ne joue aucun rôle dans la valeur de température obtenue. Dans la figure 5.9, la diminution du nombre de petits aérosols ($a \searrow$) entraîne une augmentation de la température de quelque Kelvin (au maximum $\Delta T = 4\text{K}$). Le même effet est observé pour la pente b mais avec un effet moindre ($\Delta T_{max} \sim 2\text{K}$).

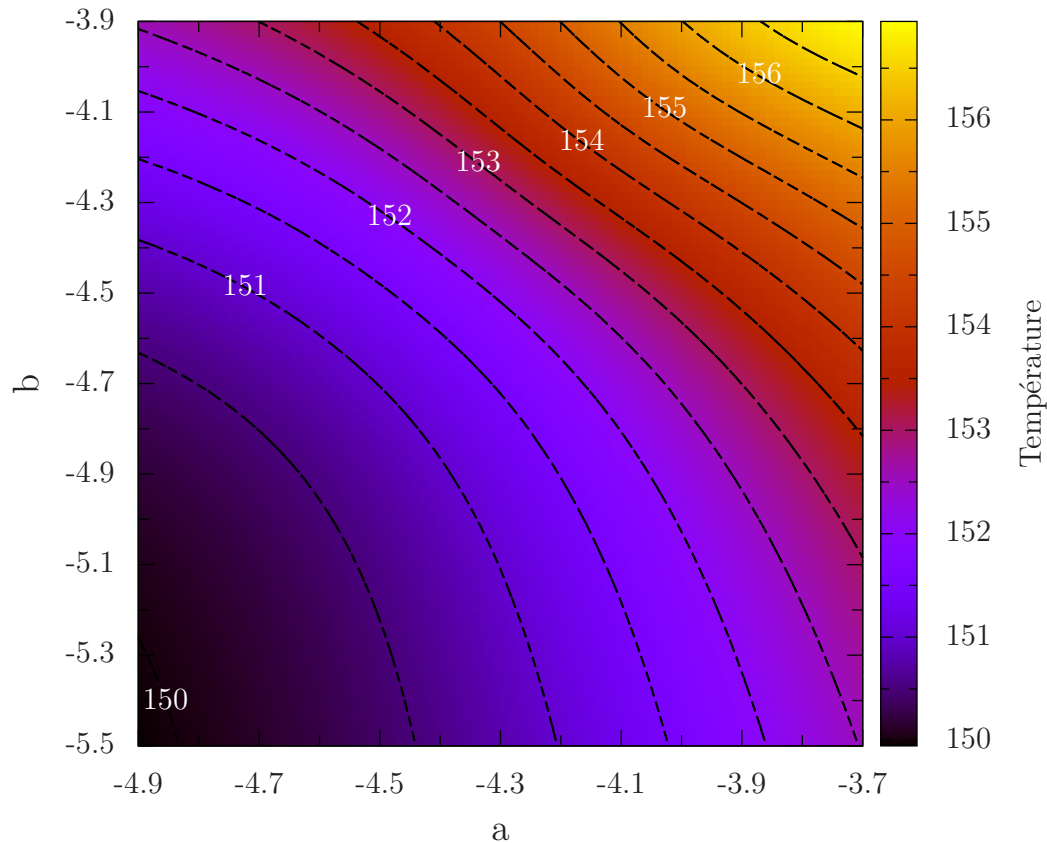


FIGURE 5.9 – Variations de la température d'équilibre (éq. 5.7) en fonction des valeurs des puissances a et b de la loi de distribution en taille des aérosols. Les contours sont tracés tous les 0.5K.

Couplage radiatif-dynamique

Nous avons vu dans les paragraphes précédents qu'il n'était pas possible de définir de manière simple (modèle à deux couches ne tenant compte que des aérosols) si la couche détachée est à l'équilibre radiatif. Un travail complémentaire peut être effectué en calculant le bilan d'énergie de cette couche. Le mécanisme de production de la couche détachée est étroitement lié à la circulation de grande échelle (Rannou et al., 2002, 2004). Par le biais de cette circulation, les masses d'air peuvent se déplacer et transporter de la chaleur. Dans cette section, nous allons calculer le bilan d'énergie total en appliquant les principes de thermodynamique à une masse d'air en mouvement. Nous ne détaillerons pas tous les calculs qui sont présentés explicitement dans Holton (1992).

Relations physiques mises en jeu

Dans ce paragraphe, nous rappelons d'une part les formules thermodynamiques qui vont être utilisées pour le calcul et d'autre part certains opérateurs (comme la notion de dérivée particulaire) nécessaires au calcul du bilan thermique de la couche.

- Formules thermodynamiques

$$dU = dQ + dW = C_v dT \quad (\text{premier principe de la thermodynamique}) \quad (5.9)$$

$$dS = \frac{dQ}{T} \quad (\text{second principe de la thermodynamique}) \quad (5.10)$$

$$PV = nRT \quad (\text{équation du gaz parfait}) \quad (5.11)$$

Dans l'équation 5.11, n est un nombre de moles et R est la constante des gaz en parfait en $\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$. Nous nous référerons aussi par la suite à $R^* = \frac{R}{\mathcal{M}}$ en $\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ (\mathcal{M} est la masse molaire de l'air) car il est parfois plus pratique de l'utiliser.

- Température potentielle

$$\theta = T \times \left(\frac{P_0}{P} \right)^\kappa \quad \text{avec : } \kappa = \frac{R^*}{c_p}$$

$$d \ln \theta = \frac{1}{T} dT - \frac{\kappa}{P} dP$$

- Notion de dérivée particulière

Afin de décrire les grandeurs liées à une masse d'air en mouvement, deux représentations sont possibles : les représentations *lagrangienne* et *eulérienne*. En représentation lagrangienne, nous pouvons suivre la parcelle d'air lors de son mouvement, tandis que la représentation eulérienne suit l'évolution des propriétés de l'air en un point fixe de l'atmosphère. Si la première approche est nettement plus intuitive que la seconde, elle est souvent plus difficile à mettre en place. La description eulérienne est donc préférable. Cependant, cette dernière description nécessite quelques précautions d'usage. En effet comme la description eulérienne donne les grandeurs d'un champ en un point fixe, les taux de variations d'une grandeur sont locaux. Il est nécessaire de pouvoir connaître la relation entre le taux de variation local (description eulérienne) et le taux de variation attaché à une parcelle (description lagrangienne) de la grandeur. Cette relation est donnée par l'opérateur appelé dérivée particulière s'écrivant de la manière suivante :

$$\frac{D}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{U} \cdot \vec{\nabla} \quad (5.12)$$

Où \vec{U} est la vitesse de la grandeur considérée.

Conservation de l'énergie

En réécrivant le premier principe de la thermodynamique (éq. 5.9) à l'aide de l'équation du gaz parfait, il est possible de trouver une relation entre θ et la chaleur ou l'entropie (éq. 5.13). Le taux de variation de l'entropie est directement lié au

taux de chauffage diabatique par le second principe de la thermodynamique (éq. 5.10) sous sa forme dérivée⁴.

$$\begin{aligned} dQ &= C_v dT + P dV \\ \frac{dQ}{T} &= C_p \left(\frac{dT}{T} - \kappa \frac{dP}{P} \right) \\ \frac{dQ}{T} &= dS = C_p d \ln \theta \end{aligned} \quad (5.13)$$

En dérivant l'entropie, on obtient alors la relation entre le taux de variation total de la température potentielle et le taux de chauffage radiatif :

$$\frac{DS}{Dt} = C_p \frac{D \ln \theta}{Dt} = \frac{1}{T} \frac{dQ}{dt} \quad (5.14)$$

En injectant l'équation 5.12 dans l'équation 5.14, on fait apparaître les termes d'advection du à la dynamique et le terme de chauffage radiatif. A l'équilibre, ces deux termes se compensent. On considérera dès lors que l'on est à l'équilibre radiatif si le terme de chauffage radiatif est nul (ou très proche de zéro) et que l'équilibre global est atteint ($\frac{DS}{Dt} \simeq 0$).

$$\frac{1}{\theta} \frac{d\theta}{dt} = \frac{1}{C_p T} \frac{dQ}{dt} - \frac{u}{\theta} \frac{d\theta}{dx} - \frac{v}{\theta} \frac{d\theta}{dy} - \frac{w}{\theta} \frac{d\theta}{dz} \quad (5.15)$$

$$\begin{aligned} \frac{w}{\theta} \frac{d\theta}{dz} &= \frac{w}{T} \left(\frac{dT}{dt} + \Gamma_d \right) \\ \frac{d\theta}{dt} &= \underbrace{\frac{1}{C_p T} \frac{dQ}{dt}}_{\text{terme radiatif}} - \underbrace{\left[u \frac{d\theta}{dx} - v \frac{d\theta}{dy} - w \frac{\theta}{T} \left(\frac{dT}{dt} + \Gamma_d \right) \right]}_{\text{termes d'advection}} \end{aligned} \quad (5.16)$$

Dans les termes d'advection $\Gamma_d = g/c_p$ est le gradient adiabatique sec⁵. Dans le TGCM-2D, le terme $u \frac{d\theta}{dx}$ n'existe pas et le bilan est calculé sur les composantes latitudinales et verticales. La figure 5.10 montre les taux de chauffage d'advection d'une part et le taux de chauffage radiatif d'autre part. Dans la région des moyennes latitudes (20N-40N) l'ordre de grandeur du taux de chauffage radiatif à 10^{-3} mbar est de 40K par jour Titan ($\sim 3.10^{-5} K.s^{-1}$), ce qui renforce l'idée que la couche détachée n'est pas à l'équilibre radiatif et montre bien que la circulation joue un rôle dans l'établissement de cette structure.

4. Ici, il faut comprendre que le taux de variation total de l'entropie $\frac{DS}{Dt}$ est égal au taux de chauffage diabatique (ici le taux de chauffage radiatif qui *ne dépend pas* de la masse d'air en mouvement) $\frac{dQ}{dt}$ divisé par la température de la couche.

5. Dans l'équation 5.16, il ne faut pas confondre C_p , la capacité thermique (en $J.K^{-1}$) et c_p , la capacité thermique massique (en $J.kg^{-1}.K^{-1}$)

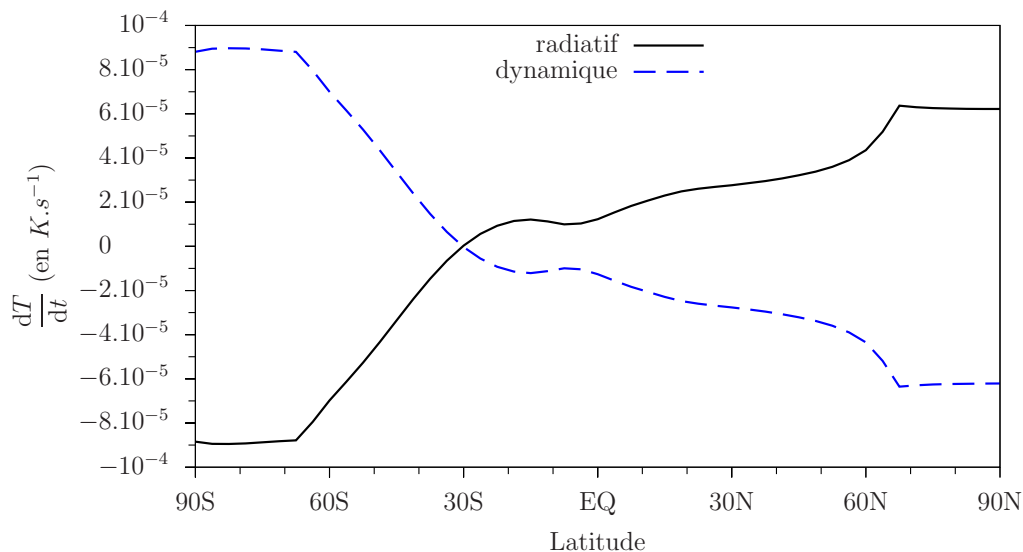


FIGURE 5.10 – Taux de chauffage radiatif en $K.s^{-1}$ à 10^{-3} mbar dans le TGCM-2D (en noir) et taux de chauffage dynamique (en bleu). Le taux de chauffage est gouverné par le chauffage solaire dans l’hémisphère d’été (hémisphère nord sur la figure) et par le refroidissement infrarouge dans l’hémisphère d’hiver.

5.2.2 Test de sensibilité de la couche nuageuse

Comme nous l’avons évoqué, le TGCM-2D de l’IPSL nous a permis d’interpréter la plus part des grandes structures observées dans l’atmosphère de Titan. Néanmoins, ces prédictions ne sont pas toujours en accord avec les observations (Sicardy et al., 2006; Crespin et al., 2008; Rodriguez et al., 2009). Le travail présenté ici s’est fait dans le cadre de comparaison avec la carte des nuages de Rodriguez et al. (2009).

Durant cette période de la thèse, nous avons cherché à améliorer les prédictions liées aux nuages en testant les paramètres libres du modèle susceptibles d’altérer la couche nuageuse. Le but de ces tests était principalement d’obtenir un meilleur accord avec les observations et mieux représenter le cycle du méthane. L’autre objectif était aussi de disposer d’un modèle rapide (contrairement au modèle 3D) pour réaliser des études sur le cycle du méthane à court (quelques dizaines d’années) et long terme (quelques milliers d’années!).

Dans le cas de la couche nuageuse, le modèle ne représente pas correctement la distribution méridienne des nuages (ni son évolution temporelle). Ceci est principalement dû au fait que le gradient de température équateur-pôle dans le modèle est trop important (Rodriguez et al., 2009). Dans la troposphère, le modèle tend à homogénéiser la fraction molaire du CH_4 . Le méthane gazeux arrive à saturation aux moyennes latitudes de chaque hémisphère et condense dans ces régions pour finalement y former des nuages quelque soit la saison (été ou hiver) (Rodriguez et al., 2009, 2011), avec cependant une modulation saisonnière qui privilégie l’hémisphère d’été.

De manière générale, on peut dégager 4 types d’explication liés au manque de représentativité du modèle :

- 🙄 Paramètres libres non optimaux.
- 🙄 Description incomplète de processus physique.
- 🙄 Processus physique manquant.
- 🙄 Limitations inhérentes au modèle (2D).

Parmi ces explications, la première sur la liste est de loin la plus rapide à tester. Nous avons ainsi effectué 4 simulations pour lesquelles trois paramètres du modèle ont été testé :

Fraction des lacs de méthane : Ce paramètre affecte directement la quantité disponible de méthane pouvant être injecté dans l’atmosphère et modifie donc la fraction molaire de CH_4 dans les basses couches du modèle. Concrètement dans le modèle, ce paramètre agit sur le flux d’évaporation de méthane à la surface.

Angle de contact : L’angle de contact $\cos(\theta)$ est le paramètre libre le plus important à considérer pour le processus de nucléation des aérosols et par extension pour la formation de nuages (voir chapitres 2 et 3). On s’attend donc à observer le maximum de différences avec la modification de ce paramètre.

Inertie thermique de la surface : L’inertie thermique contrôle la réponse de la surface aux changements de température et devrait donc affecter les interactions entre l’atmosphère et la surface.

La table 5.2 recense les valeurs des paramètres utilisés pour chacune des 4 simulations effectuées lors des tests ainsi que les valeurs utilisées par Rannou et al. (2006). Dans tous les modèles, à l’exception de celui de Rannou et al. (2006), les sources de méthane sont infinies et situées uniquement au pôle nord. De même l’humidité de surface pour les « runs » 1 à 4 est calculée explicitement, tandis qu’elle est fixée à 50% dans Rannou et al. (2006).

Paramètres	run 1	run 2	run 3	run 4	Rannou et al. (2006)
Fraction des lacs	0.1	0.1	0.1	0.4	1
$\cos \theta$	0.92	0.97	0.92	0.92	0.97
Inertie thermique	2000	2000	500	2000	2000

TABLE 5.2 – Variations des paramètres libres pour les tests de sensibilité sur la couche nuageuse du TGCM-2D.

Nous avons comparé par la suite les cartes nuageuses obtenues pour chacun des modèles ainsi que la carte publiée par Rannou et al. (2006) et qui sont présentées dans la figure 5.11. Les « runs » 1 et 4 étant très similaires, nous n’avons présenté que le run 1. Ceci est principalement dû au fait que dans ces modèles, au pôle, la troposphère est déjà saturée (ou très proche de la saturation) en méthane. L’échange de méthane à l’interface atmosphère/surface s’effectue dans les deux sens (évaporation/« précipitation ») et le flux d’évaporation est *in fine* limité par l’humidité relative. De fait, l’augmentation de la fraction des lacs n’induit pas de changement significatif dans la fraction molaire de méthane.

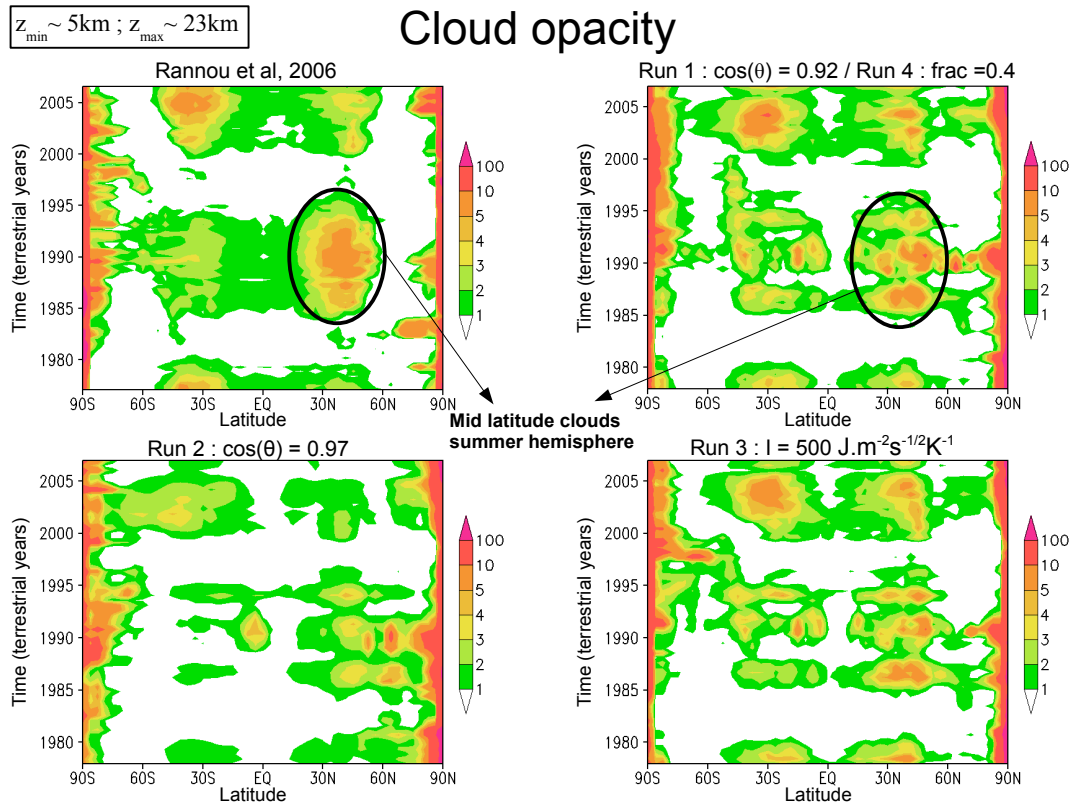


FIGURE 5.11 – Cartes de l’opacité nuageuse entre 5 et 23 km d’altitude pour chacun des modèles décrits dans la table 5.2.

Le modèle a subi plusieurs mises à jour depuis 2006 dont notamment l’ajout de l’acétylène dans la microphysique des nuages. La répartition des nuages en terme d’espèces (CH_4 , C_2H_6 et C_2H_2) n’est plus aussi nette que dans la version de [Rannou et al. \(2006\)](#) qui est un modèle « pré-Cassini ⁶ ». De plus la statistique et l’échantillonnage ont été modifiés depuis.

Quoiqu’il en soit, il apparaît clairement sur la figure 5.11 qu’aucun des paramètres que nous avons testé n’améliore l’asymétrie de la couche nuageuse. Certaines modifications aggravent même la situation comme c’est le cas dans les runs 1 et 3. Ces tests permettent de rayer de notre liste, l’optimisation des paramètres. Sur les trois autres types d’explications, seuls les deux premiers (mise à jour ou ajout de processus physiques) pourraient être envisagé pour améliorer la représentativité du modèle. Le développement actuel du modèle 3D rend ce type de développement complètement inutile car il permet de s’affranchir des limitations inhérentes à la modélisation en 2 dimensions (la dernière et pire cause possible que nous avons envisagé). Nous ne nous étendrons donc pas plus sur le sujet et présentons donc maintenant cette nouvelle version du GCM-Titan de l’IPSL.

6. A titre d’exemple, ce modèle ne tenait pas compte de la dissolution de N_2 dans la phase condensée du CH_4 ce qui diminue la saturation critique du méthane dans l’atmosphère.

5.3 TGCM-3D : mise à niveau du modèle

5.3.1 Modèle microphysique et simplifications du modèle 3D

Avec la migration du TGCM vers une version tri-dimensionnelle, la structure du code a été partiellement modifiée par rapport au modèle mis à ma disposition en début de thèse. Fort heureusement, les schémas numériques associés à la partie physique ont relativement peu changés et restent simples. De plus les processus physiques sont codés, dont notamment la microphysique, de manière à être indépendants les uns des autres et sont généralement appelés au sein d'une routine interface. Ce principe de fonctionnement a largement contribué à simplifier la migration du modèle microphysique du TGCM-2D vers sa nouvelle version 3D. De plus la version du TGCM-3D mise à ma disposition durant la thèse contenait une version (ancienne) du code microphysique. De fait, l'interface était déjà en partie intégrée dans le modèle. Le principal aspect de ce travail consistait d'une part à mettre en place et à gérer proprement les clefs d'activation de la microphysique, revoir la transmission des arguments et variables⁷ et enfin recoupler le modèle de nuages au transfert radiatif.

Malgré les puissances de calcul actuelles, le TGCM dans sa version 3D reste un modèle extrêmement lourd et par conséquent les temps d'exécution sont longs (voir table 5.3). En plus de l'augmentation associée à la nouvelle grille du modèle (et aux calculs dynamique en 3D), l'ajout de la microphysique des nuages augmente dramatiquement ces temps car le nombre de traceurs est multiplié par 5, soit 50 traceurs pour la microphysique seule. Si l'on « s'amuse » à coupler le modèle photochimique (complet), le nombre de traceurs s'approcherait plutôt de la centaine, ce qui n'est même pas envisageable.

La prise en compte des nuages dans le transfert radiatif augmente aussi de manière significative le temps de calcul de ce processus. Contrairement à la grille en rayons (fixe) des aérosols, les nuages sont caractérisés par une taille de goutte unique mais variable dans le temps. Il est donc nécessaire avant chaque appel du transfert radiatif de calculer les nouvelles propriétés optiques des gouttes. Deux simplifications ont donc été mise en place pour obtenir des temps de simulation « raisonnables⁸ ».

Tout d'abord, la microphysique est calculée en deux dimensions seulement (latitude/altitude) comme dans l'ancienne version du modèle. A chaque pas de temps, les champs nécessaires à la microphysique (traceurs, pression, température) sont calculés en moyenne zonale. L'ensemble de la microphysique est ensuite traitée selon le même schéma que la version 2D. En sortie du modèle microphysique, les tendances des champs sont reconverties en trois dimensions proportionnellement à leur valeur d'entrée (en 3D). Ce processus conserve la masse totale des traceurs et permet de garder la trace de la circulation sur la distribution spatiale de ces champs (l'advection des traceurs est effectuée en 3D).

La brume peut avoir des variations en longitude dues à l'activité nuageuse, la topologie ou encore les marées de Saturne, essentiellement dans la troposphère. Les

7. La mise à niveau du modèle était l'occasion de pouvoir mettre à jour aussi le code microphysique qui n'est pas très « accessible » pour les utilisateurs.

8. Le mot *raisonnable* a ici une connotation très subjective : 17 jours d'attente pour simuler une année de Titan reste bien évidemment trop long !

	Dynamique	Physique	Total
TGCM-2D	~ 100	~ 1000	~ 18 heures
TGCM-3D (simplifié)	~ 20000	~ 5000	~ 17 jours
TGCM-3D (complet)*	~ 20000	~ 20000	~ 1 mois

TABLE 5.3 – Estimations des temps d’exécution en minutes des deux grandes parties du TGCM dans ces deux versions. Ces valeurs correspondent à une simulation complète d’une année de Titan. La seconde ligne correspond au TGCM-3D dans sa version actuelle (voir texte). La dernière ligne correspond aux temps d’exécution du modèle avec la microphysique en 3D complète : ces temps sont estimés à partir de 5 semaines de simulations.

deux derniers points ne sont pas encore pris en compte dans le modèle et la microphysique des nuages est elle aussi traitée en moyenne zonale. Le modèle reste cohérent même si il n’est pas complètement tri-dimensionnel de ce point de vue. Gardons tout de même à l’esprit que le passage à la 3D permet de s’affranchir des paramétrisations effectuées dans la version axi-symétrique du modèle et que les traceurs sont bien transportés selon les trois dimensions. Si l’on ne peut pas encore reproduire la distribution en longitude des nuages, la distribution méridienne devrait être améliorée (ou tout du moins différente!).

Afin de réduire le temps d’exécution lié au transfert radiatif, le calcul des propriétés optiques des nuages a aussi été révisé. Dans la version 2D, ces propriétés étaient calculées à chaque appel du transfert radiatif (environ 1 appel tous les deux jours au maximum) en tenant compte du rayon moyen des gouttes. Dans le modèle 3D, cette fréquence peut être bien plus élevée, surtout si le cycle diurne est activé (au minimum 4 appels par jour) et il n’est pas envisageable d’évaluer les propriétés optiques des gouttes aussi souvent.

La nouvelle évaluation se fait alors en deux temps. Un calcul hors-ligne des propriétés optiques (Q_{abs} , Q_{sca} et Q_{ext}) d’une goutte composée de méthane pure est tabulé sur une large gamme du paramètre de taille ($X = 2\pi r_g/\lambda$). Lors des calculs en ligne dans le modèle, à chaque appel du transfert radiatif, les propriétés optiques des gouttes sont interpolées à partir de cette table : Pour chaque canal de longueur d’onde λ dans le modèle, et pour un rayon de goutte r_g , on calcule le paramètre de taille X , puis on récupère dans la table la valeur des propriétés optiques correspondantes (voir figure 5.12). Afin d’obtenir les sections efficaces, il suffit de multiplier les valeurs de Q_{abs} , Q_{sca} et Q_{ext} obtenues par la section géométrique (πr_g^2).

Actuellement, ce schéma ne considère qu’une seule taille de particule et les oscillations de Mie apparaissent sur la figure 5.12). Nous avons négligé cet aspect lors de l’établissement de cette simplification mais il est probable qu’il induit un biais dans le calcul de l’opacité des nuages. Afin de minimiser ces oscillations, une mise à jour devra donc être effectuée au plus vite pour tenir compte de la distribution moyenne des gouttes.

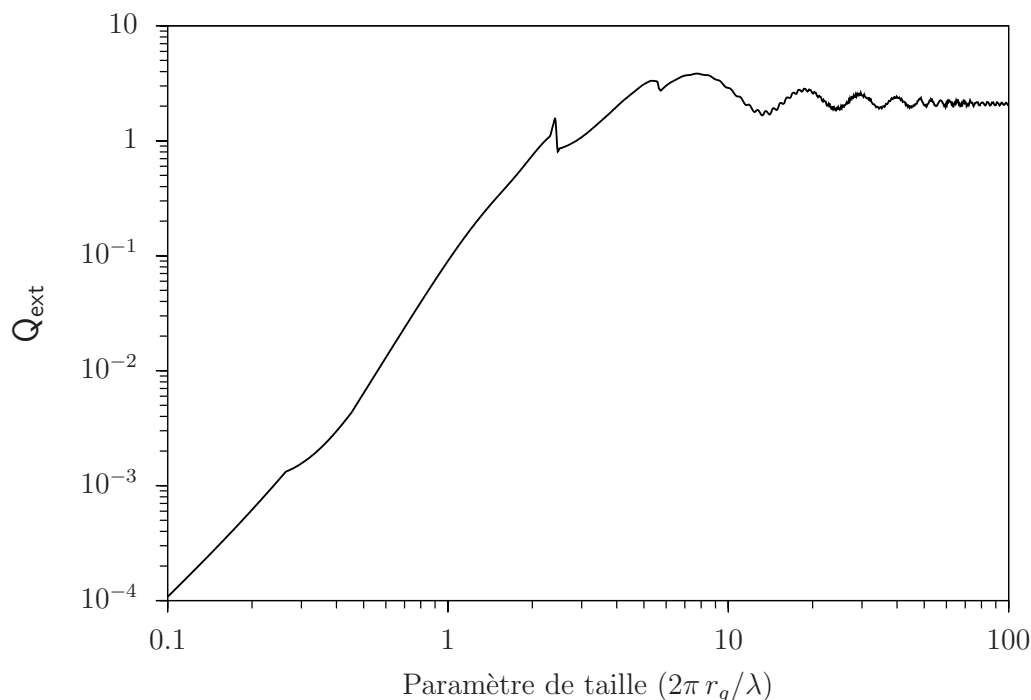


FIGURE 5.12 – Efficacité d’extinction (Q_{ext}) en fonction du paramètre de taille X .

5.3.2 Premiers résultats du TGCM-3D

Depuis la mise en place du modèle microphysique, 8 années de Titan ont pu être simulé avec le TGCM-3D. Pour la création des fichiers de démarrage nous nous sommes servis des fichiers 3D issus du modèle de [Lebonnois et al. \(2012\)](#) auxquels nous avons inclus l’ensemble des traceurs microphysiques provenant des simulations du modèle 2D. Dans la stratosphère les champs du modèle sont convergés, mais ce n’est pas le cas dans la région troposphérique. Sur ces 8 années, des ajustements ont été effectués ainsi que des corrections. Néanmoins les 4 dernières années simulées n’ont pas subi de changement majeurs (uniquement quelques ajustements sur les paramètres). Nous présentons dans la suite, la moyenne des résultats obtenus sur ces quatre années. Nous focaliserons notre étude sur la couche nuageuse et les champs associés (température, saturation).

La figure 5.13 montre la distribution méridienne des nuages durant la période 2004-2010⁹ que l’on peut comparer à la figure 5.14 présentant un panorama des derniers résultats obtenus en terme de couverture nuageuse par différentes équipes ([Mitchell et al., 2011](#); [Schneider et al., 2012](#); [Rannou et al., 2006](#), ainsi que le TGCM-3D). La table 5.4 recense les caractéristiques associées à chacun de ces modèles. Les principales différences entre les modèles résident dans la modélisation du transfert radiatif, de la brume et des nuages. Les conditions de surface (humidité relative et réservoir de CH_4) diffèrent aussi d’un modèle à l’autre. Seul le TGCM de l’IPSL inclut un modèle de microphysique complet (brume et nuages). En contre-partie, les deux autres modèles présentés ici traitent la convection nuageuse qui n’est pas incluse dans le TGCM. L’ensemble des modèles ne s’appuient pas sur les mêmes traceurs pour

9. Cette période correspond à la fin de l’hiver dans l’hémisphère Nord. L’équinoxe de printemps Nord a eu lieu en Août 2009.

représenter la couche nuageuse (opacité pour le TGCM, précipitations et occurrences de nuages pour les autres). Pour chaque modèle, les quantités physiques donnant les informations sur la couche de nuages, dans la figure 5.14, sont mis en gras dans la table 5.4.

	Rannou et al. 2006	Ce travail (TGCM-3D)	Mitchell et al. 2011	Schneider et al. 2012
<i>Dim.</i>	2	3	3	3
<i>T. R.</i>	McKay et al. 1989	McKay et al. 1989	Gris	Gris
<i>Modèle brume</i>	microphysique, couplé dynamique	microphysique, couplé dynamique	paramétrisé, non couplé	paramétrisé, non couplé
<i>Modèle nuage</i>	CH_4, C_2H_6 microphysique pas de convection	CH_4, C_2H_6, C_2H_2 microphysique, pas de convection	CH_4 convection, précipitation	CH_4 convection, précipitation
<i>Source CH_4</i>	réservoir ∞ $RH_S = 50\%$	réservoir ∞ $RH_S = 50\%$	réservoir ∞ , RH_S calculée	réservoir fini, RH_S calculée
<i>Carte nuages</i>	$\overline{\tau}_{cld}$	$\overline{\tau}_{cld}$	précipitations , I/F évalué	précipitations , occurences nuages

TABLE 5.4 – Caractéristiques des GCM comparés dans la figure 5.14. Le terme RH_S correspond à l’humidité relative à la surface. $\overline{\tau}_{cld}$ est un proxy de l’opacité calculé à partir de la section géométrique moyenne des gouttes (et du nombre de noyaux de condensation disponible) à chaque altitude.

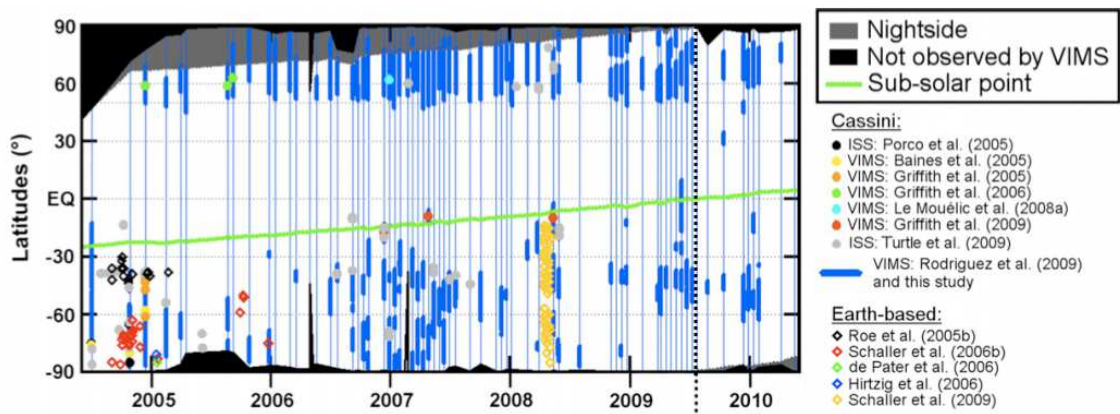
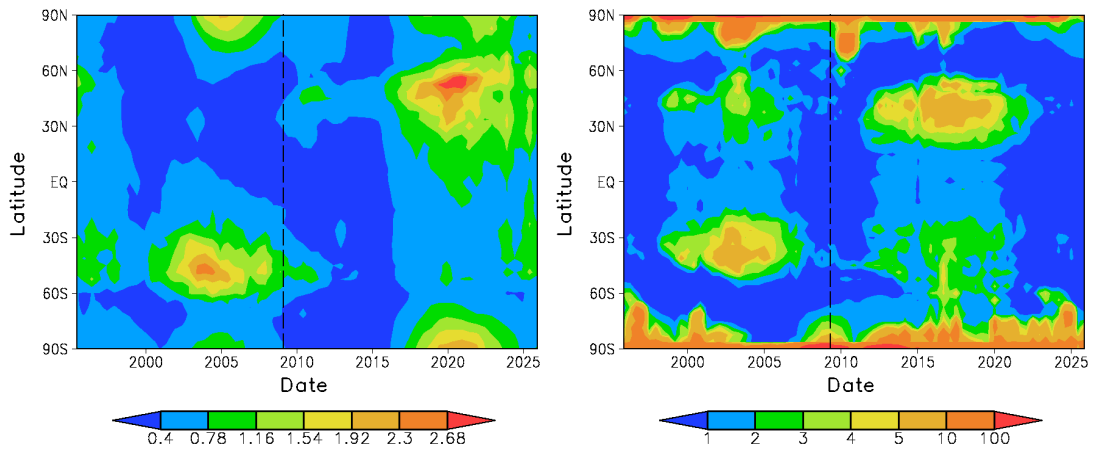


FIGURE 5.13 – Évolution temporelle de la distribution méridienne des nuages déduite des observations au sol et spatiales

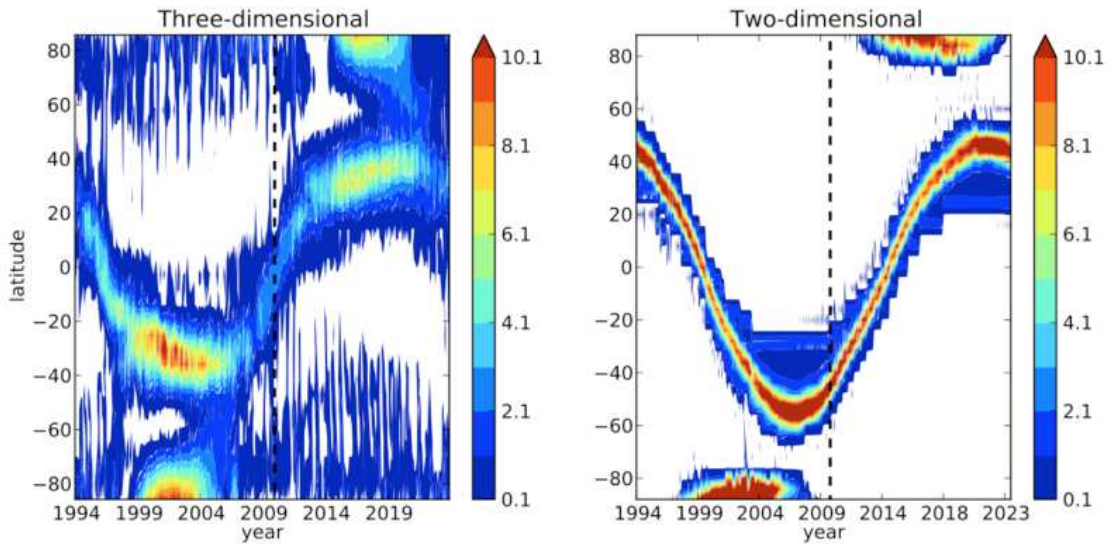
Le modèle 3D de Mitchell et al. (2011) et la version axi-symétrique 2D du modèle de Mitchell et al. (2006) (fig. 5.14.b, à droite) donnent les précipitations de CH_4 prescrites par leur schéma convectif. Ces précipitations sont directement considérées comme des indicateurs de présence des nuages (proxy). Ces modèles montrent clairement que les précipitations suivent fidèlement la zone de convergence intertropicale, avec un délai plus ou moins important selon l’humidité du sol et la prise en compte ou non de la chaleur latente (e.g. Mitchell et al., 2006). Dans leur version 3D, les zones de précipitations semblent mieux marquées aux latitudes autour de

40° dans l'hémisphère d'été. Cependant, les précipitations suivent tout de même la zone de convergence intertropicale aux équinoxes. La zone de précipitation (associée aux nuages) à 40°S dans le modèle de [Mitchell et al. \(2011\)](#) commence à se déplacer en 2007 ou 2008 vers l'équateur, ce qui est plus tôt que ne le montre les observations (figure 5.13), et rejoint sa position à 40°N vers 2014. Les modèles de [Mitchell et al. \(2006\)](#); [Mitchell et al. \(2011\)](#) montrent aussi une activité nuageuse assez vigoureuse autour du solstice, au pôle d'été, du au pic d'insolation à cette époque. L'apport d'énergie radiative permet d'évaporer les liquides, de saturer l'atmosphère et de produire cette activité qui encadre le solstice et dure à peu près 3 ans. Le modèle 3D ([Mitchell et al., 2011](#)) produit une grande quantité de petites structures aux latitudes élevées (au delà de 50°) qui ne sont pas observées dans la version axi-symétrique ([Mitchell et al., 2006](#)). Enfin, la version 3D réussit à reproduire les structures nuageuses observées lors de la transition à l'équinoxe avec des formations nuageuse associées à l'activité ondulatoire. Cela montre le bon comportement de ce modèle, même si les nuages ne sont pas prédits par un modèle de microphysique.

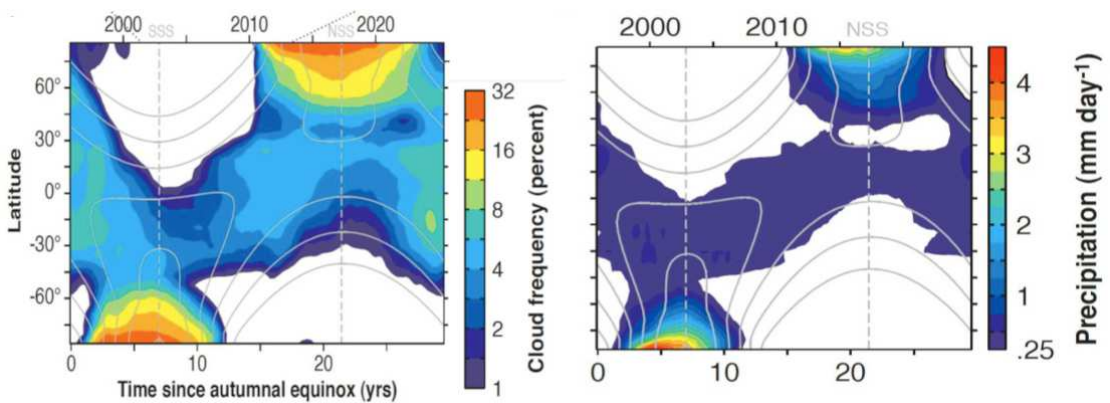
Le modèle de [Schneider et al. \(2012\)](#) (fig. 5.14.c) possède également un schéma convectif analogue à celui de [Mitchell et al. \(2011\)](#) pour traiter les nuages. Cependant, dans cet article, ils présentent leur carte de précipitation avec une carte de fréquence des nuages. Dans leur article, la fréquence des nuages n'est pas clairement définie, et l'on suppose qu'il s'agit de la fréquence à laquelle se produisent les événements nuageux dans chaque colonne du modèle, indépendamment de l'intensité de cet épisode. Cette carte peut être comparée à la carte des précipitations. Le modèle de [Schneider et al. \(2012\)](#) présente une bande de nuages quasiment continue et peu structurée qui semble se déplacer avec l'insolation au cours de l'année. La carte des précipitations associée (fig. 5.14.c, à droite) montre une bonne corrélation entre les nuages et « la pluie » mais montre néanmoins que la carte des précipitations et celle des fréquences des nuages ne sont pas homothétiques. Cela démontre que la carte des précipitations est une image « distordue » de la carte des nuages. Enfin, [Schneider et al. \(2012\)](#) présentent d'autres sorties de leur modèle (non présentée ici) qui donne l'intensité des précipitations (taux de précipitation lors des épisodes de précipitations) et la colonne totale du méthane. Si la carte des nuages qu'ils présentent semble moins structurée que celle de [Mitchell et al. \(2011\)](#), elle présente des structures similaires. Au pôle d'été, l'activité nuageuse semble similaire à ce que prédit [Mitchell et al. \(2011\)](#) et compatible avec les observations. Mais, la comparaison avec les observations est moins aisée pour les nuages à 40°S. Au lieu d'un déplacement net de ce nuage vers l'équateur, [Schneider et al. \(2012\)](#) prédit un faible déplacement et surtout des nuages couvrant toute la région entre 30°S et 30°N à l'équinoxe ce qui n'est pas observé. Enfin, il convient de noter la quantité de méthane gazeux est 40% supérieure dans leur modèle à ce qui est observé en réalité. Cet état est vraisemblablement du au très faible gradient entre l'équateur et le pôle d'été (0.5 K) qui permet d'humidifier efficacement toute l'atmosphère. Cela permet de produire des pluies abondantes au tropique, mais produit aussi trop de nuages et la quantité de méthane atmosphérique ne correspond pas à la situation actuelle de Titan.



(a) TGCM-3D IPSL (à gauche) et TGCM-2D IPSL (à droite)



(b) Mitchell et al., 2011 à gauche (modèle 3D) et Mitchell et al. 2006 à droite (modèle 2D)



(c) Schneider et al., 2012

FIGURE 5.14 – Cartes de nuages (ou proxy associé) issues de différents GCM. a) le TGCM-IPSL dans ses 2 versions : 3D à gauche et 2D à droite (Rannou et al., 2006). b) les GCM 3D (à gauche) et 2D (à droite) de Mitchell et al. (2011); Mitchell et al. (2006). c) le GCM 3D de Schneider et al. (2012).

Si l'on s'intéresse maintenant à nos résultats, on constate que l'asymétrie des nuages est nettement plus marquée dans le TGCM-3D que dans son homologue 2D. Le modèle de [Rannou et al. \(2006\)](#) est un modèle essentiellement basé sur des connaissances "pré-Cassini" et de nombreuses modifications ont été apportées à ce modèle avant d'obtenir la version 3D (voir p. 122). On note, par exemple, l'ajout de l'acétylène dans la microphysique des nuages et la prise en compte de la dissolution de l'azote moléculaire dans la phase condensée du méthane. Ce dernier phénomène diminue de manière non négligeable la pression saturation¹⁰ du CH_4 .

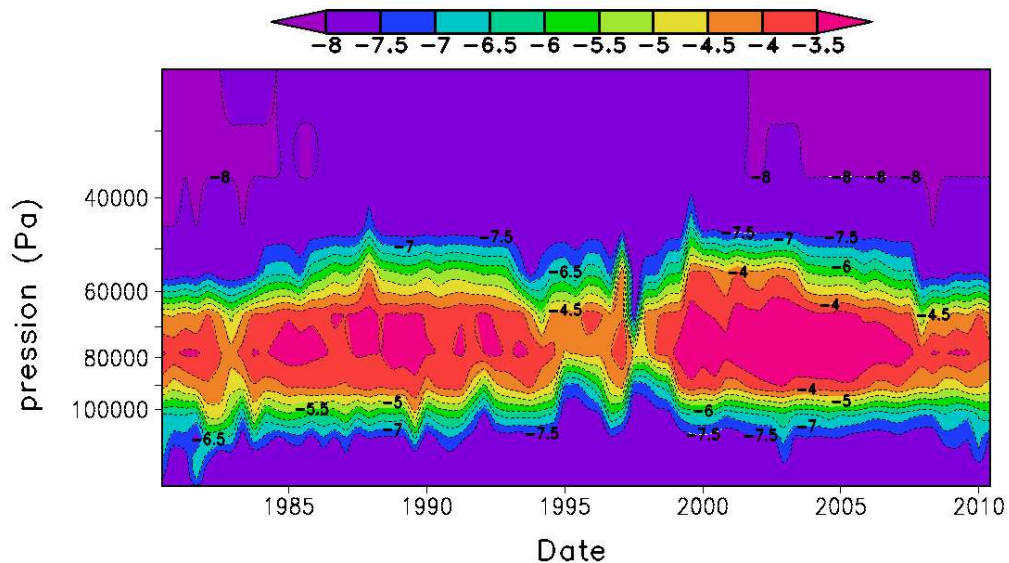
La carte des nuages du modèle 2D présente les grandes structures nuageuses, avec les nuages à 40° dans l'hémisphère d'été, et une contrepartie à 40° dans l'hémisphère d'hiver, des nuages intenses pratiquement permanents aux pôles, et une couche nuageuse plus diffuse dans la région polaire, modulée par la saison. Le trop fort contraste de température entre l'équateur et le pôle (6 K) a été identifié comme étant l'élément majeur expliquant la fausse prédiction du nuage à 40° dans l'hémisphère d'hiver (nord à l'arrivée de Cassini) ([Rodriguez et al., 2009](#)). Ce contraste trop important piège aussi le méthane aux pôles qui deviennent des pièges froids. Cependant, ce modèle 2D a permis de décrire les grandes lignes de la couverture nuageuse sur Titan, et leurs mécanismes de formation.

La carte du modèle 3D est assez ressemblante à celle du 2D, mais les différences sont remarquables. D'abord, le nuage à 40° dans l'hémisphère d'hiver n'existe plus. D'autre part le contraste en latitude de la température est bien plus faible que dans le modèle 2D et proche de l'observation ([Jennings et al., 2009](#)). Le nuage à 40° dans l'hémisphère d'été, au sud lors de l'arrivée de Cassini, disparaît graduellement entre 2009 et 2011. Le modèle prédit un nuage marqué au pôle d'hiver qui est lié à la descente de l'éthane, de l'acétylène et des aérosols dans la basse stratosphère. Le nuage est très bien structuré et disparaît en 2008 comme observé ([Le Mouélic et al., 2012](#)). En revanche, nous n'observons pas de nuages de méthane au pôle d'été durant le solstice. La raison tient à la condition limite à la surface que nous avons choisi : l'humidité relative à la surface est rappelée à la valeur 50% par une loi de flux basée sur l'écart entre l'humidité de la première couche et une valeur de référence. C'est une approche assez classique pour les GCM, et bien sûr, fixer une valeur de 50% interdit la formation de nuages massifs au pôle d'été comme dans les modèles de [Mitchell et al. \(2011\)](#) ou [Schneider et al. \(2012\)](#). En revanche, cela permet de comparer les résultats du GCM 3D et ceux du 2D ([Rannou et al., 2006](#)) car la même condition à la limite avait été choisie.

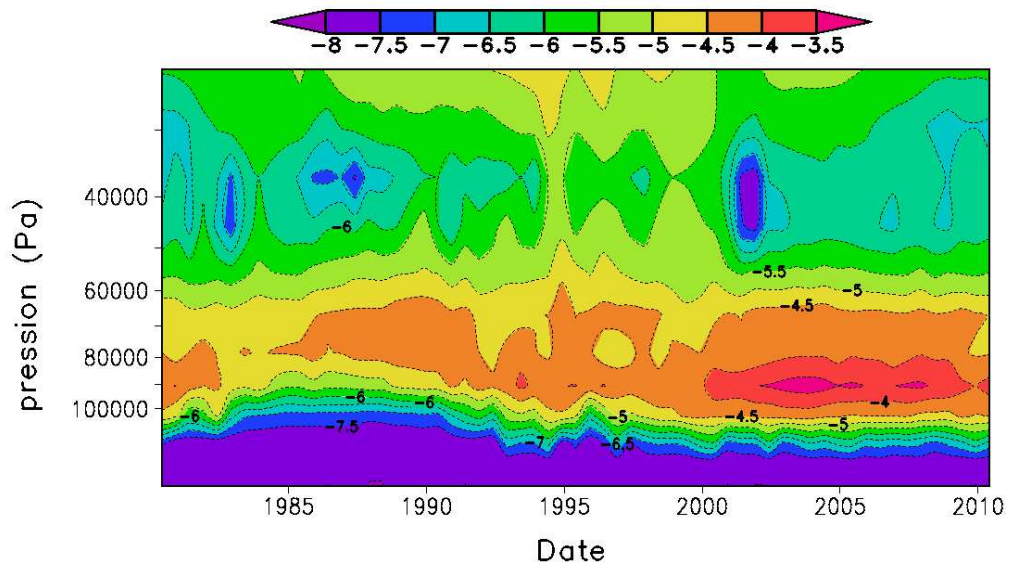
Aux moyennes latitudes, les deux modèles ont un comportement similaire pour l'extinction des nuages et produisent la couche nuageuse entre ~ 1000 et ~ 600 mbar (voir figure 5.15). Ici, il faut rappeler que le seuil saturation n'est pas le même car [Rannou et al. \(2006\)](#) avait utilisé un seuil de déclenchement pour la pression de vapeur saturante du méthane pur ($S_c = 1$) au lieu de prendre en compte l'effet de la dissolution de l'azote ($S_c = 0.85$). Néanmoins le plancher des nuages est similaire, et les opacités du même ordre de grandeur (Figure 5.14.a). L'extinction présente au dessus du niveau 600 mbar dans le modèle 3D est associée au C_2H_6 et au C_2H_2 qui forment une sorte de bruine persistante dans la troposphère. Cette bruine apparaissait déjà dans les dernières simulations effectuées avec le TGCM-2D, mais

10. Il abaisse la pression de saturation par rapport au méthane pur d'un facteur d'environ 0.85.

pas dans la simulation de Rannou et al. (2006). Ces différences sont clairement dues à des différences de paramétrisation.



(a) Modèle 2D (Rannou et al., 2006)

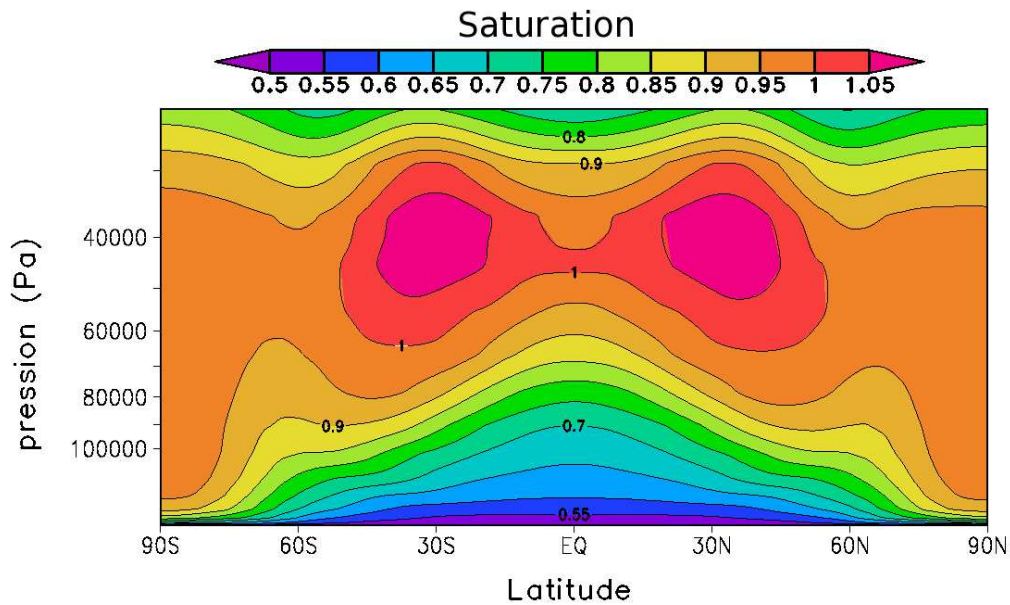


(b) Modèle 3D

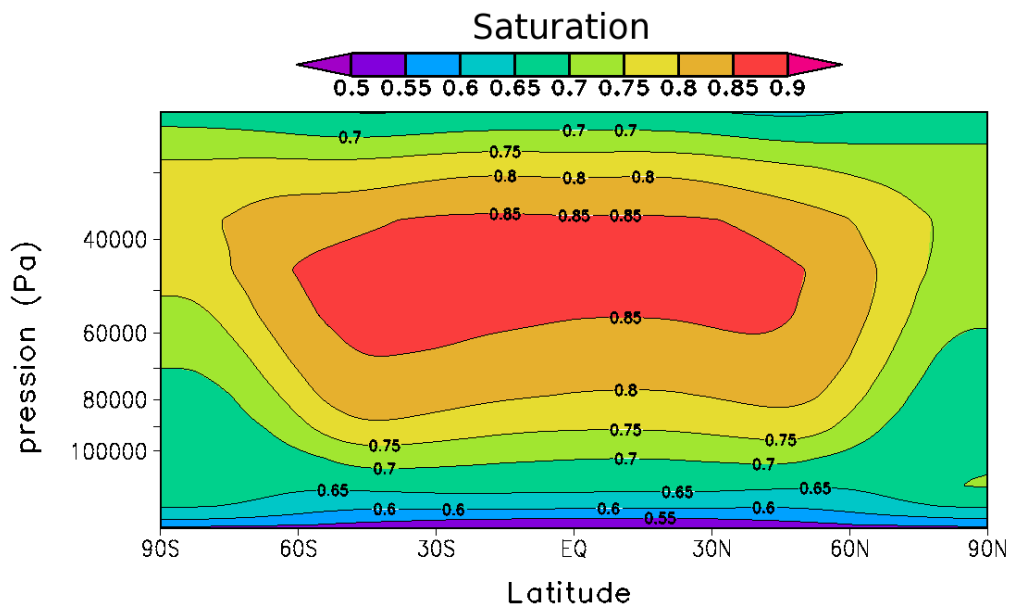
FIGURE 5.15 – Évolution sur une année de Titan du profil vertical de l’extinction (proxy) des nuages à 40°S pour le TGCM-2D (en haut) et le TGCM-3D (en bas). Les contours représentent le logarithme de base 10 des valeurs de ce proxy.

Pour comprendre la différence majeure entre le modèle 2D et 3D, la saturation est un bon élément. Les deux modèles ont donc une condition au limite similaire à la surface pour l’humidité du méthane ($RH_S = 50\%$). La figure 5.16 présente la moyenne annuelle de la saturation du méthane dans la troposphère, du sol jusqu’à ~ 25 km en fonction de la latitude. Cette fois, le comportement des deux modèles est radicalement différent. Dans la version axi-symétrique, le méthane est sursaturé ($S > 1.0$) dans la majeure partie de la troposphère de l’équateur aux pôles. A

contrario, dans le modèle 3D, la sursaturation n'apparaît que dans une zone confinée entre l'équateur et les moyennes latitudes dans une gamme d'altitude plus restreinte.



(a) Modèle 2D (Rannou et al., 2006)



(b) Modèle 3D

FIGURE 5.16 – Moyenne annuelle de la saturation du méthane pour le TGCM-2D (en haut) et le TGCM-3D (en bas).

Comme la source de méthane est similaire au sol, les différences observées dans la figure 5.16 traduisent en fait les différences de comportement du gradient méridien de température entre les deux modèles comme le montre la figure 5.18. Un des plus beaux résultats actuels du TGCM-3D concerne d'ailleurs le comportement de la température dans la troposphère. Le TGCM-2D produisait de fort gradient de température équateur-pôle ($\Delta T \gtrsim 3-4K$) dans toute la troposphère. A la surface ce

gradient était encore plus accentué avec des valeurs pouvant atteindre 5 à 6K. Dans le TGCM-3D, ce contraste est nettement plus faible dans la troposphère (entre 1 et 2K). A la surface, le gradient est compris entre 1 et 3K (la température est asymétrique selon la saison) en bon accord avec les observations (Jennings et al., 2009). A titre d'exemple, la figure 5.17 montre la température de surface des TGCM et celle déduite des observations en fonction de la latitude pour la période Cassini (2004-2007) :

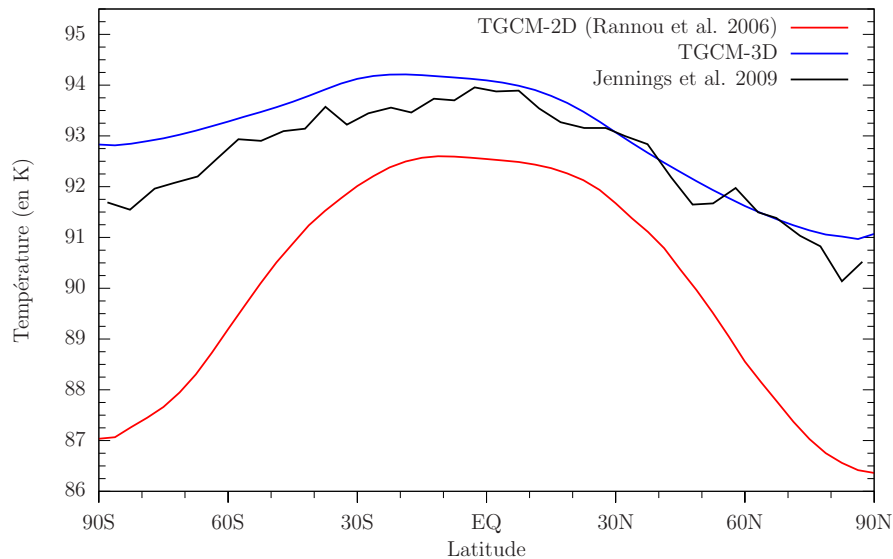
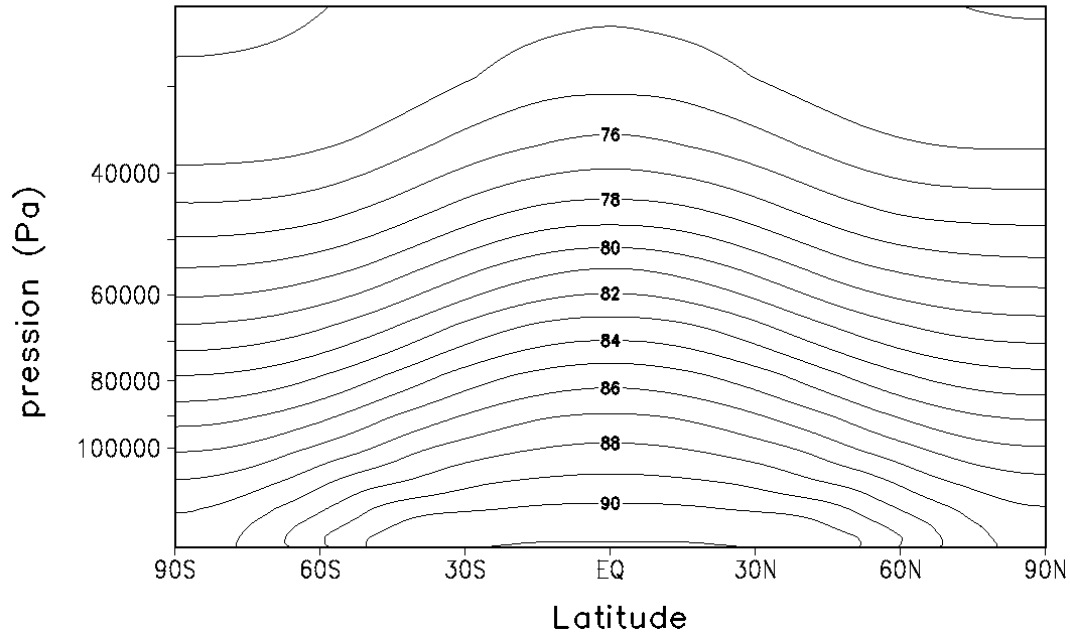
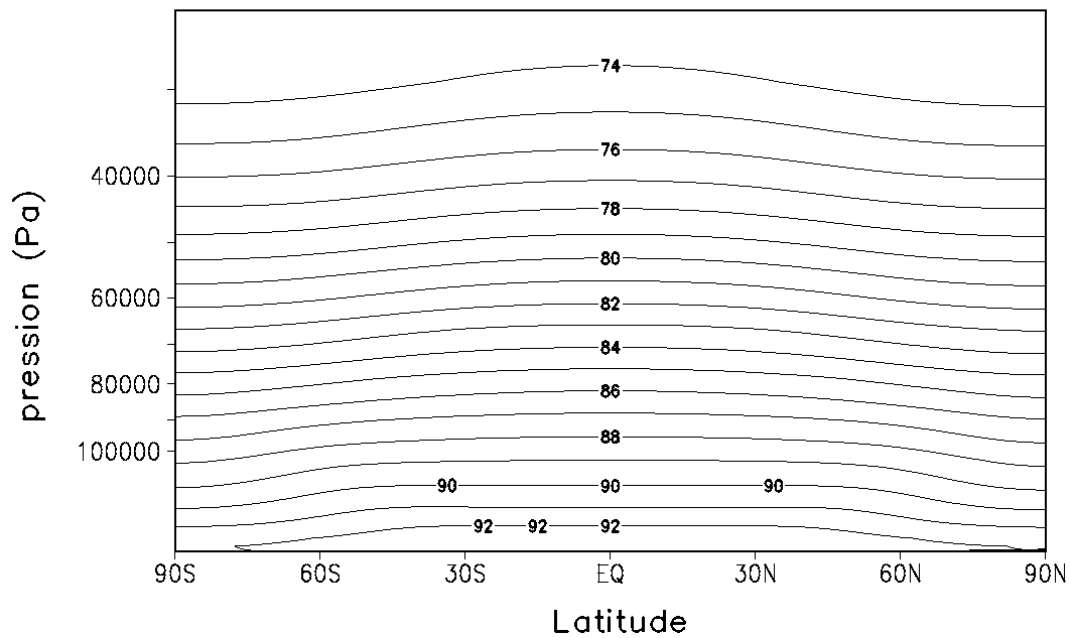


FIGURE 5.17 – Comparaison de la température de surface observée (Jennings et al., 2009) avec celle obtenue par les TGCM-2D (en rouge) et TGCM-3D (en bleu).

L'origine exacte de cette amélioration qui conditionne les bons résultats du TGCM-3D pour la couche de nuage n'est pas déterminée. Il faudrait pour cela reprendre le TGCM-2D et des tests spécifiques pour le découvrir. Si le besoin d'un modèle 2D plus fiable, par exemple pour des applications liées aux climats passés de Titan où à l'évolution de l'atmosphère sur de grandes périodes de temps, se faisait sentir, ce serait peut-être un chantier à engager. Notons toutefois plusieurs éléments propices à l'amélioration du champ de température. Tout d'abord, le champ de température dépend en premier lieu du transfert radiatif, et dans la version 2D, le calcul de la partie visible (solaire) était fait avec une orientation diurne moyenne et une fraction diurne. Or le taux de chauffage solaire moyen de l'atmosphère pour une journée n'est sans doute pas égal au taux de chauffage pour la géométrie moyenne de la journée. La répartition de l'énergie radiative en est affectée. Ensuite, la circulation 3D moyenne est aussi différente de la circulation calculée en 2D. Cela est inévitable, et cette circulation a pour effet de redistribuer l'énergie en latitude et de relaxer le gradient de température dans la troposphère. Enfin, une amélioration évidente du modèle est liée à la représentation de la couche limite qui a été mise à niveau par un schéma Mellor-Yamada (Mellor and Yamada, 1982). Cette paramétrisation affecte aussi la circulation, et cela est évident sur le profil de vent zonal (Lebonnois et al., 2012).



(a) Modèle 2D (Rannou et al., 2006)



(b) Modèle 3D

FIGURE 5.18 – Moyenne annuelle de la température dans la troposphère en fonction de la latitude pour le TGCM-2D (en haut) et le TGCM-3D (en bas). Les contours sont tracés tous les degrés Kelvin.

Le modèle 3D n'est pas encore totalement au point : Certains diagnostics ne sont pas sortis. Ce point, essentiellement technique, sera traité avant d'effectuer de nouvelles simulations. D'autres diagnostics restent sujet à caution. C'est notamment le cas des précipitation. Le modèle sort effectivement des précipitations dont la distribution annuelle est similaire à celle des nuages. Cependant les quantités obtenues sont anormalement faibles (de l'ordre de 1 nm.jour^{-1}) par rapport aux résultats du TGCM-2D (quelques microns par jour). Actuellement, nous ne savons pas si le forçage de l'humidité de surface ($RH_S = 50\%$) est responsable de cet état de fait ou si un « bug » dans le code a échappé à notre vigilance. Les premiers tests ne montrent pas d'incohérence dans le calculs des précipitations mais seul un test en supprimant la condition sur RH_S nous permettra de s'en assurer. Pour le moment, les précipitations ne sont pas couplées au réservoir de méthane à la surface et ce dernier est infini. De fait, cela ne pose pas de problème dans la mécanique du modèle. Néanmoins, pour étudier en détail le cycle du méthane, ce point doit être traité en priorité.

CHAPITRE 6

Conclusions et perspectives

Ce travail de thèse s'inscrit dans une longue évolution du modèle de climat global dédié à Titan et développé à l'IPSL (TGCM). Au début des années 1990, ce modèle développé en 3D était essentiellement un modèle de circulation atmosphérique avec les processus physiques réduits au strict nécessaire : le transfert radiatif et quelques processus atmosphériques (diffusion, ajustement convectif). Ensuite, pour des raisons pratiques, ce modèle a été porté en 2D pour permettre d'inclure des processus plus lourds ayant un impact sur le climat. A cette époque, cela était justifié du point de vue scientifique, car Titan apparaissait essentiellement avec une structure zonale uniforme. Moyennant une prescription de l'interaction entre les ondes du jet stratosphérique et la circulation moyenne, le TGCM-2D donnait des prédictions réalistes. Bien entendu, la raison technique justifiant le passage en 2D tenait aux temps de calculs exorbitants d'un modèle couplé en 3D qui auraient rendus cette démarche impossible. Ainsi, la microphysique des aérosols, puis la photochimie et enfin la microphysique des nuages ont été successivement incluses et couplées au TGCM-2D. Cette version bi-dimensionnelle du modèle de climat a permis d'expliquer un grand nombre des structures observées sur Titan et a permis d'analyser le fonctionnement de la machine atmosphérique. Avec l'arrivée des sondes Cassini et Huygens, un très grand nombre d'observations ont été réalisées et ont mis en évidence la nécessité de re-développer le modèle en 3D. Les prédictions du TGCM-2D, suffisantes pour expliquer les observations avant 2005 ne le sont plus maintenant. Le fonctionnement du TGCM-2D ne correspond pas à la réalité dès lors qu'on s'intéresse aux détails fins et, de surcroît, de nombreuses observations révèlent des structures qui ont une structure zonale, ou réparties de manière non uniforme dans la direction zonale. Le passage de 2D en 3D a été réalisé dans le cadre du projet ANR Exoclimat et le modèle produit est maintenant entièrement développé. Ce modèle intègre aussi les processus photochimiques qui peuvent être ou non activés. Concernant la microphysique, il couple la circulation et les aérosols comme le faisait déjà le modèle 2D au tournant des années 2000. Au début de ma thèse, il restait donc à inclure la microphysique des nuages.

L'objectif de ce travail de thèse était avant tout de mettre en place le modèle microphysique du TGCM actuel (version axi-symétrique) dans la nouvelle version tri-dimensionnelle du TGCM développée au Laboratoire de Météorologie Dynamique. Sur la simple considération des temps de calcul, ce modèle microphysique ne peut pas être directement inclus dans une version tri-dimensionnelle sans en revoir le

schéma de fonctionnement. Le travail a donc tout d'abord consisté à « simplifier » le modèle microphysique. La première simplification envisageable consiste à réduire le nombre de traceurs microphysiques du modèle. La dégradation des résultats engendrée par la diminution du nombre de sections représentant la distribution en taille des aérosols rend le modèle instable vis à vis des lois microphysiques : Les 10 sections utilisées dans le TGCM-2D constituent un seuil strict en dessous duquel le modèle n'est plus représentatif (Rannou et al., 2004). La seconde simplification envisageable était d'utiliser une représentation paramétrisée des lois de distribution de traceurs. C'est cette piste qui a été suivie tout au long de cette thèse.

Déroulement de la thèse

Le développement de la représentation paramétrisée des lois microphysiques a été relativement tardif dans le contexte de la thèse. Dans un premier temps, l'aspect fractal des aérosols nous avait convaincu qu'il ne serait pas possible de développer une telle méthode dans le contexte de Titan : Cet aspect modifie profondément les lois microphysiques. Une conséquence est que la loi de distribution n'est pas analytique (tout comme ses propriétés d'intégration). De fait, on ne peut pas employer de loi Log-Normale pour la représenter comme ce qui est fait dans le cas général. Ce point a été l'un des freins majeurs en début de thèse à l'établissement de la méthode.

Si la mise en place d'une méthode de moments paraissait difficilement concevable pour la microphysique, il était néanmoins possible d'en tirer profit dans certains processus du modèle pour lesquels la taille des aérosols n'est pas discriminant (ie : la diffusion, le transport ou encore l'ajustement convectif). L'idée de la représentation « mixte » vient de cet état de fait. Cette représentation nécessitant tout de même de connaître la loi de distribution nous encourage à caractériser cette dernière (fonction analytique, calcul de ses moments ...). Par la suite, une recherche plus approfondie dans la littérature sur les aspects théorique de la représentation paramétrisée, ont permis de démarrer un développement plus concret de la méthode.

En parallèle, nous avons entrepris d'effectuer des tests sur les paramètres du modèle (TGCM-2D) pouvant affecter la couche de nuages dont le but était essentiellement de déterminer si cette dernière pouvait être mieux représentée dans le TGCM-2D. Enfin, l'étude menée par l'équipe au laboratoire sur la couche détachée était une occasion d'utiliser à nouveau le TGCM-2D pour en évaluer le bilan radiatif. J'ai donc travaillé sur ce sujet en étudiant d'une part le rôle de la distribution des aérosols dans le chauffage radiatif dans cette couche et d'autre part le couplage radiatif-dynamique.

Développement du modèle en moments de distribution

Le pari a été pris de développer une méthode de moment pour représenter les lois microphysiques dans les conditions particulières de Titan : Le type d'aérosols, la transition des régimes d'écoulement, ou encore l'effet de la charge électrique sont autant d'aspects primordiaux qu'il a fallu adapter pour cette représentation. Nous synthétisons ici l'ensemble des points développés autour de cette méthode :

-
- (1) Grâce au TGCM-2D, nous avons pu au préalable caractériser la loi de distribution des aérosols. Une fonction analytique représentative de cette loi nécessaire au développement de la méthode en moments a ainsi pu être déterminée (chapitre 2). Il en va de même pour l'ensemble des outils mathématiques associés (chapitre 3).
 - (2) Sur la base des études théoriques publiées sur le sujet, nous avons ensuite décrit l'ensemble des lois microphysiques pour la brume en tenant compte des deux types de particules présents sur Titan. L'originalité de ce travail repose essentiellement sur cet aspect. Dans la littérature aucune étude, à notre connaissance, n'a présenté la mise en moments des équations de la microphysique en traitant les interactions de plusieurs types de particules au comportement différent vis à vis des lois de la microphysique. La microphysique des nuages a aussi été adaptée en moments.
 - (3) Une fois les équations écrites en moment, nous les avons testées. Nous avons testé complètement la microphysique des nuages, en faisant des comparaisons avec le modèle original décrit en sections. Comme tous les processus ne sont pas entièrement écrits en moments, il a été nécessaire de développer une représentation mixte des traceurs à l'aide d'une méthode de conversion développée pour l'occasion (voir chapitre 4). Le modèle en moment pour la microphysique des nuages a été testé dans un modèle 1D qui a permis de valider la méthode avec, pour rappel, des erreurs globales inférieures à 10% pour l'opacité des nuages se traduisant par différences inférieures au pourcent sur la température.
 - (4) Concernant la microphysique de la brume, nous avons essentiellement testé la méthode processus par processus. Nous avons vérifié que l'ensemble des équations écrites pour les aérosols en moments donnait des résultats cohérents avec les équations originales. L'aspect le plus crucial concerne le processus de coagulation. Cependant, le temps nous a manqué pour effectuer les tests équivalents à ceux réalisés pour les nuages. En particulier, certains aspects importants de la microphysique des aérosols, comme les effets de la charge électrique, les probabilités de transfert de particules sphériques en agrégats fractals, restent à valider par rapport à un modèle en sections. Nous avons donné pour l'instant à ce sujet, des pistes de développement plutôt que des théories bien ancrées. Néanmoins, l'ensemble des développements présentés dans le chapitre 3 sont cohérents avec les lois de la microphysique telle que présentées dans le chapitre 2.

L'impact de la nouvelle représentation des traceurs sur les temps de calcul a pu être partiellement quantifié dans le cadre du modèle 1D. La méthode des moments apporte un gain de temps non négligeable de l'ordre d'un facteur 18 *sur, et uniquement sur* les processus de la microphysique des nuages (condensation et nucléation). Ce chiffre laisse rêveur lorsque l'on se remémore le temps d'exécution du TGCM (voir table 5.3). Ce facteur de temps ne représente pas, bien entendu, le gain total à attendre puisque le passage en moment n'aura pas d'impact sur un certain nombre de processus. Il faut garder à l'esprit que *la force et l'intérêt* de cette méthode, dans le cadre du GCM, réside dans la réduction du nombre de traceurs microphysiques

(ce qui a également un impact sur les processus de transport dans la dynamique). Tel que nous l'avons présentée, la méthode permettrait de diminuer ce nombre de 50 à 7. Si aucun gain de temps ne peut être extrapolé à l'heure actuelle, il n'en reste pas moins que cette méthode a un très grand potentiel ce qui fait de la mise en place du modèle de brume en moments une priorité pour les futurs développements du TGCM-3D.

Inclusion de la microphysique des nuages dans le GCM 3D

En parallèle au développement de la méthode des moments, le modèle de microphysique des nuages du TGCM-2D a tout de même été mis en place dans la version 3D. Afin d'exécuter les simulations dans les meilleures conditions possibles, deux simplifications ont été apportées au modèle :

- (1) Le calcul des propriétés optiques des gouttes, évalué à chaque appel du transfert radiatif a été révisé afin de réduire le temps de calcul associé. Nous utilisons une table pré-calculée des propriétés optiques en fonction du paramètre de taille. Actuellement, le schéma de construction de la table ne tient compte que d'une taille unique de particule et doit être révisé pour mieux représenter la distribution des gouttes. L'emploi de cette distribution permettra de lisser les oscillations de Mie, dont l'effet a été ignoré jusqu'à présent. Ces oscillations peuvent créer à terme un biais dans l'opacité des nuages et avoir un impact sur le transfert radiatif.
- (2) La microphysique a été mise en place dans le modèle de façon à pouvoir s'exécuter soit en 3 dimensions, soit en 2 dimensions. Dans le second cas, les processus de la microphysique sont calculés en moyenne zonale, puis les tendances sont reconverties en 3D en respectant la masse totale du traceur considéré (chapitre 5). Cette simplification était déjà mise en place pour la microphysique de la brume dans le modèle mis à notre disposition durant la thèse. Nous l'avons étendu à la microphysique des nuages. Notons que cette approche n'est pas équivalente au modèle 2D car les traceurs sont transportés par la circulation en 3D dans la partie dynamique.

Le choix de ces simplifications peut être discuté et ces « solutions » ne peuvent être que temporaires¹. Néanmoins, ces simplifications ont permis d'effectuer les premières simulations du modèle 3D couplé. Les temps de calcul extrêmement long (~ 17 jours pour une simulation d'un an), et l'ajustement progressif des paramètres du modèle n'ont permis de simuler que 8 années de Titan avec le couplage des nuages. Le modèle n'est pas encore convergé dans la partie troposphérique et les champs évoluent lentement.

Les premiers résultats obtenus sur la couche nuageuse sont très encourageants. L'asymétrie des nuages est bien plus marquée que dans le modèle axi-symétrique et varie peu d'une année sur l'autre². Cette amélioration est assurément liée à l'amélioration des gradients méridiens de température dont l'explication doit se trouver dans

1. La version finale du modèle 3D ne devrait plus disposer de ce genre de simplifications.

2. Les structures nuageuses sont donc assez stables pour ne pas être considérées comme des états transitoires.

la modélisation de la dynamique en 3D, ainsi que dans la mise à jour du schéma de couche limite (Lebonnois et al., 2012). Ce modèle est à même d'améliorer les résultats concernant la couche nuageuse par rapport à la version axi-symétrique.

Deux remarques s'imposent. La version actuelle de TGCM-3D avec nuages est utilisable en l'état, mais avec des temps d'exécution très longs. Néanmoins, il est déjà possible de démarrer des études concernant le climat de Titan et l'impact de différents paramètres ou conditions aux limites. La position des sources de méthane à la surface est sans doute un élément crucial de la couverture nuageuse. Cependant, on ne pourra jamais faire des études très poussées avec ce modèle en l'état compte tenu de sa lenteur. Ces simulations ont aussi un intérêt, plus technique, pour les futurs développements du modèle car ils permettront de débiter les simulations de test en représentation moments à partir d'un état de l'atmosphère proche de la convergence. De plus, les résultats de la représentation moments pourront être directement comparés aux simulations actuelles. Elles constituent de ce point de vue une base de travail déjà bien avancée.

Appendices

Annexes

ANNEXE A

Développement des équations de la coagulation en moments

Cette annexe détaille le développement des équations de la coagulation en moments à l'ordre 0 pour le mode sphérique dans les deux cas extrême du régime d'écoulement. Afin de faciliter la lecture, l'équation de départ 3.19 est reprise ici. Les expressions du kernel de coagulation (équations 3.22 et 3.24 pour le régime hydrodynamique ; 3.27, 3.28 et 3.30 pour le régime moléculaire) seront aussi reprises au fur et à mesure du développement.

$$\frac{dM_k^S}{dt} = \underbrace{\frac{p_k}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{SS}(r_i, r_j) (r_i^3 + r_j^3)^{k/3} n_S(r_i) n_S(r_j) dr_i dr_j}_{I_1} \quad (\text{A.1})$$

$$- \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{SS}(r_i, r_j) (r_i^k + r_j^k) n_S(r_i) n_S(r_j) dr_i dr_j}_{I_2} \quad (\text{A.2})$$

$$+ \underbrace{\int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{SF}(r_i, r_j) (-r_i^k) n_S(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j}_{I_3} \quad (\text{A.3})$$

La simplification de cette équation se fait en deux étapes. En premier lieu, il est nécessaire de développer complètement chacune des intégrales en polynômes du rayons. Une fois cette étape effectuée, on applique le type de transformation présenté en page 56 et que nous reprenons ici à titre d'exemple. Ainsi pour l'intégrale quelconque I faisant intervenir les deux modes, on peut écrire :

$$\begin{aligned} I &= \int_0^\infty \int_0^\infty (r_i^p + r_j^k) n_S(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j \\ I &= \int_0^\infty \int_0^\infty r_i^p n_S(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j + \int_0^\infty \int_0^\infty r_j^k n_S(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j \\ &= \int_0^\infty r_i^p n_S(r_i) dr_i \int_0^\infty n_F(r_j) dr_j + \int_0^\infty n_S(r_i) dr_i \int_0^\infty r_j^k n_F(r_j) dr_j \\ &= M_p^S M_0^F + M_0^S M_k^F \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Notons, à nouveau, que cette transformation n'est valable que si les variables r_i et r_j sont décorréelées, ce qui est effectivement le cas dans notre étude.

Régime hydrodynamique

En régime hydrodynamique ($Kn \lesssim 1$), les deux kernels de coagulation qui nous intéressent pour le développement se présentent de la manière suivante (équations 3.22 et 3.24) :

$$\beta_{CO}^{SS}(r_i, r_j) = K_{CO} \left[2 + \frac{r_i}{r_j} + \frac{r_j}{r_i} + C \left(\frac{1}{r_i} + \frac{1}{r_j} + \frac{r_j}{r_i^2} + \frac{r_i}{r_j^2} \right) \right]$$

$$\beta_{CO}^{SF}(r_i, r_j) = K_{CO} \left[2 + \frac{r_i}{E r_j^{3/D_f}} + \frac{E r_j^{3/D_f}}{r_i} \right. \\ \left. + C \left(\frac{1}{r_i} + \frac{1}{E r_j^{3/D_f}} + \frac{E r_j^{3/D_f}}{r_i^2} + \frac{r_i}{E^2 r_j^{6/D_f}} \right) \right]$$

$$\text{Avec } E = r_m^{\frac{(D_f-3)}{D_f}}, \quad C = A \times \lambda_g \text{ et } K_{CO} = \frac{2kT}{3\eta}.$$

Pour l'ordre $k = 0$, les termes I_1 et I_2 peuvent s'additionner pour donner :

$$I_1 + I_2 = \left(\frac{p_0^{CO} - 2}{2} \right) \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{CO}^{SS}(r_i, r_j) n_S(r_i) n_S(r_j) dr_i dr_j \\ = \left(\frac{p_0^{CO} - 2}{2} \right) K_{CO} \int_0^\infty \int_0^\infty \left[2 + \frac{r_i}{r_j} + \frac{r_j}{r_i} + C \left(\frac{1}{r_i} + \frac{1}{r_j} + \frac{r_j}{r_i^2} + \frac{r_i}{r_j^2} \right) \right] \\ \times n_S(r_i) n_S(r_j) dr_i dr_j$$

En développant chaque terme de l'intégrale et appliquant la transformation représentée par l'équation A.4, on obtient de fait :

$$I_1 + I_2 = \left(\frac{p_0^{CO} - 2}{2} \right) K_{CO} \times \left[2 M_0^{S^2} + 2 M_{-1}^S M_1^S + 2C (M_0^S M_{-1}^S + M_1^S M_{-2}^S) \right]$$

Le même raisonnement peut s'effectuer pour I_3 , en prenant garde d'associer les ordres des moments au bon mode. On obtient alors :

$$I_3 = - \int_0^\infty \int_0^\infty \beta_{CO}^{SF}(r_i, r_j) n_S(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j \\ = -K_{CO} \int_0^\infty \int_0^\infty \left[2 + \frac{r_i}{E r_j^{3/D_f}} + \frac{E r_j^{3/D_f}}{r_i} \right. \\ \left. + C \left(\frac{1}{r_i} + \frac{1}{E r_j^{3/D_f}} + \frac{E r_j^{3/D_f}}{r_i^2} + \frac{r_i}{E^2 r_j^{6/D_f}} \right) \right] \times n_S(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j \\ I_3 = -K_{CO} \left[2 M_0^S M_0^F + E^{-1} M_1^S M_{-\frac{3}{D_f}}^F + E M_{-1}^S M_{\frac{3}{D_f}}^F \right. \\ \left. + C \left(M_{-1}^S M_0^F + E^{-1} M_0^S M_{-\frac{3}{D_f}}^F + E M_{-2}^S M_{\frac{3}{D_f}}^F + E^{-2} M_1^S M_{-\frac{6}{D_f}}^F \right) \right]$$

L'addition des 3 termes I_1 , I_2 et I_3 permet d'obtenir l'équation d'évolution du moment d'ordre 0 du mode sphérique pour le régime continu en fonction uniquement des moments de la distribution et d'un pré-facteur dépendant des propriétés atmosphérique :

$$\begin{aligned}
\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{CO} &= I_1 + I_2 + I_3 \\
\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{CO} &= K_{CO} (p_0^{CO} - 2) \left[M_0^{S^2} + M_{-1}^S M_1^S + C (M_0^S M_{-1}^S + M_1^S M_{-2}^S) \right] \\
&\quad - K_{CO} \left[2 M_0^S M_0^F + E^{-1} M_1^S M_{-\frac{3}{D_f}}^F + E M_{-1}^S M_{\frac{3}{D_f}}^F \right. \\
&\quad \left. + C \left(M_{-1}^S M_0^F + E^{-1} M_0^S M_{-\frac{3}{D_f}}^F + E M_{-2}^S M_{\frac{3}{D_f}}^F + E^{-2} M_1^S M_{-\frac{6}{D_f}}^F \right) \right] \quad (A.5)
\end{aligned}$$

Afin d'obtenir l'équation 3.32, une dernière étape est nécessaire. Il s'agit d'éliminer tous les moments intermédiaires apparaissant dans l'équation A.5 en les substituant par la relation inter-moments $\alpha(k) = M_k / (r_C^k \times M_0)$ décrite dans la section 3.2.1. Cette substitution doit être effectuée pour les deux modes en utilisant les fonctions $\alpha_S(k)$ et $\alpha_F(k)$, respectivement associées au mode sphérique et au mode fractale. Nous rappelons que ces deux modes ont chacun un rayon caractéristique qui leur est propre et qui se calcule de la façon suivante :

$$r_{C_S} = \left(\frac{1}{\alpha_S(3)} \times \frac{M_3^S}{M_0^S} \right)^3 \quad ; \quad r_{C_F} = \left(\frac{1}{\alpha_F(3)} \times \frac{M_3^F}{M_0^F} \right)^3$$

L'équation 3.32 devient alors, sous sa forme développée :

$$\begin{aligned}
\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{CO} &= K_{CO} (p_0^{CO} - 2) \left[1 + \alpha_S(-1) \alpha_S(1) + \frac{C}{r_{C_S}} \left(\alpha_S(-1) + \alpha_S(1) \alpha_S(-2) \right) \right] M_0^{S^2} \\
&\quad - K_{CO} \left[2 + E^{-1} r_{C_S} r_{C_F}^{-3/D_f} \alpha_S(1) \alpha_F\left(-\frac{3}{D_f}\right) + E r_{C_S}^{-1} r_{C_F}^{3/D_f} \alpha_S(-1) \alpha_F\left(\frac{3}{D_f}\right) \right. \\
&\quad \left. + C \left(r_{C_S}^{-1} \alpha_S(-1) + E^{-1} r_{C_F}^{-3/D_f} \alpha_F\left(-\frac{3}{D_f}\right) + E r_{C_S}^{-2} r_{C_F}^{3/D_f} \alpha_S(-2) \alpha_F\left(\frac{3}{D_f}\right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + E^{-2} r_{C_S} r_{C_F}^{-6/D_f} \alpha_S(1) \alpha_F\left(-\frac{6}{D_f}\right) \right) \right] M_0^S M_0^F
\end{aligned}$$

Que l'on réécrit plus simplement (équation 3.32) :

$$\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{CO} = (p_0^{CO} - 2) \gamma_0^{SS,CO} \times M_0^{S^2} - \gamma_0^{SF,CO} \times M_0^S M_0^F$$

Le déroulement des autres équations d'évolution pour la coagulation suit exactement le même schéma. L'ensemble des coefficients γ présentés dans cette annexe et dans la section 3.3.1.6 sont présentés dans l'annexe A. Nous exposons tout de même le déroulement de l'équation d'évolution du moment d'ordre 0 dans le régime moléculaire afin de présenter l'introduction des termes b_k dans le développement.

Régime moléculaire

En régime moléculaire ($Kn \gg 1$), les trois kernels de coagulation qui nous intéressent pour le développement se présentent de la manière suivante :

$$\beta_{FM}^{T1}(r_i, r_j) = b_k^{T1} \beta_{FM}^{SS}(r_i, r_j)$$

$$\beta_{FM}^{T2}(r_i, r_j) = b_k^{T2} \beta_{FM}^{SS}(r_i, r_j)$$

$$\beta_{FM}^{T4}(r_i, r_j) = b_k^{T4} \beta_{FM}^{SF}(r_i, r_j)$$

$$\beta_{FM}^{SS}(r_i, r_j) = K_{FM} \left[r_i^{1/2} + 2 r_i^{-1/2} r_j + r_i^{-3/2} r_j^2 + r_i^2 r_j^{-3/2} + 2 r_i r_j^{-1/2} + r_j^{1/2} \right]$$

$$\beta_{FM}^{SF}(r_i, r_j) = K_{FM} \left[r_i^{1/2} + 2 E r_i^{-1/2} r_j^{3/D_f} + E^2 r_i^{-3/2} r_j^{6/D_f} + r_i^2 r_j^{-3/2} + 2 E r_i r_j^{\frac{6-3D_f}{2D_f}} + E^2 r_j^{\frac{12-3D_f}{2D_f}} \right]$$

$$\text{Avec } E = r_m^{\frac{(D_f-3)}{D_f}} \text{ et } K_{FM} = \left(\frac{6kT}{\rho_p} \right)^{1/2}.$$

Ici les termes T1, T2 et T4 sont respectivement associés aux kernels de coagulation des des termes I₁, I₂ et I₃ de l'équation A.1. A l'ordre 0, les termes b_0^{T1} et b_0^{T2} sont égaux et on peut directement développer le terme I₁ + I₂ de la manière suivante :

$$\begin{aligned} I_1 + I_2 &= \left(\frac{p_0^{FM} - 2}{2} \right) \int_0^\infty \int_0^\infty b_0^{T1} \beta_{FM}^{SS}(r_i, r_j) n_S(r_i) n_S(r_j) dr_i dr_j \\ &= \left(\frac{p_0^{FM} - 2}{2} \right) b_0^{T1} K_{FM} \int_0^\infty \int_0^\infty \left[r_i^{1/2} + 2 r_i^{-1/2} r_j + r_i^{-3/2} r_j^2 + r_i^2 r_j^{-3/2} \right. \\ &\quad \left. + 2 r_i r_j^{-1/2} + r_j^{1/2} \right] n_S(r_i) n_S(r_j) dr_i dr_j \end{aligned}$$

Comme dans le cas du régime hydrodynamique, le développement de chaque terme de l'intégrale et l'application de la transformation représentée par l'équation A.4, permet d'obtenir :

$$I_1 + I_2 = \left(\frac{p_0^{FM} - 2}{2} \right) b_0^{T1} K_{FM} \times \left[2 M_0^S M_{\frac{1}{2}}^S + 4 M_{-\frac{1}{2}}^S M_1^S + 2 M_{-\frac{3}{2}}^S M_2^S \right]$$

Le développement pour I₃ s'effectue de la même manière avec les même remarque que pour le régime hydrodynamique :

$$\begin{aligned} I_3 &= - \int_0^\infty \int_0^\infty b_0^{T4} \beta_{FM}^{SF}(r_i, r_j) n_S(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j \\ &= - b_0^{T4} K_{FM} \int_0^\infty \int_0^\infty \left[r_i^{1/2} + 2 E r_i^{-1/2} r_j^{3/D_f} + E^2 r_i^{-3/2} r_j^{6/D_f} + r_i^2 r_j^{-3/2} \right. \\ &\quad \left. + 2 E r_i r_j^{\frac{6-3D_f}{2D_f}} + E^2 r_j^{\frac{12-3D_f}{2D_f}} \right] \times n_S(r_i) n_F(r_j) dr_i dr_j \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_3 = & -b_0^{T4} K_{FM} \left[M_{\frac{1}{2}}^S M_0^F + 2 E M_{-\frac{1}{2}}^S M_{\frac{3}{D_f}}^F + E^2 M_{-\frac{3}{2}}^S M_{\frac{6}{D_f}}^F + M_2^S M_{\frac{3}{2}}^F \right. \\
& \left. + 2 E M_1^S M_{\frac{6-3D_f}{2D_f}}^F + E^2 M_0^S M_{\frac{12-3D_f}{2D_f}}^F \right]
\end{aligned}$$

L'addition des 3 termes I_1 , I_2 et I_3 nous donnent pour le régime moléculaire :

$$\begin{aligned}
\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{FM} &= I_1 + I_2 + I_3 \\
\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{FM} &= (p_0^{FM} - 2) b_0^{T1} K_{FM} \times \left[M_0^S M_{\frac{1}{2}}^S + 2 M_{-\frac{1}{2}}^S M_1^S + M_{-\frac{3}{2}}^S M_2^S \right] \\
& - b_0^{T4} K_{FM} \left[M_{\frac{1}{2}}^S M_0^F + 2 E M_{-\frac{1}{2}}^S M_{\frac{3}{D_f}}^F + E^2 M_{-\frac{3}{2}}^S M_{\frac{6}{D_f}}^F \right. \\
& \left. + M_2^S M_{\frac{3}{2}}^F + 2 E M_1^S M_{\frac{6-3D_f}{2D_f}}^F + E^2 M_0^S M_{\frac{12-3D_f}{2D_f}}^F \right] \tag{A.6}
\end{aligned}$$

Afin de retrouver la forme compacte (équation 3.36) de l'équation d'évolution, nous effectuons ici aussi la substitution des moments d'ordre intermédiaires par la fonction α dans la formule A.6 pour finalement obtenir la relation suivante :

$$\begin{aligned}
\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{FM} &= b_0^{T1} K_{FM} r_{C_S}^{1/2} (p_0^{FM} - 2) \left[\alpha_S\left(\frac{1}{2}\right) + 2\alpha_S\left(-\frac{1}{2}\right) \alpha_S(1) + \alpha_S\left(-\frac{3}{2}\right) \alpha_S(2) \right] \\
& - b_0^{T4} K_{FM} \left[r_{C_S}^{1/2} \alpha_S\left(\frac{1}{2}\right) + 2 E r_{C_S}^{-1/2} r_{C_F}^{3/D_f} \alpha_S\left(-\frac{1}{2}\right) \alpha_F\left(\frac{3}{D_f}\right) \right. \\
& + E^2 r_{C_S}^{-3/2} r_{C_F}^{6/D_f} \alpha_S\left(-\frac{3}{2}\right) \alpha_F\left(\frac{6}{D_f}\right) + r_{C_S}^2 r_{C_F}^{-3/2} \alpha_S(2) \alpha_F\left(-\frac{3}{2}\right) \\
& \left. + 2 E r_{C_S} r_{C_F}^{\frac{6-3D_f}{2D_f}} \alpha_S(1) \alpha_F\left(\frac{6-3D_f}{2D_f}\right) + E^2 r_{C_F}^{\frac{12-3D_f}{2D_f}} \alpha_F\left(\frac{12-3D_f}{2D_f}\right) \right]
\end{aligned}$$

Ou encore :

$$\left. \frac{dM_0^S}{dt} \right|_{FM} = (p_0^{FM} - 2) \gamma_0^{SS,FM} \times M_0^{S^2} - \gamma_0^{SF,FM} \times M_0^S M_0^F$$

Pré-facteurs des équations de la coagulation

Cette courte section rassemble les expressions de tous les pré-facteurs (ainsi que leur coefficients) utilisés afin de simplifier les équations d'évolution de la loi de distribution en moments pour le processus de coagulation. L'ensemble de ces expressions contient des pré-facteurs communs et spécifiques au régime considéré que l'on se propose de rappeler. Les renvois de page font appel aux définitions complètes de ces pré-facteurs dans la section 3.3.1 du manuscrit :

Pré-facteurs spécifiques au régime considéré	
$K_{CO} = \frac{2kT}{3\eta}$	Pré-facteur « thermodynamique » pour le régime continu (p. 61).
$C = A \times \lambda_g$	Pré-facteur de transition de régime (p. 61).
$K_{FM} = \left(\frac{6kT}{\rho_p} \right)^{1/2}$	Pré-facteur « thermodynamique » pour le régime moléculaire (p. 63).
b_k	Coefficient de substitution pour l'expression de β dans le régime moléculaire (p. 63).
Pré-facteurs communs dans les relations	
$\alpha_S(x)$	Relation inter-moment de $n_S(r)$ (p. 46).
$\alpha_F(x)$	Relation inter-moment de $n_F(r)$.
$r_{C_S} = \left(\frac{1}{\alpha_S(3)} \frac{M_3^S}{M_0^S} \right)^{1/3}$	Rayon caractéristique de $n_S(r)$.
$r_{C_F} = \left(\frac{1}{\alpha_F(3)} \frac{M_3^F}{M_0^F} \right)^{1/3}$	Rayon caractéristique de $n_F(r)$.
D_f	Dimension fractale des aérosols.
$E = r_m^{\frac{D_f-3}{D_f}}$	Pré-facteur intervenant de la conversion rayon apparent \leftrightarrow rayon bulk (p. 53).

Régime continu

Les termes $\gamma_0^{SS,CO}$, $\gamma_0^{SF,CO}$, $\gamma_0^{FF,CO}$, $\gamma_3^{SS,CO}$ et $\gamma_3^{SF,CO}$ sont associés aux équations 3.32 à 3.35 (voir page 66) et s'écrivent de la manière suivante :

- $\gamma_0^{SS,CO} = \left[1 + \alpha_S(1) \alpha_S(-1) + \frac{C}{r_{C_S}} \left(\alpha_S(-1) + \alpha_S(1) \alpha_S(-2) \right) \right] \times K_{CO}$
- $\gamma_0^{SF,CO} = \left[2 + \alpha_S(1) r_{C_S} \alpha_F \left(-\frac{3}{D_f} \right) r_{C_F}^{-3/D_f} E^{-1} \right. \\ \left. + \alpha_S(1) r_{C_S}^{-1} \alpha_F \left(\frac{3}{D_f} \right) r_{C_F}^{3/D_f} E \right]$

$$\begin{aligned}
& + C \times \left(\alpha_S(-1) r_{C_S}^{-1} + \alpha_F\left(-\frac{3}{D_f}\right) r_{C_F}^{-3/D_f} E^{-1} \right. \\
& + \alpha_S(-2) r_{C_S}^{-2} \alpha_F\left(\frac{3}{D_f}\right) r_{C_F}^{3/D_f} E \\
& \left. + \alpha_S(1) r_{C_S} \alpha_F\left(-\frac{6}{D_f}\right) r_{C_F}^{-6/D_f} E^{-2} \right) \times K_{CO} \\
\bullet \quad \gamma_0^{FF,CO} & = \left[1 + \alpha_F\left(\frac{3}{D_f}\right) \alpha_F\left(-\frac{3}{D_f}\right) \right. \\
& \left. + C r_{C_F}^{-3/D_f} E^{-1} \left(\alpha_F\left(-\frac{3}{D_f}\right) + \alpha_F\left(\frac{3}{D_f}\right) \alpha_F\left(-\frac{6}{D_f}\right) \right) \right] \times K_{CO} \\
\bullet \quad \gamma_3^{SS,CO} & = \left[2\alpha_S(3) + \alpha_S(2) \alpha_S(1) + \alpha_S(4) \alpha_S(-1) \right. \\
& \left. + \frac{C}{r_{C_S}} \left(\alpha_S(1)^2 + \alpha_S(4) \alpha_S(-2) + \alpha_S(3) \alpha_S(-1) + \alpha_S(2) \right) \right] \\
& \times \frac{K_{CO}}{\alpha_S(3)^2 r_{C_S}^3} \\
\bullet \quad \gamma_3^{SF,CO} & = \left[2\alpha_S(3) r_{C_S}^3 + \alpha_S(4) r_{C_S}^4 \alpha_F\left(-\frac{3}{D_f}\right) r_{C_F}^{-3/D_f} E^{-1} \right. \\
& + \alpha_S(2) r_{C_S}^2 \alpha_F\left(\frac{3}{D_f}\right) r_{C_F}^{3/D_f} E \\
& + C \times \left(\alpha_S(2) r_{C_S}^2 + \alpha_S(3) r_{C_S}^3 \alpha_F\left(-\frac{3}{D_f}\right) r_{C_F}^{-3/D_f} E^{-1} \right. \\
& + \alpha_S(1) r_{C_S} \alpha_F\left(\frac{3}{D_f}\right) r_{C_F}^{3/D_f} E \\
& \left. \left. + \alpha_S(4) r_{C_S}^4 \alpha_F\left(-\frac{6}{D_f}\right) r_{C_F}^{-6/D_f} E^{-2} \right) \right] \times \frac{K_{CO}}{\alpha_S(3) \alpha_F(3) r_{C_S}^3 r_{C_F}^3}
\end{aligned}$$

Régime moléculaire

Les termes $\gamma_0^{SS,FM}$, $\gamma_0^{SF,FM}$, $\gamma_0^{FF,FM}$, $\gamma_3^{SS,FM}$ et $\gamma_3^{SF,FM}$ sont associés aux équations 3.36 à 3.39 (voir page 67) et s'écrivent de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
\bullet \quad \gamma_0^{SS,FM} & = \left[\alpha_S\left(\frac{1}{2}\right) + 2\alpha_S(1) \alpha_S\left(-\frac{1}{2}\right) + \alpha_S(2) \alpha_S\left(-\frac{3}{2}\right) \right] \times r_{C_S}^{1/2} b_0^{T1} K_{FM} \\
\bullet \quad \gamma_0^{SF,FM} & = \left[\alpha_S(1/2) r_{C_S}^{1/2} + 2 E \alpha_S\left(-\frac{1}{2}\right) r_{C_S}^{-1/2} \alpha_F\left(\frac{3}{D_f}\right) r_{C_F}^{3/D_f} \right. \\
& + E^2 \alpha_S\left(-\frac{3}{2}\right) r_{C_S}^{-3/2} \alpha_F\left(\frac{6}{D_f}\right) r_{C_F}^{6/D_f} \\
& \left. + \alpha_S(2) r_{C_S}^2 \alpha_F\left(-\frac{3}{2}\right) r_{C_F}^{-3/2} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + 2 E \alpha_S(1) r_{C_S} \alpha_F \left(\frac{6-3D_f}{2D_f} \right) r_{C_F}^{\frac{6-3D_f}{2D_f}} \\
 & + E^2 \alpha_F \left(\frac{12-3D_f}{2D_f} \right) r_{C_F}^{\frac{12-3D_f}{2D_f}} \left. \right] \times b_0^{T4} K_{FM} \\
 \bullet \quad \gamma_0^{FF,FM} & = \left[\alpha_F \left(\frac{12-3D_f}{2D_f} \right) + 2 \alpha_F \left(\frac{3}{D_f} \right) \alpha_F \left(\frac{6-3D_f}{2D_f} \right) + \alpha_F \left(-\frac{3}{2} \right) \alpha_F \left(\frac{6}{D_f} \right) \right] \\
 & \times r_{C_F}^{\frac{12-3D_f}{2D_f}} E^2 \times b_0^{T3} K_{FM} \\
 \bullet \quad \gamma_3^{SS,FM} & = \left[\alpha_S \left(\frac{7}{2} \right) + 2 \alpha_S(1) \alpha_S \left(\frac{5}{2} \right) + \alpha_S(2) \alpha_S \left(\frac{3}{2} \right) + \alpha_S(5) \alpha_S \left(-\frac{3}{2} \right) \right. \\
 & \left. + 2 \alpha_S(4) \alpha_S \left(-\frac{1}{2} \right) + \alpha_S(3) \alpha_S \left(\frac{1}{2} \right) \right] \times \frac{r_{C_S}^{1/2}}{\alpha_S(3)^2} b_3^{T4} K_{FM} \\
 \bullet \quad \gamma_3^{SF,FM} & = \left[\alpha_S \left(\frac{7}{2} \right) r_{C_S}^{7/2} + 2 E \alpha_S \left(\frac{5}{2} \right) r_{C_S}^{5/2} \alpha_F \left(\frac{3}{D_f} \right) r_{C_F}^{3/D_f} \right. \\
 & + E^2 \alpha_S \left(\frac{3}{2} \right) r_{C_S}^{3/2} \alpha_F \left(\frac{6}{D_f} \right) r_{C_F}^{6/D_f} + \alpha_S(5) r_{C_S}^5 \alpha_F \left(-\frac{3}{2} \right) r_{C_F}^{-3/2} \\
 & + 2 E \alpha_S(4) r_{C_S}^4 \alpha_F \left(\frac{6-3D_f}{2D_f} \right) r_{C_F}^{\frac{6-3D_f}{2D_f}} \\
 & \left. + E^2 \alpha_S(3) r_{C_S}^3 \alpha_F \left(\frac{12-3D_f}{2D_f} \right) r_{C_F}^{\frac{12-3D_f}{2D_f}} \right] \times \frac{b_3^{T4} K_{FM}}{\alpha_S(3) \alpha_F(3) r_{C_S}^3 r_{C_F}^3}
 \end{aligned}$$

Bibliographie

- Anderson, C. M., Samuelson, R. E., Apr. 2011. *Titan's aerosol and stratospheric ice opacities between 18 and 500 μm : Vertical and spectral characteristics from Cassini CIRS*. Icarus 212, 762–778.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2011.01.024>
(cf. p. 10)
- Barth, E. L., Toon, O. B., 2006. *Methane, ethane, and mixed clouds in Titan's atmosphere : Properties derived from microphysical modeling*. Icarus 182, 230–250.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2005.12.017>
(cf. p. 37 et 81)
- Borucki, W. J., Levin, Z., Whitten, R. C., Keesee, R. G., Capone, L. A., Summers, A. L., Toon, O. B., Dubach, J., Dec. 1987. *Predictions of the electrical conductivity and charging of the aerosols in Titan's atmosphere*. Icarus 72, 604–622.
[http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035\(87\)90056-X](http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035(87)90056-X)
(cf. p. 32 et 73)
- Cabane, M., Chassefiere, E., Israel, G., Apr. 1992. *Formation and growth of photochemical aerosols in Titan's atmosphere*. Icarus 96, 176–189.
[http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035\(92\)90071-E](http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035(92)90071-E)
(cf. p. 5, 6, 7 et 111)
- Cabane, M., Rannou, P., Chassefiere, E., Israel, G., Apr. 1993. *Fractal aggregates in Titan's atmosphere*. Planet. Space Sci. 41, 257–267.
[http://dx.doi.org/10.1016/0032-0633\(93\)90021-S](http://dx.doi.org/10.1016/0032-0633(93)90021-S)
(cf. p. 5, 6, 7, 15, 17, 29, 32, 90, 108 et 111)
- Charnay, B., Lebonnois, S., Feb. 2012. *Two boundary layers in Titan's lower troposphere inferred from a climate model*. Nature Geoscience 5, 106–109.
<http://dx.doi.org/10.1038/ngeo1374>
(cf. p. 109)
- Choukroun, M., Grasset, O., Tobie, G., Sotin, C., Feb. 2010. *Stability of methane clathrate hydrates under pressure : Influence on outgassing processes of methane on Titan*. Icarus 205, 581–593.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2009.08.011>
(cf. p. 10)

- Cours, T., Burgalat, J., Rannou, P., Rodriguez, S., Brahic, A., West, R. A., Jul. 2011. *Dual origin of aerosols in the Titan detached haze layer*. *Astro. Phys. Journal Let.* <http://dx.doi.org/10.1088/2041-8205/741/2/L32>
(cf. p. 110, 112, 113, 116, 117 et 118)
- Courtin, R., Gautier, D., McKay, C. P., Mar. 1995. *Titan's thermal emission spectrum : Reanalysis of the Voyager infrared measurements*. *Icarus* 114, 144–162.
<http://dx.doi.org/10.1006/icar.1995.1050>
(cf. p. 12)
- Coustenis, A., Bezar, B., May 1995. *Titan's atmosphere from Voyager infrared observations. IV : Latitudinal variations of temperature and composition*. *Icarus* 115, 126–140.
<http://dx.doi.org/10.1006/icar.1995.1084>
(cf. p. 110)
- Coustenis, A., Jennings, D. E., Nixon, C. A., Achterberg, R. K., Lavvas, P., Vinatier, S., Teanby, N. A., Bjoraker, G. L., Carlson, R. C., Piani, L., Bampasidis, G., Flasar, F. M., Romani, P. N., May 2010. *Titan trace gaseous composition from CIRS at the end of the Cassini-Huygens prime mission*. *Icarus* 207, 461–476.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2009.11.027>
(cf. p. 2)
- Crespin, A., Lebonnois, S., Vinatier, S., Bézard, B., Coustenis, A., Teanby, N. A., Achterberg, R. K., Rannou, P., Hourdin, F., Oct. 2008. *Diagnostics of Titan's stratospheric dynamics using Cassini/CIRS data and the 2-dimensional IPSL circulation model*. *Icarus* 197, 556–571.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2008.05.010>
(cf. p. 122)
- Danielson, R. E., Caldwell, J. J., Larach, D. R., Dec. 1973. *An Inversion in the Atmosphere of Titan*. *Icarus* 20, 437.
[http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035\(73\)90016-X](http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035(73)90016-X)
(cf. p. 4)
- Elachi, C., Wall, S., Janssen, M., Stofan, E., Lopes, R., Kirk, R., Lorenz, R., Lunine, J., Paganelli, F., Soderblom, L., Wood, C., Wye, L., Zebker, H., Anderson, Y., Ostro, S., Allison, M., Boehmer, R., Callahan, P., Encrenaz, P., Flamini, E., Francescetti, G., Gim, Y., Hamilton, G., Hensley, S., Johnson, W., Kelleher, K., Muhleman, D., Picardi, G., Posa, F., Roth, L., Seu, R., Shaffer, S., Stiles, B., Vetrilla, S., West, R., Aug. 2006. *Corrigendum : Titan Radar Mapper observations from Cassini's T₃ fly-by*. *Nature* 442, 594.
<http://dx.doi.org/10.1038/nature05004>
(cf. p. 2)
- Evans, K. F., Feb. 1998. *The Spherical Harmonics Discrete Ordinate Method for Three-Dimensional Atmospheric Radiative Transfer*. *J. of Atm. Sci.* 55, 429–446.
[http://dx.doi.org/10.1175/1520-0469\(1998\)055<0429:TSHDOM>2.0.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0469(1998)055<0429:TSHDOM>2.0.CO;2)
(cf. p. 112)

- Fletcher, N. H., 1958. *Size Effect in Heterogeneous Nucleation*. The Journal of Chemical Physics 29, 572–576.
<http://dx.doi.org/10.1063/1.1744540>
(cf. p. 36)
- Friedlander, S. K., 2000. *Smoke, Dust, and Haze : Fundamentals of Aerosol Dynamics*, 2nd Edition. Oxford University Press, USA.
(cf. p. 63)
- Fuchs, N. A., 1964. *The Mechanics of Aerosols*. Dover Publications.
(cf. p. 15, 31, 32, 53, 61, 67, 69 et 83)
- Fuchs, N. A., Sutugin, A. G., 1971. *High-dispersed aerosols*. Pergamon Press.
(cf. p. 38)
- Fulchignoni, M., Ferri, F., Angrilli, F., Ball, A. J., Bar-Nun, A., Barucci, M. A., Bettanini, C., Bianchini, G., Borucki, W., Colombatti, G., Coradini, M., Cous-tenis, A., Debei, S., Falkner, P., Fanti, G., Flamini, E., Gaborit, V., Grard, R., Hamelin, M., Harri, A. M., Hathi, B., Jernej, I., Leese, M. R., Lehto, A., Lion Stoppato, P. F., López-Moreno, J. J., Mäkinen, T., McDonnell, J. A. M., McKay, C. P., Molina-Cuberos, G., Neubauer, F. M., Pirronello, V., Rodrigo, R., Saggin, B., Schwingenschuh, K., Seiff, A., Simões, F., Svedhem, H., Tokano, T., Towner, M. C., Trautner, R., Withers, P., Zarnecki, J. C., dec 2005. *In situ measurements of the physical characteristics of Titan's environment*. Nature 438, 785–791.
<http://dx.doi.org/10.1038/nature04314>
(cf. p. 1)
- Gelbard, F., Tambour, Y., Seinfeld, J. H., 1980. *Sectional representations for simulating aerosol dynamics*. J. Colloid Interface Sci. 76, 541–556.
[http://dx.doi.org/10.1016/0021-9797\(80\)90394-X](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9797(80)90394-X)
(cf. p. 41)
- Gierasch, P. J., June 1975. *Meridional Circulation and the Maintenance of the Venus Atmospheric Rotation*. J. of Atm. Sci. 32 (6), 1038–1044.
[http://dx.doi.org/10.1175/1520-0469\(1975\)032<1038:MCATMO>2.0.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0469(1975)032<1038:MCATMO>2.0.CO;2)
(cf. p. 107)
- Griffith, C. A., Hall, J. L., Geballe, T. R., Oct. 2000. *Detection of Daily Clouds on Titan*. Science 290, 509–513.
<http://dx.doi.org/10.1126/science.290.5491.509>
(cf. p. 1)
- Griffith, C. A., Owen, T., Miller, G. A., Geballe, T., Oct. 1998. *Transient clouds in Titan's lower atmosphere*. Nature 395, 575–578.
<http://dx.doi.org/10.1038/26920>
(cf. p. 1 et 109)
- Griffith, C. A., Penteado, P., Baines, K., Drossart, P., Barnes, J., Bellucci, G., Bibring, J., Brown, R., Buratti, B., Capaccioni, F., Cerroni, P., Clark, R., Combes, M., Coradini, A., Cruikshank, D., Formisano, V., Jaumann, R., Langevin, Y., Matson, D., McCord, T., Mennella, V., Nelson, R., Nicholson, P., Sicardy, B.,

- Sotin, C., Soderblom, L. A., Kursinski, R., Oct. 2005. *The Evolution of Titan's Mid-Latitude Clouds*. *Science* 310, 474–477.
<http://dx.doi.org/10.1126/science.1117702>
(cf. p. 1, 10, 13 et 109)
- Griffith, C. A., Penteado, P., Rannou, P., Brown, R., Boudon, V., Baines, K. H., Clark, R., Drossart, P., Buratti, B., Nicholson, P., McKay, C. P., Coustenis, A., Negrão, A., Jaumann, R., Sep. 2006. *Evidence for a Polar Ethane Cloud on Titan*. *Science* 313, 1620–1622.
<http://dx.doi.org/10.1126/science.1128245>
(cf. p. 1 et 109)
- Hirtzig, M., Coustenis, A., Gendron, E., Drossart, P., Negrão, A., Combes, M., Lai, O., Rannou, P., Lebonnois, S., Luz, D., Sep. 2006. *Monitoring atmospheric phenomena on Titan*. *Astronomy and Astrophysics* 456, 761–774.
<http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20053381>
(cf. p. 99 et 101)
- Holton, J. R., 1992. *An introduction to dynamic meteorology*, 3rd Edition. Academic Press, San Diego.
(cf. p. 119)
- Hourdin, F., Musat, I., Bony, S., Braconnot, P., Codron, F., Dufresne, J.-L., Fairhead, L., Filiberti, M.-A., Friedlingstein, P., Grandpeix, J.-Y., Krinner, G., LeVan, P., Li, Z.-X., Lott, F., 2006. *The LMDZ4 general circulation model : climate performance and sensitivity to parametrized physics with emphasis on tropical convection*. *Climate Dynamics* 27, 787–813.
<http://dx.doi.org/10.1007/s00382-006-0158-0>
(cf. p. 109)
- Hourdin, F., Talagrand, O., Sadourny, R., Courtin, R., Gautier, D., McKay, C. P., Oct. 1995. *Numerical simulation of the general circulation of the atmosphere of Titan*. *Icarus* 117, 358–374.
<http://dx.doi.org/10.1006/icar.1995.1162>
(cf. p. 107)
- Hubbard, W. B., Sicardy, B., Miles, R., Hollis, A. J., Forrest, R. W., Nicolson, I. K. M., Appleby, G., Beisker, W., Bittner, C., Bode, H.-J., Bruns, M., Denzau, H., Nezel, M., Riedel, E., Struckmann, H., Arlot, J. E., Roques, F., Sevre, F., Thuillot, W., Hoffmann, M., Geyer, E. H., Buil, C., Colas, F., Lecacheux, J., Klotz, A., Thouvenot, E., Vidal, J. L., Carreira, E., Rossi, F., Blanco, C., Cristaldi, S., Nevo, Y., Reitsema, H. J., Brosch, N., Cernis, K., Zdanavicius, K., Wasserman, L. H., Hunten, D. M., Gautier, D., Lellouch, E., Yelle, R. V., Rizk, B., Flasar, F. M., Porco, C. C., Toubanc, D., Corugedo, G., Mar. 1993. *The occultation of 28 SGR by Titan*. *Astronomy and Astrophysics* 269, 541–563.
http://cdsads.u-strasbg.fr/cgi-bin/bib_query?1993A%26A...269..541H
(cf. p. 108)
- Hutzell, W. T., McKay, C. P., Toon, O. B., Hourdin, F., 1996. *Simulations of Titan's Brightness by a Two-Dimensional Haze Model*. *Icarus* 119 (1), 112–129.

- <http://dx.doi.org/10.1006/icar.1996.0005>
(cf. p. 114)
- Imanaka, H., Cruikshank, D. P., Khare, B. N., McKay, C. P., 2012. *Optical constants of Titan tholins at mid-infrared wavelengths (2.5–25 μm) and the possible chemical nature of Titan's haze particles*. Icarus 218 (1), 247 – 261.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2011.11.018>
(cf. p. 4)
- Jennings, D. E., Flasar, F. M., Kunde, V. G., Samuelson, R. E., Pearl, J. C., Nixon, C. A., Carlson, R. C., Mamoutkine, A. A., Brasunas, J. C., Guandique, E., Achterberg, R. K., Bjoraker, G. L., Romani, P. N., Segura, M. E., Albright, S. A., Elliott, M. H., Tingley, J. S., Calcutt, S., Coustenis, A., Courtin, R., Feb. 2009. *Titan's Surface Brightness Temperatures*. Astro. Phys. Journal Let. 691, L103–L105.
<http://dx.doi.org/10.1088/0004-637X/691/2/L103>
(cf. p. 1, 131 et 134)
- Jullien, R., Oct. 1984. *Transparency effects in cluster-cluster aggregation with linear trajectories*. J. Phys. A : Math. Gen. 17, L771.
<http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/17/14/009>
(cf. p. 6)
- Keesee, R. G., 1989. *Nucleation and Particle Formation in the Upper Atmosphere*. J. Geophys. Res. 94, 14683–14692.
<http://dx.doi.org/10.1029/JD094iD12p14683>
(cf. p. 36)
- Khare, B. N., Sagan, C., Arakawa, E. T., Suits, F., Callcott, T. A., Williams, M. W., Oct. 1984. *Optical constants of organic tholins produced in a simulated Titanian atmosphere - From soft X-ray to microwave frequencies*. Icarus 60, 127–137.
[http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035\(84\)90142-8](http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035(84)90142-8)
(cf. p. 4)
- Kim, Y. P., Seinfeld, J. H., 1990. *Simulation of multicomponent aerosol condensation by the moving sectional method*. J. Colloid Interface Sci. 135, 185–199.
[http://dx.doi.org/10.1016/0021-9797\(90\)90299-4](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9797(90)90299-4)
(cf. p. 41)
- Kuiper, G. P., Nov. 1944. *Titan : a Satellite with an Atmosphere*. Astro. Phys. Journal 100, 378.
[http://dx.doi.org/10.1016/0083-6656\(56\)90090-3](http://dx.doi.org/10.1016/0083-6656(56)90090-3)
(cf. p. 4)
- Kunde, V. G., Aikin, A. C., Hanel, R. A., Jennings, D. E., Maguire, W. C., Samuelson, R. E., Aug. 1981. *C_4H_2 , HC_3N and C_2N_2 in Titan's atmosphere*. Nature 292, 686–688.
<http://dx.doi.org/10.1038/292686a0>
(cf. p. 2)

- Lavvas, P., Griffith, C. A., Yelle, R. V., Oct. 2011. *Condensation in Titan's atmosphere at the Huygens landing site*. Icarus 215, 732–750.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2011.06.040>
(cf. p. 37)
- Lavvas, P., Yelle, R. V., Vuitton, V., Jun. 2009. *The detached haze layer in Titan's mesosphere*. Icarus 201, 626–633.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2009.01.004>
(cf. p. 114)
- Lavvas, P. P., Coustenis, A., Vardavas, I. M., jan 2008. *Coupling photochemistry with haze formation in Titan's atmosphere, Part II : Results and validation with Cassini/Huygens data*. Planet. Space Sci. 56, 67–99.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.pss.2007.05.027>
(cf. p. 32)
- Le Mouélic, S., Rannou, P., Rodriguez, S., Sotin, C., Griffith, C. A., Corre, L. L., Barnes, J. W., Brown, R. H., Baines, K. H., Buratti, B. J., Clark, R. N., Nicholson, P. D., Tobie, G., 2012. *Dissipation of Titan's north polar cloud at northern spring equinox*. Planet. Space Sci. 60 (1), 86 – 92.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.pss.2011.04.006>
(cf. p. 109 et 131)
- Lebonnois, S., Burgalat, J., Rannou, P., Charnay, B., 2012. *Titan global climate model : A new 3-dimensional version of the IPSL Titan GCM*. Icarus 218, 707–722.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2011.11.032>
(cf. p. 109, 127, 134 et 141)
- Lebonnois, S., Hourdin, F., Rannou, P., Luz, D., Toubanc, D., May 2003. *Impact of the seasonal variations of composition on the temperature field of Titan's stratosphere*. Icarus 163, 164–174.
[http://dx.doi.org/10.1016/S0019-1035\(03\)00074-5](http://dx.doi.org/10.1016/S0019-1035(03)00074-5)
(cf. p. 108 et 110)
- Lebonnois, S., Toubanc, D., Hourdin, F., Rannou, P., Aug. 2001. *Seasonal Variations of Titan's Atmospheric Composition*. Icarus 152, 384–406.
<http://dx.doi.org/10.1006/icar.2001.6632>
(cf. p. 108)
- Lee, K. W., Chen, H., 1984. *Coagulation Rate of Polydisperse Particles*. Aerosol Science and Technology 3, 327–334.
<http://dx.doi.org/10.1080/02786828408959020>
(cf. p. 51)
- Lee, K. W., Chen, J., Gieseke, J. A., 1984. *Log-Normally Preserving Size Distribution for Brownian Coagulation in the Free-Molecule Regime*. Aerosol Science and Technology 3, 53–62.
<http://dx.doi.org/10.1080/02786828408958993>
(cf. p. 51 et 63)

- Liang, M.-C., Yung, Y. L., Shemansky, D. E., 2007. *Photolytically Generated Aerosols in the Mesosphere and Thermosphere of Titan*. *Astro. Phys. Journal Let.* 661 (2), L199.
<http://dx.doi.org/10.1086/518785>
(cf. p. 114)
- Lorenz, R. D., Griffith, C. A., Lunine, J. I., McKay, C. P., Rennò, N. O., Jan. 2005. *Convective plumes and the scarcity of Titan's clouds*. *Geophys. Res. Let.* 320, L01201.
<http://dx.doi.org/10.1029/2004GL021415>
(cf. p. 13)
- Lorenz, R. D., Mitchell, K. L., Kirk, R. L., Hayes, A. G., Aharonson, O., Zebker, H. A., Paillou, P., Radebaugh, J., Lunine, J. I., Janssen, M. A., Wall, S. D., Lopes, R. M., Stiles, B., Ostro, S., Mitri, G., Stofan, E. R., Jan. 2008. *Titan's inventory of organic surface materials*. *Geophys. Res. Let.* 35, 2206.
<http://dx.doi.org/10.1016/10.1029/2007GL032118>
(cf. p. 10)
- Luz, D., Hourdin, F., Dec. 2003. *Latitudinal transport by barotropic waves in Titan's stratosphere. I. General properties from a horizontal shallow-water model*. *Icarus* 166, 328–342.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2003.08.015>
(cf. p. 108)
- Luz, D., Hourdin, F., Rannou, P., Lebonnois, S., Dec. 2003. *Latitudinal transport by barotropic waves in Titan's stratosphere. II. Results from a coupled dynamics-microphysics-photochemistry GCM*. *Icarus* 166, 343–358.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2003.08.014>
(cf. p. 108)
- Maguire, W. C., Hanel, R. A., Jennings, D. E., Kunde, V. G., Samuelson, R. E., Aug. 1981. *C₃H₈ and C₃H₄ in Titan's atmosphere*. *Nature* 292, 683–686.
<http://dx.doi.org/10.1038/292683a0>
(cf. p. 2)
- Mann, G. W., Carslaw, K. S., Spracklen, D. V., Ridley, D. A., Manktelow, P. T., Chipperfield, M. P., Pickering, S. J., Johnson, C. E., 2010. *Description and evaluation of GLOMAP-mode : a modal global aerosol microphysics model for the UKCA composition-climate model*. *Geos. Mod. Dev.* 3 (2), 519–551.
<http://dx.doi.org/10.5194/gmd-3-519-2010>
(cf. p. 52)
- McKay, C. P., Pollack, J. B., Courtin, R., Jul. 1989. *The thermal structure of Titan's atmosphere*. *Icarus* 80, 23–53.
[http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035\(89\)90160-7](http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035(89)90160-7)
(cf. p. 2, 12, 32, 114 et 128)
- Meakin, P., Feb. 1984. *Effects of cluster trajectories on cluster-cluster aggregation : A comparison of linear and Brownian trajectories in two- and three-dimensional simulations*. *Phys. Rev. A* 29, 997–999.

- <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.29.997>
(cf. p. 6)
- Mellor, G. L., Yamada, T., 1982. *Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems*. Rev. Geophys. 20 (4), 851–875.
<http://dx.doi.org/10.1029/RG020i004p00851>
(cf. p. 134)
- Millikan, R. A., Jul 1923. *The General Law of Fall of a Small Spherical Body through a Gas, and its Bearing upon the Nature of Molecular Reflection from Surfaces*. Phys. Rev. 22, 1–23.
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.22.1>
(cf. p. 27)
- Mitchell, J. L., Adamkovics, M., Caballero, R., Turtle, E. P., Aug. 2011. *Locally enhanced precipitation organized by planetary-scale waves on Titan*. Nature Geoscience Let., 589–592.
<http://dx.doi.org/10.1038/ngeo1219>
(cf. p. 127, 128, 129, 130 et 131)
- Mitchell, J. L., Pierrehumbert, R. T., Frierson, D. M. W., Caballero, R., 2006. *The dynamics behind Titan's methane clouds*. Proceedings of the National Academy of Sciences 103 (49), 18421–18426.
<http://dx.doi.org/10.1073/pnas.0605074103>
(cf. p. 128, 129 et 130)
- Niemann, H. B., Atreya, S. K., Bauer, S. J., Carignan, G. R., Demick, J. E., Frost, R. L., Gautier, D., Haberman, J. A., Harpold, D. N., Hunten, D. M., Israel, G., Lunine, J. I., Kasprzak, W. T., Owen, T. C., Paulkovich, M., Raulin, F., Raean, E., Way, S. H., Dec. 2005. *The abundances of constituents of Titan's atmosphere from the GCMS instrument on the Huygens probe*. Nature 438, 779–784.
<http://dx.doi.org/10.1038/nature04122>
(cf. p. 1)
- Park, S. H., Lee, K. W., Otto, E., Fissan, H., 1999. *The log-normal size distribution theory of brownian aerosol coagulation for the entire particle size range : Part I-analytical solution using the harmonic mean coagulation kernel*. J. Aerosol Sci. 30, 3–16.
[http://dx.doi.org/10.1016/S0021-8502\(98\)00037-8](http://dx.doi.org/10.1016/S0021-8502(98)00037-8)
(cf. p. 52, 53, 62, 67, 70 et 78)
- Porco, C. C., Baker, E., Barbara, J., Beurle, K., Brahic, A., Burns, J. A., Charnoz, S., Cooper, N., Dawson, D. D., Del Genio, A. D., Denk, T., Dones, L., Dyudina, U., Evans, M. W., Fussner, S., Giese, B., Grazier, K., Helfenstein, P., Ingersoll, A. P., Jacobson, R. A., Johnson, T. V., McEwen, A., Murray, C. D., Neukum, G., Owen, W. M., Perry, J., Roatsch, T., Spitale, J., Squyres, S., Thomas, P., Tiscareno, M., Turtle, E. P., Vasavada, A. R., Veverka, J., Wagner, R., West, R., Mar. 2005. *Imaging of Titan from the Cassini spacecraft*. Nature 434, 159–168.
<http://dx.doi.org/10.1038/nature03436>
(cf. p. 1 et 10)

-
- Pratsinis, S. E., 1988. *Simultaneous nucleation, condensation, and coagulation in aerosol reactors*. J. Colloid Interface Sci. 124, 416–427.
[http://dx.doi.org/10.1016/0021-9797\(88\)90180-4](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9797(88)90180-4)
(cf. p. 52 et 53)
- Pruppacher, H. R., Klett, J. D., 1978. *Microphysics of clouds and precipitation*. D. Reidel Publishing Company.
<http://dx.doi.org/10.1007/978-0-306-48100-0>
(cf. p. 15, 31, 32, 34, 35 et 73)
- Rages, K., Pollack, J. B., Jan. 1980. *Titan aerosols - Optical properties and vertical distribution*. Icarus 41, 119–130.
[http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035\(80\)90164-5](http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035(80)90164-5)
(cf. p. 4)
- Rages, K., Pollack, J. B., Jul. 1983. *Vertical distribution of scattering hazes in Titan's upper atmosphere*. Icarus 55, 50–62.
[http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035\(83\)90049-0](http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035(83)90049-0)
(cf. p. 5, 110, 111 et 112)
- Rages, K., Pollack, J. B., Smith, P. H., Nov. 1983. *Size estimates of Titan's aerosols based on Voyager high-phase-angle images*. J. Geophys. Res. 88, 8721–8728.
<http://dx.doi.org/10.1029/JA088iA11p08721>
(cf. p. 111)
- Rannou, P., Cabane, M., Chassefiere, E., May 1993. *Growth of aerosols in Titan's atmosphere and related time scales - A stochastic approach*. Geophys. Res. Lett. 20, 967–970.
<http://dx.doi.org/10.1029/93GL00911>
(cf. p. 114)
- Rannou, P., Cours, T., Le Mouélic, S., Rodriguez, S., Sotin, C., Drossart, P., Brown, R., Aug. 2010. *Titan haze distribution and optical properties retrieved from recent observations*. Icarus 208, 850–867.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2010.03.016>
(cf. p. 116)
- Rannou, P., Hourdin, F., McKay, C. P., Aug. 2002. *A wind origin for Titan's haze structure*. Nature 418, 853–856.
<http://dx.doi.org/10.1038/nature00961>
(cf. p. 108, 109, 111 et 119)
- Rannou, P., Hourdin, F., McKay, C. P., Luz, D., Aug. 2004. *A coupled dynamics-microphysics model of Titan's atmosphere*. Icarus 170, 443–462.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2004.03.007>
(cf. p. 12, 17, 18, 108, 119 et 138)
- Rannou, P., McKay, C. P., Lorenz, R. D., dec 2003. *A model of Titan's haze of fractal aerosols constrained by multiple observations*. Planet. Space Sci. 51, 963–976.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.pss.2003.05.008>
(cf. p. 32)

- Rannou, P., Montmessin, F., Hourdin, F., Lebonnois, S., Jan. 2006. *The Latitudinal Distribution of Clouds on Titan*. Science 311, 201–205.
<http://dx.doi.org/10.1126/science.1118424>
(cf. p. 10, 37, 81, 90, 109, 123, 124, 127, 128, 130, 131, 132, 133 et 135)
- Rodriguez, S., Le Mouélic, S., Rannou, P., Sotin, C., Brown, R. H., Barnes, J. W., Griffith, C. A., Burgalat, J., Baines, K. H., Buratti, B. J., Clark, R. N., Nicholson, P. D., Nov. 2011. *Titan's cloud seasonal activity from winter to spring with Cassini/VIMS*. Icarus 216, 89–110.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2011.07.031>
(cf. p. 1 et 122)
- Rodriguez, S., Le Mouélic, S., Rannou, P., Tobie, G., Baines, K. H., Barnes, J. W., Griffith, C. A., Hirtzig, M., Pitman, K. M., Sotin, C., Brown, R. H., Buratti, B. J., Clark, R. N., Nicholson, P. D., Jun. 2009. *Global circulation as the main source of cloud activity on Titan*. Nature 459, 678–682.
<http://dx.doi.org/10.1038/nature08014>
(cf. p. 1, 10, 11, 109, 122 et 131)
- Roe, H. G., Brown, M. E., Schaller, E. L., Bouchez, A. H., Trujillo, C. A., Oct. 2005. *Geographic Control of Titan's Mid-Latitude Clouds*. Science 310, 477–479.
<http://dx.doi.org/10.1126/science.1116760>
(cf. p. 1 et 109)
- Roe, H. G., de Pater, I., Macintosh, B. A., McKay, C. P., Dec. 2002. *Titan's Clouds from Gemini and Keck Adaptive Optics Imaging*. Astro. Phys. Journal 581, 1399–1406.
<http://dx.doi.org/10.1086/344403>
(cf. p. 1 et 109)
- Samuelson, R. E., Mayo, L. A., Jun. 1991. *Thermal infrared properties of Titan's stratospheric aerosol*. Icarus 91, 207–219.
[http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035\(91\)90019-P](http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035(91)90019-P)
(cf. p. 12)
- Schneider, T., Graves, S. D. B., Schaller, E. L., Brown, M. E., Jan. 2012. *Polar methane accumulation and rainstorms on Titan from simulations of the methane cycle*. Nature 481, 58–61.
<http://dx.doi.org/10.1038/nature10666>
(cf. p. 127, 128, 129, 130 et 131)
- Seigneur, C., Hudischewskyj, A. B., Seinfeld, J. H., Whitby, K. T., Whitby, E. R., Brock, J. R., Barnes, H. M., 1986. *Simulation of Aerosol Dynamics : A Comparative Review of Mathematical Models*. Aerosol Sci. Technol. 5, 205–222.
<http://dx.doi.org/10.1080/02786828608959088>
(cf. p. 41 et 42)
- Sicardy, B., Colas, F., Widemann, T., Bellucci, A., Beisker, W., Kretlow, M., Ferri, F., Lacour, S., Lecacheux, J., Lellouch, E., Pau, S., Renner, S., Roques, F., Fienga, A., Etienne, C., Martinez, C., Glass, I. S., Baba, D., Nagayama, T., Nagata, T., Itting-Enke, S., Bath, K.-L., Bode, H.-J., Bode, F., Lüdemann, H., Lüdemann,

- J., Neubauer, D., Tegtmeier, A., Tegtmeier, C., Thomé, B., Hund, F., deWitt, C., Fraser, B., Jansen, A., Jones, T., Schoenau, P., Turk, C., Meintjies, P., Hernandez, M., Fiel, D., Frappa, E., Peyrot, A., Teng, J. P., Vignand, M., Hesler, G., Payet, T., Howell, R. R., Kidger, M., Ortiz, J. L., Naranjo, O., Rosenzweig, P., Rapaport, M., Nov. 2006. *The two Titan stellar occultations of 14 November 2003*. J. Geophys. Res. 111, 11.
<http://dx.doi.org/10.1029/2005JE002624>
(cf. p. 122)
- Smith, B. A., Soderblom, L., Batson, R. M., Bridges, P. M., Inge, J. L., Masursky, H., Shoemaker, E., Beebe, R. F., Boyce, J., Briggs, G., Bunker, A., Collins, S. A., Hansen, C., Johnson, T. V., Mitchell, J. L., Terrile, R. J., Cook, A. F., Cuzzi, J. N., Pollack, J. B., Danielson, G. E., Ingersoll, A. P., Davies, M. E., Hunt, G. E., Morrison, D., Owen, T., Sagan, C., Veverka, J., Strom, R., Suomi, V. E., Jan. 1982. *A new look at the Saturn system - The Voyager 2 images*. Science 215, 504–537.
<http://dx.doi.org/10.1126/science.215.4532.504>
(cf. p. 2)
- Smith, B. A., Soderblom, L., Beebe, R. F., Boyce, J. M., Briggs, G., Bunker, A., Collins, S. A., Hansen, C., Johnson, T. V., Mitchell, J. L., Terrile, R. J., Carr, M. H., Cook, A. F., Cuzzi, J. N., Pollack, J. B., Danielson, G. E., Ingersoll, A. P., Davies, M. E., Hunt, G. E., Masursky, H., Shoemaker, E. M., Morrison, D., Owen, T., Sagan, C., Veverka, J., Strom, R., Suomi, V. E., Apr. 1981. *Encounter with Saturn - Voyager 1 imaging science results*. Science 212, 163–191.
<http://dx.doi.org/10.1126/science.212.4491.163>
(cf. p. 2)
- Stofan, E. R., Elachi, C., Lunine, J. I., Lorenz, R. D., Stiles, B., Mitchell, K. L., Ostro, S., Soderblom, L., Wood, C., Zebker, H., Wall, S., Janssen, M., Kirk, R., Lopes, R., Paganelli, F., Radebaugh, J., Wye, L., Anderson, Y., Allison, M., Boehmer, R., Callahan, P., Encrenaz, P., Flamini, E., Francescetti, G., Gim, Y., Hamilton, G., Hensley, S., Johnson, W. T. K., Kelleher, K., Muhleman, D., Paillou, P., Picardi, G., Posa, F., Roth, L., Seu, R., Shaffer, S., Vetrella, S., West, R., Jan. 2007. *The lakes of Titan*. Nature 445, 61–64.
<http://dx.doi.org/10.1038/nature05438>
(cf. p. 1 et 10)
- Tobie, G., Lunine, J. I., Sotin, C., Mar. 2006. *Episodic outgassing as the origin of atmospheric methane on Titan*. Nature 440, 61–64.
<http://dx.doi.org/10.1038/nature04497>
(cf. p. 10)
- Tokano, T., McKay, C. P., Neubauer, F. M., Atreya, S. K., Ferri, F., Fulchignoni, M., Niemann, H. B., Jul. 2006. *Methane drizzle on Titan*. Nature 442, 432–435.
<http://dx.doi.org/10.1038/nature04948>
(cf. p. 10, 13 et 81)
- Tomasko, M. G., Archinal, B., Becker, T., Bézard, B., Bushroee, M., Combes, M., Cook, D., Coustenis, A., de Bergh, C., Dafoe, L. E., Doose, L., Douté, S., Eibl, A.,

- Engel, S., Gliem, F., Grieger, B., Holso, K., Howington-Kraus, E., Karkoschka, E., Keller, H. U., Kirk, R., Kramm, R., Küppers, M., Lanagan, P., Lellouch, E., Lemmon, M., Lunine, J., McFarlane, E., Moores, J., Prout, G. M., Rizk, B., Rosiek, M., Rueffer, P., Schröder, S. E., Schmitt, B., See, C., Smith, P., Soderblom, L., Thomas, N., West, R., Dec. 2005. *Rain, winds and haze during the Huygens probe's descent to Titan's surface*. *Nature* 438, 765–778.
<http://dx.doi.org/10.1038/nature04126>
(cf. p. 2)
- Tomasko, M. G., Doose, L., Engel, S., Dafoe, L. E., West, R., Lemmon, M., Karkoschka, E., See, C., Apr. 2008. *A model of Titan's aerosols based on measurements made inside the atmosphere*. *Planet. Space Sci.* 56, 669–707.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.pss.2007.11.019>
(cf. p. 7, 8 et 9)
- Tomasko, M. G., Doose, L. R., Dafoe, L. E., See, C., 11 2009. *Limits on the size of aerosols from measurements of linear polarization in Titan's atmosphere*. *Icarus* 204 (1), 271–283.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2009.05.034>
(cf. p. 7, 8 et 113)
- Tomasko, M. G., Smith, P. H., Jul. 1982. *Photometry and polarimetry of Titan - Pioneer 11 observations and their implications for aerosol properties*. *Icarus* 51, 65–95.
[http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035\(82\)90030-6](http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035(82)90030-6)
(cf. p. 5 et 111)
- Toon, O. B., Turco, R. P., Westphal, D., Malone, R., Liu, M. S., 1988. *A multidimensional model for aerosols - Description of computational analogs*. *J. of Atm. Sci.* 45, 2123–2143.
[http://dx.doi.org/10.1175/1520-0469\(1988\)045<2123:AMMFAD>2.0.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0469(1988)045<2123:AMMFAD>2.0.CO;2)
(cf. p. 2 et 17)
- Veverka, J., Apr. 1973. *Titan : Polarimetric Evidence for an Optically Thick Atmosphere*. *Icarus* 18, 657.
[http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035\(73\)90069-9](http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035(73)90069-9)
(cf. p. 4)
- Vignati, E., Wilson, J., Stier, P., 11 2004. *M7 : An efficient size-resolved aerosol microphysics module for large-scale aerosol transport models*. *J. Geophys. Res.* 109 (D22).
<http://dx.doi.org/10.1029/2003JD004485>
(cf. p. 52)
- Vinatier, S., Rannou, P., Anderson, C. M., Bézard, B., de Kok, R., Samuelson, R. E., 2012. *Optical constants of Titan's stratospheric aerosols in the 70-1500 cm⁻¹ spectral range constrained by Cassini/CIRS observations*. *Icarus* 219, 5–12.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2012.02.009>
(cf. p. 116)

-
- Waite, J. H., Niemann, H., Yelle, R. V., Kasprzak, W. T., Cravens, T. E., Luhmann, J. G., McNutt, R. L., Ip, W.-H., Gell, D., De La Haye, V., Müller-Wordag, I., Magee, B., Borggren, N., Ledvina, S., Fletcher, G., Walter, E., Miller, R., Scherer, S., Thorpe, R., Xu, J., Block, B., Arnett, K., May 2005. *Ion Neutral Mass Spectrometer Results from the First Flyby of Titan*. *Science* 308, 982–986.
<http://dx.doi.org/10.1126/science.1110652>
(cf. p. 2)
- West, R. A., Dec. 1991. *Optical properties of aggregate particles whose outer diameter is comparable to the wavelength*. *App. Optics* 30, 5316–5324.
<http://dx.doi.org/10.1364/AO.30.005316>
(cf. p. 111)
- West, R. A., Balloch, J., Dumont, P., Lavvas, P., Lorenz, R., Rannou, P., Ray, T., Turtle, E. P., Mar. 2011. *The evolution of Titan's detached haze layer near equinox in 2009*. *Geophys. Res. Lett.* 38, 6204.
<http://dx.doi.org/10.1029/2011GL046843>
(cf. p. 112)
- West, R. A., Smith, P. H., Apr. 1991. *Evidence for aggregate particles in the atmospheres of Titan and Jupiter*. *Icarus* 90, 330–333.
[http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035\(91\)90113-8](http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035(91)90113-8)
(cf. p. 5 et 111)
- Whitby, E. R., McMurry, P. H., 1997. *Modal Aerosol Dynamics Modeling*. *Aerosol Sci. Technol.* 27, 673–688.
<http://dx.doi.org/10.1080/02786829708965504>
(cf. p. 41, 52 et 55)
- Witten, T. A., Sander, L. M., Nov. 1981. *Diffusion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon*. *Phys. Rev. Lett.* 47, 1400–1403.
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.47.1400>
(cf. p. 6)