



DIENSTEN VAN DE EERSTE MINISTER
PROGRAMMATIE VAN HET WETENSCHAPSBELEID
Wetenschapsstraat 8
1040 BRUSSEL
BELGIE

NATIONAAL ONDERZOEKS- EN
ONTWIKKELINGSPROGRAMMA

LEEFMILIEU

WATER

PROJEKT ZEE

Eindverslag

Boekdeel 5

DISPERSIE MODELLEN

uitgevoerd door

Jacques C.J. NIHOUL en Yves ADAM



SERVICES DU PREMIER MINISTRE
PROGRAMMATION DE LA POLITIQUE SCIENTIFIQUE
Rue de la Science, 8
1040 BRUXELLES
BELGIQUE

PROGRAMME NATIONAL DE RECHERCHE
ET DE DEVELOPPEMENT

ENVIRONNEMENT

EAU

PROJET MER

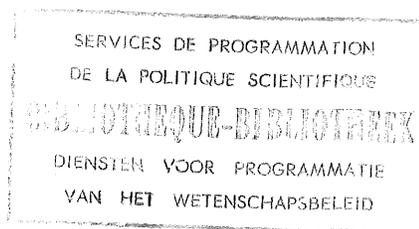
Rapport final

Volume 5

MODELES DE DISPERSION

édité par

Jacques C.J. NIHOUL et Yves ADAM



Les modèles de dispersion servent à décrire, à court et à moyen terme, l'évolution des variables d'état du milieu marin (biomasses, nutriments, polluants, etc.), notamment en déterminant leur transport par les courants de marée et les courants résiduels, leur diffusion sous l'effet de l'agitation turbulente et les interactions qu'elles subissent entre elles.

Le programme de simulation sur ordinateur construit pour intégrer numériquement les modèles permet de calculer le comportement des polluants issus de déversements et de prédire leur influence sur le milieu marin dans les quelques jours qui suivent le rejet. Il est donc fort utile pour aider à déterminer la nocivité des déversements proposés (qui dépend de la rapidité de leur dispersion et du temps de résidence dans les zones polluées). Les résultats de ce modèle de simulation montrent qu'il est quasi impossible de localiser les pollutions. Une surveillance continue s'avère indispensable pour vérifier l'influence à long terme des déversements de déchets sur les populations de plancton, de poissons et d'animaux benthiques.

Modèles de dispersion

édité par

Jacques C.J. NIHOUL et Yves ADAM

TABLE DES MATIERES

<u>PREMIERE PARTIE - MODELE MATHEMATIQUE DE LA DISPERSION EN MER PEU PROFONDE</u>	1
par Jacques C.J. NIHOUL	
1.- Introduction	3
2.- Intégration des équations d'évolution sur la profondeur	5
3.- Paramétrisation de l'effet cisailant	7
<u>DEUXIEME PARTIE - LA SIMULATION NUMERIQUE DE L'EVOLUTION DE POLLUANTS ISSUS DE DEVERSEMENTS</u> <u>EN MER DU NORD</u>	13
par Yves ADAM	
<u>Chapitre I - Applicabilité du modèle de dispersion aux déversements</u>	15
1.- Examen de l'équation de dispersion	15
2.- Domaine de validité	15
3.- Recherche d'une solution analytique de l'équation de dispersion	22
4.- Comparaison avec des observations in situ	26
5.- Concordance des résultats dans le cas de polluants soumis à des interactions aux interfaces	28
6.- Expression des interactions en fonction des concentrations moyennes	35
7.- Remarques sur le choix des variables d'état	39
<u>Chapitre II - L'intégration numérique de l'équation de dispersion</u>	41
1.- Nécessité de l'intégration numérique	41
2.- Utilité de la technique K.B.M.	43
3.- Type de l'équation de dispersion	44
4.- Nature du problème d'évolution	47
5.- Examen des conditions aux limites	49
6.- Choix des méthodes numériques d'intégration	52
7.- Applicabilité des méthodes conçues pour la résolution d'équations hyperboliques	58
8.- Traitement des termes de diffusion	72
9.- Résolution de l'équation de dispersion avec termes d'advection	80
10.- Critères pour le choix d'une méthode numérique	83
11.- Description de la méthode numérique du deuxième ordre	84
12.- Précision de la méthode	103
13.- Stabilité de la méthode du deuxième ordre	109
14.- Conditions aux limites	111
15.- Conclusion de l'analyse de la méthode numérique du deuxième ordre	112
16.- Elaboration d'une méthode numérique plus précise	113
17.- Présentation des méthodes compactes de haute précision	115
18.- Elimination de la dérivée seconde	118
19.- Fermeture du système d'équations	120
20.- Caractéristiques de propagation des schémas compacts	122
21.- Possibilité d'une méthode explicite	127
22.- Construction du schéma d'intégration de haute précision	128
23.- Précision de la méthode du quatrième ordre	131
24.- Stabilité de la méthode du quatrième ordre	131
25.- Comparaison entre les deux schémas proposés	133
<u>Chapitre III - Description des algorithmes de simulation</u>	137
1.- Problèmes posés par l'imposition de conditions aux limites	137
2.- Critères de choix des intervalles spatiaux pour l'intégration numérique	139
3.- Conditions du choix d'un algorithme de poursuite	142
4.- Introduction des paramètres hydrodynamiques dans le modèle	143

5.- Le concept de grille mobile d'intégration	147
6.- Spécification des paramètres hydrodynamiques sur une grille unique	149
7.- Structure de la grille mobile	150
8.- Mode de déplacement de la grille mobile	152
9.- Schéma des algorithmes de poursuite	153
<u>Chapitre IV - Simulations de déversements</u>	155
1.- But du programme de simulation	155
2.- Procédure générale d'une simulation	156
3.- Principes de l'analyse d'un déversement	158
4.- Choix des variables d'état du modèle de simulation	159
5.- Détermination des termes d'interaction	160
6.- Détermination de la position du déversement	162
7.- Mode de déversement	163
8.- Préparation de la simulation proprement dite	166
9.- Présentation et analyse des résultats	167
10.- Avertissement	167
11.- Déversement X1	168
12.- Déversement X2	181
13.- Déversement X3	186
14.- Déversement X4	190
15.- Considérations générales sur les résultats des simulations	198
16.- Considérations sur les performances et l'occupation mémoire du programme	200
<u>Appendice I - Description des algorithmes de grille mobile</u>	201
1.- Schéma des algorithmes de poursuite	201
2.- Détermination des variables contrôlant les déplacements	203
3.- Transfert des variables d'état et des paramètres de grille à grille	206
4.- Principes généraux des algorithmes de poursuite et d'intégration	210
5.- Description sommaire du programme de simulation	219
6.- Description sommaire des sous-programmes	223
<u>Appendice II - Inlichtingsformulier</u>	227
<u>Appendice III - Détermination et tracé d'isocourbes</u>	229
<u>Bibliographie</u>	231
<u>DERDE DEEL - IN SITU ONDERZOEK VAN DE INVLOED VAN INDUSTRIËLE LOZINGEN OP DE MARIENE FAUNA</u>	237
door F. REDANT, J. VAN DE VELDE en R. DE CLERCK	
<u>Hoofdstuk I - Lokalisatie van de lozingsplaatsen en organisatie van het onderzoek</u>	239
1.- Thornton Bank	239
2.- Vlakte van de Raan	241
<u>Hoofdstuk II - Epibenthos</u>	243
1.- Methodiek	243
2.- Resultaten en bespreking	243
<u>Hoofdstuk III - Viseieren en vislarven</u>	253
1.- Methodiek	253
2.- Resultaten en bespreking	253
<u>Hoofdstuk IV - Visstocks</u>	259
1.- Methodiek	259
2.- Resultaten	259
<u>Referenties</u>	264

<u>QUATRIEME PARTIE - FLUCTUATIONS ALEATOIRES ET STRUCTURATION SPATIO-TEMPORELLE DE POPULATIONS</u>	
<u>BIOLOGIQUES - SIMULATION DE LA DISTRIBUTION HORIZONTALE DE PLANCTON EN MER</u>	
<u>DU NORD</u>	267
	par D. DUBOIS
Introduction	269
<u>Chapitre I - La théorie déterministe de la dynamique des populations biologiques</u>	271
Introduction	271
1.- La dynamique d'une espèce isolée	273
2.- Les modes d'interaction entre deux espèces	274
3.- Généralisation au cas de n espèces	279
4.- Propriétés des équations "proie-prédateur"	280
<u>Chapitre II - La théorie stochastique en dynamique des populations biologiques</u>	295
Introduction	295
1.- Processus de "naissance et de mort"	295
2.- L'analogie stochastique de l'interaction proie-prédateur	302
3.- L'équation cinétique de Boltzmann	308
4.- La théorie de Kerner	312
5.- La théorie de Goel, Maitra et Montroll	314
<u>Chapitre III - Structuration spatio-temporelle de population planctonique proie-prédateur</u>	321
Introduction	321
1.- Modèle de Kierstead-Slobodkin	323
2.- Modèle de Steele	325
3.- Vers un modèle plus général	327

PREMIERE PARTIE

MODELE MATHEMATIQUE DE LA DISPERSION
EN MER PEU PROFONDE

par

Jacques C.J. NIHOUL

1.- Introduction

Dans la mer du Nord, et en particulier dans la partie sud, le mélange turbulent vertical est intense et rapide. A l'exception peut-être des premières heures qui suivent un déversement, les concentrations doivent être considérées comme distribuées sur toute la colonne d'eau. Leurs répartitions horizontales ou leurs dispersions à partir de sources données peuvent alors s'étudier simplement en considérant les moyennes des concentrations sur la profondeur.

Si r_a désigne la masse spécifique du "constituant α ", c'est-à-dire soit la masse par unité de volume d'un traceur, soit la masse par unité de volume d'un compartiment (salinité, biomasse du phytoplancton, ...), soit la masse par unité de volume d'un élément sélectionné dans un compartiment donné (azote dissous, teneur du zooplancton en mercure, ...), l'équation tridimensionnelle décrivant l'évolution dans l'espace et dans le temps de r_a s'écrit, d'après l'équation (17) du volume 1 (p. 32) :

$$(1) \quad \frac{\partial r_a}{\partial t} + \nabla \cdot r_a \mathbf{u} = Q_a + I_a - \nabla \cdot r_a \boldsymbol{\sigma}_a + \mathcal{D}_a .$$

Dans cette équation :

- i) $\nabla \cdot r_a \mathbf{u}$ représente l'advection et peut se décomposer en deux parties correspondant respectivement à l'advection horizontale $\nabla \cdot r_a \mathbf{u}_h$ et à l'advection verticale $\frac{\partial}{\partial x_3} (r_a u_3)$ où $\mathbf{u}_h = u_1 \mathbf{e}_1 + u_2 \mathbf{e}_2$ est la vitesse horizontale du courant.
- ii) Q_a représente le taux de production (ou de destruction) par des agents extérieurs intervenant au sein du système. Dans la plupart des cas, les apports extérieurs se font aux frontières — et dans ce cas ils interviennent dans les conditions aux limites et non dans Q_a — ou bien ils se font dans un intervalle de temps

relativement bref, quasi instantanément et dans ce cas ils interviennent dans les conditions initiales et non dans l'équation.

Dans tous ces cas $Q_a = 0$.

- iii) I_a représente le taux de production (ou de destruction) par des interactions au sein du système (translocations) et dépend en général de variables r_β , r_γ couplées à r_a .
- iv) $- \nabla \cdot r_a \sigma_a$ représente la migration et peut être décomposé en deux parties correspondant à une migration horizontale éventuelle et à la migration verticale ou "sédimentation" (l'élévation d'éléments plus léger que l'eau est traitée comme une sédimentation à vitesse négative). Il est commode d'inclure la migration horizontale — essentiellement de nature écologique — dans le terme d'interactions I_a et, posant

$$(2) \quad \sigma_a = - \sigma_a e_3$$

de remplacer le terme de migration simplement par $\frac{\partial}{\partial x_3} (\sigma_a r_a)$ (dans ces notations, la "vitesse de sédimentation", σ_a est positive lorsque la migration est dirigée vers le bas, c'est-à-dire correspond véritablement à une sédimentation; on admet le plus souvent pour σ_a une valeur constante).

- v) \mathcal{D}_a représente la dispersion turbulente et peut être séparée en une dispersion turbulente verticale et une dispersion turbulente horizontale. On a vu dans le volume 1 que cette dernière était négligeable vis-à-vis de l'advection horizontale, c'est-à-dire que la dispersion horizontale observée est le fait de courants horizontaux irréguliers et variables constituant une pseudo-turbulence et non de la "turbulence propre", homogène et isotrope à des échelles inférieures au mètre. Dans ces conditions, \mathcal{D}_a peut s'écrire en vertu de l'équation (16) du volume 1 :

$$\frac{\partial}{\partial x_3} \left(\kappa_3 \frac{\partial r_a}{\partial x_3} \right)$$

où κ_3 est la diffusivité turbulente verticale.

L'équation (1) peut donc s'écrire :

$$(3) \quad \frac{\partial r_a}{\partial t} + \nabla \cdot r_a \mathbf{u}_h + \frac{\partial}{\partial x_3} (r_a u_3) = Q_a + I_a + \frac{\partial}{\partial x_3} (\sigma_a r_a + \kappa_3 \frac{\partial r_a}{\partial x_3})$$

Le champ de vitesse satisfaisant à l'équation d'incompressibilité on a également :

$$(4) \quad \nabla \cdot \mathbf{u}_h + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} = 0$$

2.- Intégration des équations d'évolution sur la profondeur

Soient :

$$(5) \quad \bar{r}_a = H^{-1} \int_{-h}^{\zeta} r_a dx_3$$

$$(6) \quad \hat{r}_a = r_a - \bar{r}_a$$

$$(7) \quad \bar{\mathbf{u}} = H^{-1} \int_{-h}^{\zeta} \mathbf{u}_h dx_3$$

$$(8) \quad \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u}_h - \bar{\mathbf{u}}$$

$$(9) \quad \int_{-h}^{\zeta} \hat{r}_a dx_3 = 0$$

$$(10) \quad \int_{-h}^{\zeta} \hat{\mathbf{u}} dx_3 = 0$$

$$(11) \quad H = h + \zeta$$

où h est la profondeur et ζ l'élévation de la surface. Par définition :

$$(12) \quad \frac{\partial \zeta}{\partial t} + \mathbf{u}_h \cdot \nabla \zeta = u_3 \quad \text{en} \quad x_3 = \zeta$$

$$(13) \quad \frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{u}_h \cdot \nabla h = -u_3 \quad \text{en} \quad x_3 = -h.$$

[Il est clair que la dérivée temporelle de h correspond à de très lentes déformations du fond et n'est conservée dans (1) que par raison de symétrie.]

En intégrant sur la profondeur, on obtient :

$$\int_{-h}^{\xi} \frac{\partial \mathbf{r}_a}{\partial t} dx_3 = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-h}^{\xi} \mathbf{r}_a dx_3 - \underbrace{(\mathbf{r}_a)_{x_3=\xi} \frac{\partial \zeta}{\partial t}}_{\dots\dots\dots} - \underbrace{(\mathbf{r}_a)_{x_3=-h} \frac{\partial h}{\partial t}}_{\dots\dots\dots}$$

$$\int_{-h}^{\xi} \nabla \cdot \mathbf{r}_a \mathbf{u}_h dx_3 = \nabla \cdot \int_{-h}^{\xi} \mathbf{r}_a \mathbf{u}_h dx_3 - \underbrace{(\mathbf{r}_a \mathbf{u}_h)_{x_3=\xi} \cdot \nabla \zeta}_{\dots\dots\dots} - \underbrace{(\mathbf{r}_a \mathbf{u}_h)_{x_3=-h} \cdot \nabla h}_{\dots\dots\dots}$$

$$\int_{-h}^{\xi} \frac{\partial}{\partial x_3} (\mathbf{r}_a \mathbf{u}_3) dx_3 = \underbrace{(\mathbf{r}_a \mathbf{u}_3)_{x_3=\xi}}_{\dots\dots\dots} - \underbrace{(\mathbf{r}_a \mathbf{u}_3)_{x_3=-h}}_{\dots\dots\dots}$$

En intégrant le membre de gauche de (3), les termes soulignés vont par conséquent s'éliminer en vertu de (12) et (13).

Par ailleurs,

$$\int_{-h}^{\xi} \nabla \cdot \mathbf{u}_h dx_3 = \nabla \cdot \int_{-h}^{\xi} \mathbf{u}_h dx_3 - \underbrace{(\mathbf{u}_h)_{x_3=\xi} \cdot \nabla \zeta}_{\dots\dots\dots} - \underbrace{(\mathbf{u}_h)_{x_3=-h} \cdot \nabla h}_{\dots\dots\dots}$$

$$\int_{-h}^{\xi} \frac{\partial u_3}{\partial x_3} dx_3 = (u_3)_{x_3=\xi} - (u_3)_{x_3=-h}$$

$$= \frac{\partial H}{\partial t} + \underbrace{(\mathbf{u}_h)_{x_3=\xi} \cdot \nabla \zeta}_{\dots\dots\dots} + \underbrace{(\mathbf{u}_h)_{x_3=-h} \cdot \nabla h}_{\dots\dots\dots}$$

en utilisant (12) et (13).

Les termes soulignés vont également s'éliminer lors de l'intégration de (4).

Intégrant (3) et (4), on obtient, utilisant (5) et (7) :

$$(14) \quad \frac{\partial}{\partial t} (H \bar{\mathbf{r}}_a) + \nabla \cdot (H \bar{\mathbf{r}}_a \bar{\mathbf{u}}) + \nabla \cdot \int_{-h}^{\xi} \hat{\mathbf{r}}_a \hat{\mathbf{u}} dx_3$$

$$= \int_{-h}^{\xi} (Q_a + I_a) dx_3 + (\sigma_a \mathbf{r}_a + \kappa_3 \frac{\partial \mathbf{r}_a}{\partial x_3})_{x_3=\xi} - (\sigma_a \mathbf{r}_a + \kappa_3 \frac{\partial \mathbf{r}_a}{\partial x_3})_{x_3=-h}$$

$$(15) \quad \frac{\partial H}{\partial t} + \nabla \cdot (H \bar{\mathbf{u}}) = 0 .$$

Les deux premiers termes de (14) peuvent également s'écrire :

$$H \frac{\partial \bar{\mathbf{r}}_a}{\partial t} + \bar{\mathbf{r}}_a \frac{\partial H}{\partial t} + H \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{r}}_a + \bar{\mathbf{r}}_a \nabla \cdot (H \bar{\mathbf{u}})$$

On voit que le second et le quatrième terme s'élimine en vertu de (15).

Définissant

$$(16) \quad \bar{Q}_a = H^{-1} \int_{-h}^{\xi} Q_a dx_3 ;$$

$$(17) \quad \bar{I}_a = H^{-1} \int_{-h}^{\xi} I_a dx_3 ;$$

$$(18) \quad \hat{Q}_a = Q_a - \bar{Q}_a ;$$

$$(19) \quad \hat{I}_a = I_a - \bar{I}_a ;$$

$$(20) \quad \bar{B}_a = H^{-1} \left\{ (\sigma_a r_a + \kappa_3 \frac{\partial r_a}{\partial x_3})_{x_3=\xi} - (\sigma_a r_a + \kappa_3 \frac{\partial r_a}{\partial x_3})_{x_3=-h} \right\}$$

et divisant (14) par H, on obtient :

$$(21) \quad \frac{\partial \bar{r}_a}{\partial t} + \bar{u} \cdot \nabla \bar{r}_a = \bar{Q}_a + \bar{I}_a + \bar{B}_a + \bar{\Sigma}_a$$

où on a posé

$$(22) \quad \bar{\Sigma}_a = H^{-1} \nabla \cdot \int_{-h}^{\xi} (-\hat{r}_a \hat{u}) dx_3 .$$

$\bar{\Sigma}_a$ représente la moyenne du produit des déviations autour de la moyenne. Les observations révèlent que ce terme est responsable d'une dispersion horizontale analogue à la dispersion turbulente mais considérablement plus efficace. Cet effet est appelé "effet cisailant" car il est associé au gradient vertical de la vitesse horizontale u_h .

3.- Paramétrisation de l'effet cisailant

Soustrayant (21) de (3), on obtient :

$$(23) \quad \begin{aligned} \frac{\partial \hat{r}_a}{\partial t} + \bar{u} \cdot \nabla \hat{r}_a + \hat{u} \cdot \nabla \hat{r}_a + \bar{\Sigma}_a + u_3 \frac{\partial \hat{r}_a}{\partial x_3} + \hat{u} \cdot \nabla \bar{r}_a \\ = \frac{\partial}{\partial x_3} (\sigma_a \hat{r}_a + \kappa_3 \frac{\partial \hat{r}_a}{\partial x_3}) - \bar{B}_a + \hat{Q}_a + \hat{I}_a \end{aligned}$$

Etant donné le mélange vertical intense, on peut raisonnablement supposer que la déviation \hat{r}_a est beaucoup plus petite que la moyenne \bar{r}_a . Par contre, la déviation de vitesse \hat{u} est comparable à la vitesse moyenne sur la presque totalité de la colonne d'eau en raison des conditions aux limites qui imposent un profil vertical de vitesse variant de zéro, au fond, à une valeur maximale à la surface (fig. 1).

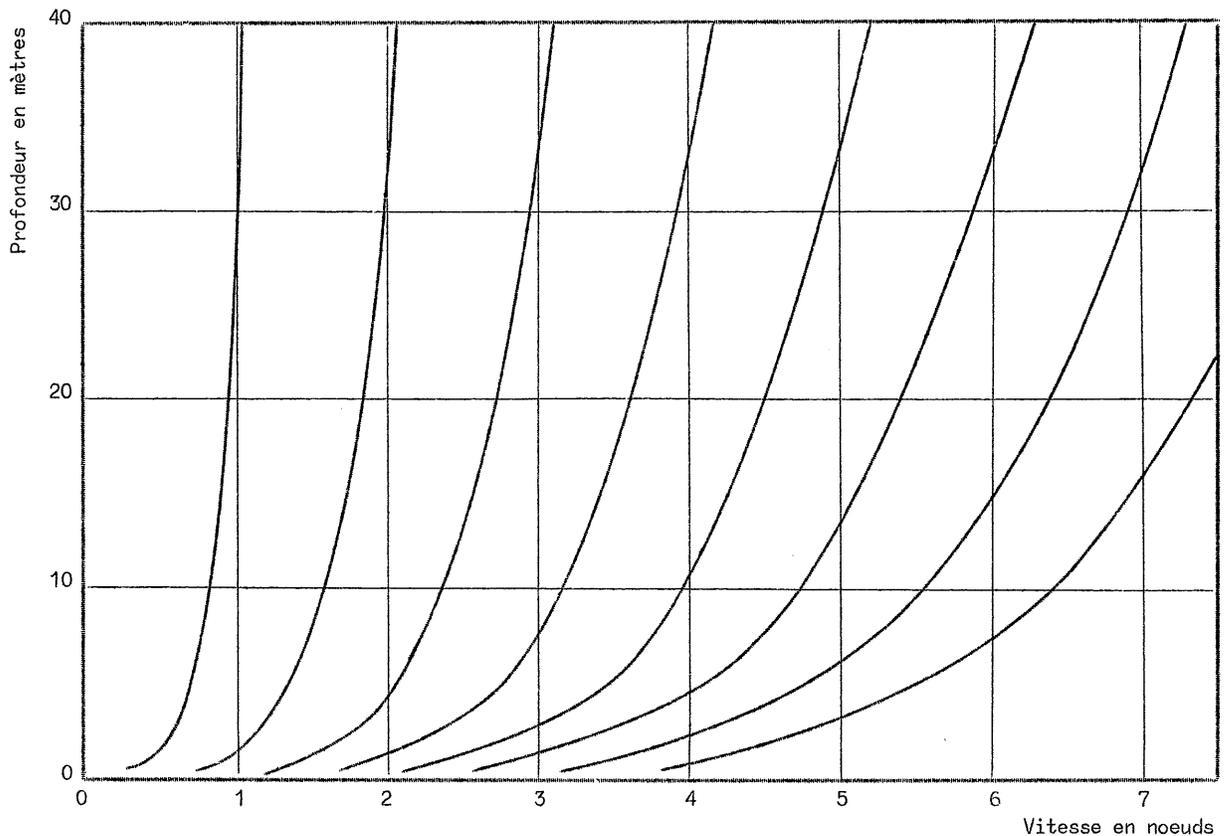


fig. 1.

Vitesse du courant en fonction de la profondeur dans des eaux non stratifiées comme celles du Southern Bight.

Dans ces conditions, on peut négliger les quatre premiers termes du membre de gauche de (23) vis-à-vis du sixième $\hat{u} \cdot \sqrt{\bar{r}_a}$. Le cinquième terme représentant l'advection verticale est vraisemblablement encore plus petit que les quatre termes négligés.

Si l'on prend en compte des valeurs typiques de la vitesse de sédimentation, on peut calculer que ce terme est également négligeable. Enfin, le mélange vertical tendant à homogénéiser les apports extérieurs et les interactions, on peut penser que \hat{Q}_a et \hat{I}_a sont beaucoup moins importants que \bar{B}_a par exemple.

Dans ces conditions, l'équation (23) se réduit, en première approximation, à :

$$(24) \quad \hat{u} \cdot \nabla \bar{r}_a = \frac{\partial}{\partial x_3} \left(\kappa_3 \frac{\partial \hat{r}_a}{\partial x_3} \right) - \bar{B}_a .$$

La signification physique de cette équation est claire : de faibles inhomogénéités verticales sont constamment créées par le transfert convectif inhomogène du mélange et elles s'adaptent à ce transfert en ce sens que les effets de convection et de diffusion transversale s'équilibrent pour elles.

Les observations dans le Southern Bight indiquent que les courants de surface et de fond sont à peu près parallèles sauf pendant les renversements de marées lorsque les courants sont très faibles et il semble que l'on puisse en général représenter le profil vertical de vitesse par une équation du type :

$$(25) \quad u_h = \bar{u} \varphi(\eta)$$

où

$$(26) \quad \eta = \frac{x_3 + h}{H} ; \quad 0 \leq \eta \leq 1 .$$

On peut supposer que r_a et κ_3 sont pareillement des fonctions de la variable η .

Si ν_3 est la viscosité turbulente verticale, on sait que

$$(27) \quad \lim_{x_3 \rightarrow -h} \nu_3 \frac{\partial u}{\partial x_3} \equiv \lim_{\eta \rightarrow 0} \nu_3 \bar{u} \frac{d\varphi}{d\eta} H^{-1} = D \bar{u} \bar{u}$$

où le coefficient de friction D est sans dimensions et où \bar{u} est la norme du vecteur \bar{u} .

Ceci suggère que la viscosité turbulente ν_3 est une fonction de η et peut se mettre sous la forme :

$$(28) \quad \nu_3 = \bar{u} H \psi(\eta) .$$

La diffusivité turbulente κ_3 doit se comporter de façon analogue et on peut écrire :

$$(29) \quad \kappa_3 = \bar{u} H \omega(\eta) .$$

Posant

$$(30) \quad \hat{u} \equiv \bar{u} [\varphi(\eta) - \overline{\varphi(\eta)}] = \bar{u} \mu(\eta) ,$$

on peut mettre (24) sous la forme :

$$(31) \quad \frac{H}{\bar{u}} (\bar{u} \cdot \nabla \bar{r}_a) \mu(\eta) + \frac{H}{\bar{u}} \bar{B}_a = \frac{d}{d\eta} \left(\omega \frac{d\hat{r}_a}{d\eta} \right) .$$

Intégrant cette équation, on peut déterminer \hat{r}_a ; multipliant le résultat par \hat{u} , intégrant de 0 à 1, on obtient :

$$(32) \quad \int_0^1 \hat{r}_a \hat{u} d\eta = A_a \bar{u} - \gamma \frac{H}{\bar{u}} (\bar{u} \cdot \nabla \bar{r}_a) \bar{u}$$

où

$$(33) \quad A_a = \frac{H}{\bar{u}} \bar{B}_a \int_0^1 \{ \mu(\eta) \int_1^\eta \frac{\xi}{\omega(\xi)} d\xi \} d\eta + \left(\omega \frac{d\hat{r}_a}{d\eta} \right)_{\eta=1} \int_0^1 \{ \mu(\eta) \int_1^\eta \frac{d\xi}{\omega(\xi)} \} ,$$

$$(34) \quad \gamma = - \int_0^1 \{ \mu(\eta) \int_1^\eta \frac{m(\xi)}{\omega(\xi)} d\xi \} d\eta$$

avec

$$(35) \quad m(\xi) = \int_1^\xi \mu(\theta) d\theta .$$

Substituant dans (22), on a finalement

$$(36) \quad \begin{aligned} \bar{\Sigma}_a &= H^{-1} \nabla \cdot \int_{-h}^{\xi} (-\hat{r}_a \hat{u}) dx_3 \\ &= H^{-1} \nabla \cdot H \int_0^1 (-\hat{r}_a \hat{u}) d\eta \\ &= -H^{-1} \nabla \cdot (A_a H \bar{u}) + H^{-1} \nabla \cdot \left[\gamma \frac{H^2}{\bar{u}} \bar{u} (\bar{u} \cdot \nabla \bar{r}_a) \right] \end{aligned}$$

Le premier terme du membre de droite est de l'ordre de

$$\frac{H \bar{B}_a}{L} \ll \bar{B}_a$$

où L est une longueur caractéristique des variations horizontales et est très certainement beaucoup plus grande que H .

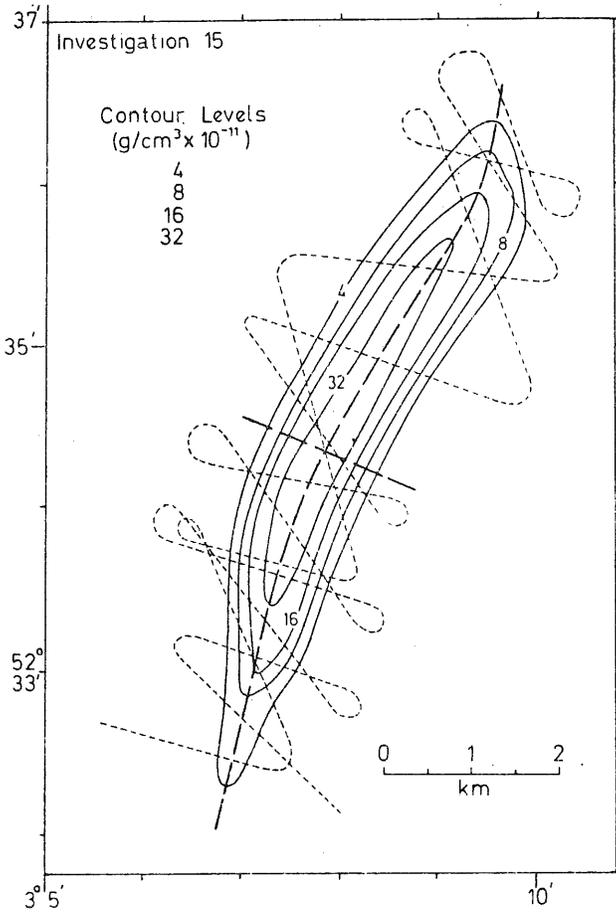


fig. 2a.

Lignes d'isoconcentration de rhodamine B, 36 heures après le déversement*.

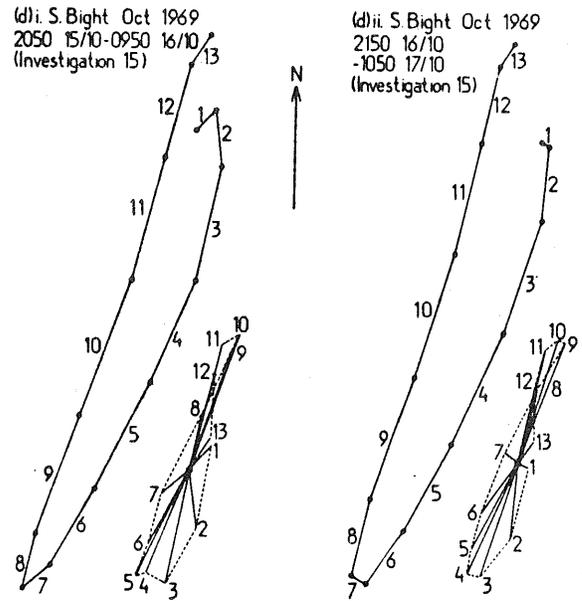


fig. 2b.

Ellipses de marée durant l'expérience *

* TALBOT, J.W., Diffusion in shallow seas. Symposium on the Physical Processes Responsible for the Dispersal of Polluants in the Sea with Special Reference to the Nearshore Zone. N° 36. I.C.E.S. Copenhagen, 1972.

TALBOT, J.W. & TALBOT, G.A., Diffusion measurements in English coastal and estuarine waters. Symposium on the Physical Processes Responsible for the Dispersal of Polluants in the Sea with Special Reference to the Nearshore Zone. N° 37, I.C.E.S., 1972.

On peut, par conséquent ignorer ce terme qui après substitution dans (21) sera négligeable vis-à-vis de \bar{B}_a .

γ peut être calculé à partir des profils de vitesse et de diffusivité. Pour des profils typiques de ceux qui sont observés dans le sud de la mer du Nord, on trouve

$$(37) \quad \gamma \sim 0,45 .$$

Combinant (36) et (21), on obtient :

$$(38) \quad \frac{\partial \bar{r}_a}{\partial t} + \bar{u} \cdot \nabla \bar{r}_a = \bar{S}_a + \bar{I}_a + H^{-1} \nabla \cdot \left[\gamma \frac{H^2}{\bar{u}} \bar{u} (\bar{u} \cdot \nabla \bar{r}_a) \right]$$

où

$$(39) \quad \bar{S}_a = \bar{Q}_a + \bar{B}_a$$

représente l'apport extérieur total, y compris les flux à la surface et au fond.

On voit que l'effet cisailant produit une diffusion dans la direction de la vitesse instantanée avec une diffusivité apparente de l'ordre de $\bar{u} H$.

La dispersion résultante est évidemment beaucoup plus importante dans la direction du courant dominant (le grand axe de la marée, par exemple) et ceci explique l'anisotropie marquée des nappes qui présentent très souvent une forme élongée avec une dispersion maximale dans une direction voisine du courant maximum (fig. 2).

4.- Référence

NIHOUL, J.C.J., (1975). *Modelling of Marine Systems*, Elsevier Publ., Amsterdam.

DEUXIEME PARTIE

LA SIMULATION NUMERIQUE DE L'EVOLUTION
DE POLLUANTS ISSUS DE DEVERSEMENTS EN MER DU NORD

par

Yves ADAM

Chapitre I

Applicabilité du modèle de dispersion aux déversements

1.- Examen de l'équation de dispersion

L'équation décrivant la dispersion de la concentration moyenne \bar{r}_a d'une substance dissoute ou en suspension (en général, d'une variable d'état) dans l'eau d'une mer peu profonde s'écrit donc, comme on l'a démontré précédemment :

$$(1.1) \quad \frac{\partial \bar{r}_a}{\partial t} + \bar{u} \cdot \nabla \bar{r}_a = H^{-1} \nabla \cdot \left[\gamma H^2 \frac{\bar{u}}{u} (\bar{u} \cdot \nabla \bar{r}_a) \right] + \bar{I}_a(s, t, r_a, r_\beta, \dots) + \bar{S}_a + \bar{T}$$

où les notations sont celles qui ont été définies précédemment (\bar{T} est la moyenne des termes de diffusion turbulente horizontale). On va montrer que cette équation est bien adaptée à l'objectif de ce travail, qui est la simulation quantitative du comportement à court terme de polluants déversés dans le Southern Bight. Pour cela, il faut montrer :

i) que l'équation est valide dans le domaine spatio-temporel où on veut étudier le déversement;

ii) qu'elle reproduit correctement des déversements *in situ* qu'on a pu mesurer;

iii) qu'elle explique au moins qualitativement certaines particularités des déversements observées en mer du Nord.

2.- Domaine de validité

L'équation (1.1) qui gouverne la dispersion horizontale a été déduite d'une équation tridimensionnelle par intégration sur la hauteur

de la colonne d'eau et a été mise sous la forme fermée ci-dessus à l'aide des hypothèses suivantes :

i) la variation de la concentration par rapport à une valeur moyenne sur la hauteur de la colonne d'eau est faible par rapport à cette valeur;

ii) la variation verticale du profil de vitesse et de la diffusivité turbulente est horizontalement homogène;

iii) on a pu exprimer ces mêmes variations en fonction des gradients spatiaux des valeurs moyennes.

On va donc déterminer dans quelle mesure ces hypothèses sont vérifiées, et en conséquence, tenter de définir le domaine de validité de l'équation (1.1).

a) La première hypothèse s'exprime comme suit : si on décompose la concentration d'un constituant de l'eau de mer ou d'un contaminant en

$$(1.2) \quad r = \bar{r} + \hat{r}$$

avec

$$(1.2') \quad \bar{r} = H^{-1} \int_{-h}^{\xi} r \, dx_3$$

et

$$(1.2'') \quad \int_{-h}^{\xi} \hat{r} \, dx_3 = 0$$

on doit avoir $\hat{r} \ll \bar{r}$. La très faible variation des concentrations avec la profondeur a été mise en évidence par des chercheurs du Programme et par des investigateurs étrangers [Talbot (1974), Pritchard et Carpenter (1960)] un peu partout dans le Southern Bight. Seules peuvent présenter des variations marquées les concentrations des variables qui interagissent très fortement aux frontières, comme les suspensions et les gaz dissous. Encore les variations ne sont-elles généralement sensibles que dans des couches limites très minces (quelques cm) dont le contenu est négligeable par rapport à celui de la colonne d'eau complète. On reviendra dans le chapitre IV sur les types de polluants susceptibles de présenter des variations verticales de concentration telles que le modèle de dispersion ici décrit ne soit plus applicable.

b) La deuxième hypothèse qui a permis l'élimination de termes de fluctuation en fonction de gradients horizontaux des termes moyens, est une paramétrisation basée sur le fait qu'est vérifiée l'inégalité

$$(1.3) \quad \frac{\partial \hat{r}}{\partial t} + u \cdot \nabla \hat{r} + \hat{u} \cdot \nabla \hat{r} + \Sigma_a + u_3 \frac{\partial r_a}{\partial x_3} - \hat{Q}_a - \hat{I}_a \ll \frac{\partial}{\partial x_3} (\kappa_3 \frac{\partial \hat{r}_a}{\partial x_3}) - \hat{u} \cdot \nabla \hat{r}_a .$$

Cette inégalité implique (on reviendra plus loin sur le cas où $\sigma_a \neq 0$)

$$(1.4) \quad - u_3 \ll \bar{u}$$

$$(1.4') \quad - H \ll L .$$

La première inégalité n'est pas nécessairement vérifiée dans des zones où la topographie est très tourmentée, mais on ne dispose d'absolument aucune mesure le long des côtes du Southern Bight pour confirmer ou infirmer le doute. De toute façon, même si $u_3 \sim \bar{u}$, il faudrait encore $H > L$ pour que l'inégalité (1.3) ne soit pas vraie (car $\hat{r} \ll \bar{r}$). L'inégalité (1.4') est donc primordiale : il faut que la longueur caractéristique des variations horizontales de concentration soit de loin supérieure à la profondeur. Nihoul (1975) montre d'ailleurs qu'il faut qu'il en soit ainsi pour que la diffusion horizontale soit dominée par la diffusion verticale, laquelle est une composante essentielle de la diffusion par effet de cisaillement). En pleine mer, où $u_3 \ll \bar{u}$, il suffit que $L \sim 10 H$ pour que la dominance soit effective. Or $H \sim 20-30$ m dans le Southern Bight, donc L doit être de l'ordre de quelque 200 m. L'inégalité (1.4') est aussi nécessaire si on veut éliminer certains termes dans le calcul du coefficient γ . L'équation (1.1) ne décrit donc pas l'évolution des taches de polluants avant que celles-ci n'aient atteint des dimensions de cet ordre : l'évolution initiale est guidée par la turbulence océanique à petite échelle, pour laquelle on peut définir une diffusivité horizontale quasi isotrope

$$(1.5) \quad \kappa_h \sim 1,03 \times 10^{-4} L^{1,15}$$

[Okubo (1971)] qui varie avec la dimension de la tache jusqu'à ce que l'effet de cisaillement devienne dominant. La limitation vers le domaine des petites échelles de la validité de l'équation (1.1) n'est pas un problème pour l'étude des déversements industriels, pour plusieurs

raisons; la première est que les polluants sont déversés dans le sillage des barges qui les transportent, près de l'hélice, là où le mélange turbulent extrêmement intense n'est pas représentable par les formules (1.4) ni (1.5); d'autre part, on verra (chapitres II et III) que des difficultés d'ordre numérique empêchent d'utiliser des mailles d'intégration dont la dimension est inférieure à 200 à 300 m ; par conséquent, l'étude de la dispersion dans le "sillage" (ici à peu près synonyme de région dont les dimensions sont inférieures à l'échelle minimum de validité de l'équation de dispersion) est empêchée par une série de raisons convergentes; ce problème particulier sort du cadre de ce travail. On conçoit physiquement, que dans un milieu où il y a une telle anisotropie, l'homogénéisation verticale ne puisse être réalisée sur une profondeur de quelques dizaines de mètres, si l'homogénéisation horizontale n'est pas effective sur quelques centaines de mètres. L'inexactitude de l'équation (1.1) pour les petites échelles corrobore des études antérieures démontrant que l'effet de cisaillement ne se fait sentir qu'à partir d'un certain temps critique [Carter et Okubo (1965), Novikov (1959)]. En supposant un cisaillement constant Ω , ces auteurs calculent en effet, que dans un milieu marin non borné, la diffusion se passe comme si la diffusivité horizontale valait :

$$(1.6) \quad \kappa_h = \kappa + \frac{1}{4} \Omega^2 \kappa_3 t^2$$

où κ est la diffusivité turbulente effective horizontale, et κ_3 la diffusivité verticale; l'effet de cisaillement ne devient important que pour

$$t \geq t_{cr}$$

avec

$$(1.7) \quad t_{cr} = \left(\frac{1}{12} \frac{\kappa_3}{\kappa} \right)^{-\frac{1}{2}} \Omega .$$

On peut calculer que pour des valeurs typique de la mer du Nord, $t_{cr} \sim 30$ s . Bien entendu, cette formulation n'est pas valable dans une mer peu profonde, car il existe des limites bien réelles au milieu (les

examinant l'inégalité (1.3), on peut également déterminer une borne supérieure de validité pour l'équation (1.1). En effet, les ordres de grandeur du membre de droite et du dernier terme du membre de gauche sont respectivement :

$$\bar{u} \cdot \nabla \bar{r} \sim \frac{\bar{u} \bar{r}}{L}$$

$$u_3 \frac{\partial \hat{r}}{\partial x_3} \sim u_3 \frac{\hat{r}}{H} .$$

Si L est vraiment beaucoup plus grand que H , il se peut que malgré

$$u_3 \ll \bar{u}$$

et $\hat{r} \ll \bar{r}$

on ait quand même

$$u_3 \frac{\partial \hat{r}}{\partial x_3} \sim \bar{u} \cdot \nabla \bar{r} ;$$

ceci se passe pour $L \sim 10^4 H$, en admettant que $\hat{r} \sim 10^{-2} \bar{r}$ et $u_3 \sim 10^{-2} \bar{u}$; donc l'équation (1.1) n'est pas justifiée pour des longueurs caractéristiques de variation horizontale de l'ordre de quelques centaines de kilomètres; la signification physique de cette limite supérieure est claire : les inhomogénéités verticales des contaminants deviennent comparables aux inhomogénéités horizontales, puisque ces dernières s'amenuisent; il n'est donc plus justifié d'intégrer sur la profondeur pour faciliter l'étude de la dispersion horizontale apparente, puisque l'homogénéité horizontale est quasi réalisée; on peut alors considérer la zone de dispersion comme une "boîte" où la concentration des contaminants est homogène et n'étudier que leurs interactions mutuelles I_a .

c) Pour arriver à la formulation assez simple de l'effet du cisaillement sur la dispersion horizontale apparente, on a dû supposer que

$$(1.9) \quad \hat{u} = \mu(\eta) \bar{u}$$

$$(1.9') \quad \kappa_3 = \omega(\eta) \bar{u} H$$

avec

interfaces air-mer et mer-sol), et le cisaillement est loin d'être constant; le fait qu'expérimentalement, on ne calcule plus d'augmentation de la diffusivité après quelque temps prouve que l'effet des frontières doit être tenu en compte, ce qui est le cas de la formulation aboutissant à l'équation (1.1). Néanmoins, la similitude mise en évidence (limitation du côté des petites échelles d'une part, temps critique inférieur pour l'apparition de l'effet du cisaillement de l'autre) démontre que l'effet de cisaillement ne peut être formulé simplement que pour des phénomènes de dispersion dont l'échelle de variation spatiale horizontale est supérieure à une certaine valeur.

Il faut noter que, dans le cas d'un déversement ponctuel et instantané, étendue spatiale minimum et temps critique sont univoquement définis l'un par rapport à l'autre. En admettant que les formules données par Carter et Okubo (1965) sont correctes tant que la concentration du contaminant au fond ($h \sim 20$ m) reste inférieure à $\frac{1}{100}$ de sa valeur en surface, on peut calculer qu'elles représentent la réalité tant que

$$(1.8) \quad t < t_{\max} \sim 700 \text{ s}$$

pour des valeurs typiques de Ω , κ_3 et κ en mer du Nord. A ce moment, et en supposant que le courant reste unidirectionnel, la tache résultante en surface (limitée par l'isocourbe égale à $\frac{1}{100}$ de la concentration maximum) est une ellipse de 250 m (direction du courant) sur 10 m donc sensiblement plus petite que la surface nécessaire pour que l'équation (1.1) soit valide, on se convaincra aisément que cette dernière surface doit être plus grande que l'ellipse définie plus haut, car la validité de (1.1) exige une faible variation de la concentration avec la profondeur, ce qui n'est pas encore réalisé si

$$r|_{z=-h} = \frac{1}{100} r|_{z=0} !$$

Des précédentes remarques, il ressort que l'évolution de phénomènes dont l'échelle de temps caractéristique est inférieure ou égale en ordre de grandeur à t_{\max} ne peut être représentée par l'équation (1.1). En

$$(1.10) \quad \eta = H^{-1} (h + x_z) ,$$

c'est-à-dire que les variations horizontales des perturbations verticales de la vitesse et de la diffusivité sont les mêmes que les variations horizontales de la vitesse et de la diffusivité moyenne: la formule (1.9) implique de plus que le profil vertical de la vitesse horizontale est plan, c'est-à-dire que le vecteur-vitesse a en chaque instant la même direction quelle que soit la profondeur. Ces hypothèses sont justifiées par Bowden (1965) pour des mers peu profondes, mais pourraient ne pas être vraies près du littoral, et notamment dans les régions où la présence de bancs de sable crée une bathygraphie très mouvementée; là, les courants de fond pourraient avoir localement une direction différente des courants de surface; en pleine mer, le cas est moins probable, sauf pendant un court laps de temps au moment du renversement de la marée; encore faut-il que celui-ci soit brutal (ellipse de marée réduite à une droite); malgré tout, au moment du renversement, la vitesse du courant est suffisamment faible et le phénomène suffisamment bref pour qu'on puisse le négliger. Les seuls endroits où l'on puisse mettre en question les hypothèses (1.9) seraient donc les zones proches du littoral (*a fortiori* si elles contiennent le littoral lui-même); on verra plus loin pourquoi cette zone n'est pas propice aux déversements; dans le cadre de ce travail, la limitation éventuelle de la validité de l'équation (1.1) à la pleine mer n'a pas d'importance.

Il faut remarquer que ce n'est pas parce que l'équation (1.1) n'est (éventuellement) pas valide que l'effet de cisaillement n'influence pas la dispersion. En effet, on connaît des exemples expérimentaux [Kullenberg (1972, 1974), Talbot (1974)], où le cisaillement provoque une extension nette des taches de concentration dans une direction déterminée, alors que les hypothèses du § 1 ne sont pas vérifiées (proximité des côtes, existence d'une thermocline où les gradients verticaux de concentration sont très grands); les solutions analytiques mentionnées se rapportent elles aussi à des cas différents des mers peu profondes et cependant elles mettent en évidence l'influence du

cisaillement; le rôle des hypothèses (1.2), (1.3) et (1.9) est de permettre la simplification et la fermeture (au sens de la théorie de la turbulence) des équations décrivant la dispersion en mer peu profonde sous l'effet du cisaillement.

3.- Recherche d'une solution analytique de l'équation de dispersion

Avant de comparer les résultats d'une intégration de l'équation (1.1) avec des mesures effectuées lors d'expériences en mer, on va en chercher une solution analytique afin d'en analyser plus facilement l'allure et le comportement.

On peut décomposer la variation temporelle d'une concentration moyenne \bar{r}_a en plusieurs effets :

- l'effet de diffusion par cisaillement, qui nous intéresse particulièrement, puisqu'il s'agit d'un résultat original;
- l'effet d'advection par le courant total, qui est simplement le transport global de la distribution de la variable d'état avec la masse d'eau qui la contient;
- l'effet des interactions avec les autres variables d'état (apparition ou disparition);
- l'effet des sources et des interactions aux frontières air-mer et mer-sol.

Les expériences qui ont été réalisées en mer ne faisaient intervenir que des composés chimiquement et biologiquement inertes, dont les flux aux interfaces étaient nuls (pas de sédimentation, pas de formation d'aérosols); par conséquent, les seuls effets sensibles étaient les deux premiers effets décrit et on va se contenter de trouver une solution approchée de l'équation réduite :

$$(1.11) \quad \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} + \bar{u} \cdot \nabla \bar{r} = H^{-1} \cdot \nabla \left[\gamma H^2 \frac{\bar{u}}{u} (\bar{u} \cdot \nabla \bar{r}) \right] .$$

Les ordres de grandeur de l'effet de diffusion et de l'effet d'advection sont relativement différents. Le terme d'advection $\bar{u} \cdot \bar{v}r$ est d'ordre $\bar{u} \frac{r}{L}$; on peut estimer assez facilement l'ordre de grandeur du terme de diffusion en appliquant le concept de "vitesse de diffusion" introduit par Joseph et Sendner (1958); on pourra facilement comparer la "vitesse de diffusion" à la vitesse d'advection proprement dite; l'utilisation d'une "vitesse de diffusion" n'est concevable que parce que la diffusion par cisaillement est un phénomène essentiellement turbulent, résultant du couplage entre une advection différentielle variant avec la profondeur et une intense diffusion turbulente verticale.

Dans le second membre de l'équation (1.11), apparaissent des termes en dérivées secondes affectés de coefficients dont la grandeur vaut environ $\gamma H \bar{u}$; γ étant d'ordre 0,5 [Nihoul (1972a)], on estime cette "diffusivité par effet de cisaillement" à environ $10 \text{ m}^2/\text{s}$; or Joseph et Sendner ont déduit d'une grande série d'observations, une vitesse de diffusion dépendant du gradient vertical de vitesse :

$$(1.12) \quad P = (111 H \left| \frac{\partial u}{\partial x_3} \right| + 1,3) 10^{-4} \text{ m/s}$$

telle que la diffusion horizontale apparente est donnée par :

$$(1.13) \quad \kappa_h = PL ,$$

L étant une grandeur caractéristique de la distribution de concentration, en prenant $L \sim 1000 \text{ m}$, on peut calculer $\kappa_h \sim 10 \text{ m}^2/\text{s}$. Or cette dimension L est typique de taches de concentration quelques heures après un déversement ponctuel; on peut donc supposer que la diffusivité apparente déterminée expérimentalement concorde avec la diffusivité calculée théoriquement; la vitesse de diffusion correspondante est

$$P \sim 1,1 \times 10^{-2} \text{ m/s} .$$

En comparant les vitesses d'advection et de diffusion, on déduit que l'effet de l'advection est environ 2 ordres de grandeur plus fort que l'effet de la diffusion. Ce n'est pas une raison pour négliger ce dernier, qui provoque l'étalement des distributions de concentration et contrôle les échanges entre la masse d'eau qui contient la tache et

les masses d'eau voisines, tandis que l'advection transporte la masse d'eau, éventuellement la déforme (lorsque le courant n'est pas horizontalement homogène) mais ne permet aucun échange; l'importance du phénomène d'échange impose donc le maintien de la prise en considération des termes de diffusion.

En un point quelconque s , $\bar{r}(s,t)$ varie très fort à cause du transport par le courant de marée (auquel s'ajoute éventuellement un courant dû au vent) et se modifie lentement à cause de la diffusion. Pour obtenir une solution approchée du comportement de \bar{r} conditionné par la diffusion seulement, on peut effectuer un changement de variable.

$$(1.14) \quad t^* = t$$

$$(1.14') \quad s^* = s - \int_{t_0}^t \bar{u} dt$$

ce qui revient à se placer dans un référentiel qui se déplace avec le courant (qu'on suppose horizontalement homogène pour la circonstance).

L'équation (1.11) devient, en supprimant les astérisques :

$$(1.15) \quad \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} = H^{-1} \nabla \cdot \left[\gamma \frac{H^2}{\bar{u}} \bar{u} (\bar{u} \cdot \nabla \bar{r}) \right]$$

équation décrivant la dispersion dans un système de coordonnées mobiles.

En supposant de plus que :

$$(1.16) \quad H = c^{te} \quad \text{sur la zone à étudier}$$

$$(1.16') \quad \bar{u} = a e_1 \cos \omega t + b e_2 \sin \omega t,$$

avec a et b constants sur la zone à étudier, on va pouvoir simplifier davantage l'équation. Les hypothèses supplémentaires permettent de négliger des termes d'ordre supérieur, petits par rapport aux composantes principales de la profondeur et de la vitesse; ainsi, on néglige la vitesse résiduelle qui est usuellement d'un ordre de grandeur inférieur à la norme de la vitesse totale due à la marée. Dans (1.15), c'est-à-dire dans le référentiel en mouvement, \bar{r} varie lentement avec t , tandis que $\bar{u}\bar{u}$ varie beaucoup plus rapidement : en pratique \bar{r} varie peu au cours d'une période de marée $T = \frac{2\pi}{\omega}$; les conditions d'application de la méthode de K.B.M. sont donc remplies, et on peut

écrire :

$$(1.17) \quad \begin{aligned} T^{-1} (\bar{r}_{t+T} - \bar{r}_t) &= \int_t^{t+T} \frac{\partial \bar{r}}{\partial \tau} (\tau) d\tau \\ &= \int_t^{t+T} H^{-1} \nabla \cdot \gamma \frac{H^2}{\bar{u}} \bar{u} (\bar{u} \cdot \nabla \bar{r}) d\tau \end{aligned}$$

la différence finie apparaissant dans le premier membre peut être remplacée par une dérivée, étant donnée la petitesse de la variation de \bar{r} sur une période de marée; on peut également supposer \bar{r} constant dans l'intégrand du second membre. Donc,

$$(1.18) \quad \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} \sim \int_t^{t+T} H^{-1} \nabla \cdot \left[\gamma \frac{H^2}{\bar{u}} \bar{u} (\bar{u} \cdot \nabla) \right] d\tau \bar{r}$$

à l'aide des hypothèses (1.16), on calcule facilement les intégrales temporelles du second membre, on obtient [Nihoul (1972a)] :

$$(1.19) \quad \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} \sim v_1 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1^2} + v_2 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2^2}$$

avec

$$(1.20) \quad v_1 = \frac{2\gamma}{\pi} Ha B(k)$$

$$(1.20') \quad v_2 = \frac{2\gamma}{\pi} Ha \frac{b^2}{a^2} D(k)$$

où $B(k)$ et $D(k)$ dénotent les intégrales elliptiques complètes

$$(1.21) \quad B(k) = \int_0^{\pi/2} \cos^2 \theta (1 - k^2 \sin^2 \theta)^{-\frac{1}{2}} d\theta$$

$$(1.21') \quad D(k) = \int_0^{\pi/2} \sin^2 \theta (1 - k^2 \sin^2 \theta)^{-\frac{1}{2}} d\theta$$

et où κ est l'excentricité de l'ellipse de marée

$$(1.22) \quad k^2 = 1 - \frac{b^2}{a^2}.$$

Si on déverse instantanément et ponctuellement, une certaine quantité de la variable d'état $\bar{\rho}$, on obtient la solution suivante :

$$(1.23) \quad \bar{p}(s,t) = \frac{A}{(v_1 v_2)^{\frac{1}{2}} t} \exp\left(-\frac{x_1^2}{4v_1 t} - \frac{x_2^2}{4v_2 t}\right)$$

dans un référentiel suivant le courant et dont les axes pointent suivant les directions principales de l'ellipse de marée [Nihoul (1972a)].

Les courbes d'égale concentration dans ce même référentiel au temps t sont des ellipses d'équation :

$$(1.24) \quad \frac{x_1^2}{4v_1} + \frac{x_2^2}{4v_2} = t \ln \frac{\bar{\rho}_0}{\bar{\rho}}$$

l'hypothèse du déversement ponctuel est en contradiction avec les conclusions du §2 de ce chapitre concernant le domaine de validité de l'équation (1.1) [dont est issue l'équation (1.19)]; cependant, la forme initiale de la tache est également une ellipse [solution de Carter et Okubo (1965)], et on peut estimer que, bien que l'évolution en ses premiers instants ne soit pas gouvernée par l'équation (1.19), celle-ci donnera malgré tout à long terme (plus d'une demi-période de marée, par exemple) une solution qui représente correctement la distribution observée expérimentalement.

4.- Comparaison avec des observations *in situ*

Comme on l'a dit plus haut, les seules expériences réalisées en mer et qui ont été soigneusement décrites ont porté sur des déversements de traceurs, tel la Rhodamine B. Les seuls effets étudiés sont donc la diffusion et l'advection; l'évolution de taches de Rhodamine a été suivie pendant des périodes allant de 2 à 8 jours; certaines expériences comportaient également des mesures courantométriques et des observations météorologiques; les plus intéressantes pour la comparaison avec le modèle ici décrit sont celles qui ont été réalisées par Talbot en 1969 dans le Southern Bight [Talbot (1974)]. On a comparé les résultats de l'expérience 14 de Talbot avec la solution analytique (1.24); comme le courant était connu par des mesures effectuées sur place, on a pu déterminer les valeurs de a, b puis de v_1 et v_2 ;

on a dû par contre estimer la valeur de γ par approximations successives, mais le résultat final ($\gamma \sim 0,45$) est bien de l'ordre de grandeur estimé par Nihoul (entre 0,4 et 0,5), Bowden (environ 0,6) et Talbot (entre 0,2 et 0,5). La figure 1 montre la concordance

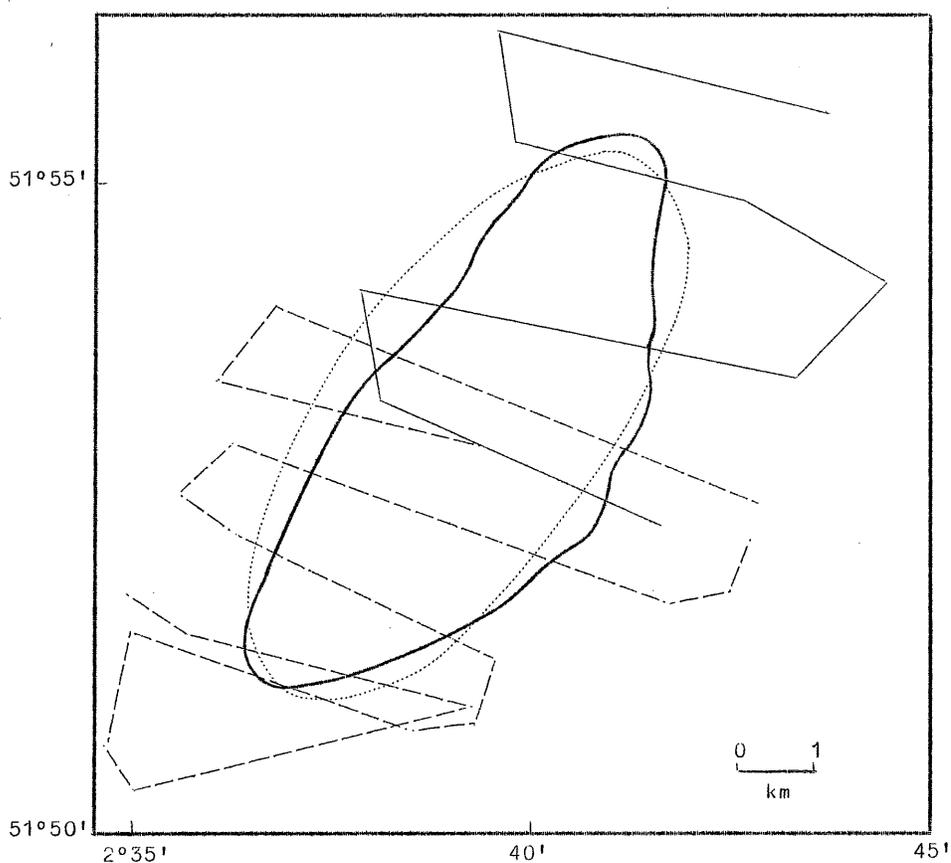


fig. 1.

Comparaison entre les résultats de l'intégration de l'équation de dispersion (traits pointillés) et les résultats expérimentaux (traits pleins) pour la courbe d'isoconcentration $1/128e$ de la valeur maximum d'une variable d'état passive. (Extrait de Modelling of Marine Systems, J. Nihoul Ed.)

entre les résultats expérimentaux de l'isocourbe correspondant à $1/128e$ de la concentration maximum 67 heures après un déversement ponctuel. Le rapport entre l'excentricité de l'ellipse de marée mesurée et l'excentricité de la tache de Rhodamine observée est fort proche du rapport théorique qu'on peut calculer en introduisant (1.22) dans (1.20) : on

trouve une excentricité de l'ellipse de diffusion [Nihoul (1972a)] :

$$(1.25) \quad \varepsilon^2 = 1 - (1 - \kappa^2) \frac{B(\kappa)}{D(\kappa)}$$

qui ne dépend pas de γ et n'est donc pas améliorable par le processus d'approximations successives; celui-ci n'a pour but que d'ajuster l'étendue totale de la tache prédite à celle de la tache observée. La concordance entre résultats prédits et observations est donc fort satisfaisante; l'accord qualitatif avec d'autres résultats expérimentaux pour lesquels on ne disposait pas de mesures courantométriques confirme le bien fondé du modèle développé pour la description de la diffusion par effet de cisaillement; par la même occasion est justifiée la procédure d'intégration KBM utilisée pour simplifier l'expression des coefficients de diffusion; par ailleurs les approximations (1.16) nécessaires pour un traitement analytique peuvent être laissées de côté et l'intégration (1.18) effectuée numériquement; on reviendra dans le chapitre II sur l'utilité de cette possibilité.

5.- Concordance des résultats dans le cas de polluants soumis à des interactions aux interfaces

Les seules mesures systématiques de dispersion dans la mer du Nord concernent des contaminants passifs, ne possédant ni activité chimique ou biologique, ni interactions aux interfaces du milieu marin avec l'atmosphère et le sol. On ne dispose donc pas, en général, de données précises permettant de tester la validité d'équations du type (1.1) dans le cas où des termes \bar{S}_a , \bar{I}_a ne sont pas négligeables. Dans un cas important cependant, celui de la dispersion de fines particules susceptibles de sédimenter et d'être remises en suspension, on a pu, par le calcul, corroborer des observations effectuées près de points de déversement.

Le cas de la dispersion de suspension est assez courant et important pour qu'on l'examine d'un peu plus près; il est en effet fréquent que soient déversées en mer des suspensions de particules plus ou moins

fines, ou encore des solutions qui au contact de l'eau de mer, forment des précipités; on en examinera quelques exemples dans le chapitre consacré à l'analyse de déversements. La turbidité associée à la concentration de particules solides en suspension provoque une extinction plus rapide de la lumière solaire et une réduction de la photosynthèse. Les dépôts de suspensions ajoutés par les déversements contiennent en général des produits qui peuvent être assimilés par le benthos (matière vivante au fond de la mer) et s'avérer toxique à plus ou moins long terme.

Dans les mers peu profondes, on se borne à l'étude de la concentration moyenne dans la colonne d'eau (comme pour les matières non sédimentables) et de la concentration du dépôt dans la couche-limite de fond.

L'équation décrivant la suspension a la forme générale :

$$(1.26) \quad \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (uc) + \frac{\partial}{\partial x_3} (u_3 \frac{\partial c}{\partial x_3}) = \frac{\partial}{\partial x_3} (\kappa_3 \frac{\partial c}{\partial x_3} + \sigma c) + T$$

où σ est la vitesse de sédimentation (migration descendante).

On a montré dans la première partie de ce travail qu'on peut faire quelques hypothèses simplificatrices pour pouvoir intégrer (1.26) sur la colonne d'eau. On trouve une équation de la forme

$$(1.27) \quad \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \cdot \nabla \bar{c} = \bar{\Sigma} + \bar{S} + \bar{T}$$

où \bar{S} est ici le flux vertical moyen de suspension (différence des flux aux interfaces) et \bar{T} la moyenne des termes de diffusion turbulente horizontale. A nouveau, on peut exprimer $\bar{\Sigma}$ à l'aide du gradient horizontal de la concentration moyenne, car le terme

$$(1.28) \quad \sigma \frac{\partial \hat{c}}{\partial x_3} \sim \frac{\sigma \hat{c}}{H} \ll \hat{u} \cdot \nabla \hat{c}$$

est négligeable dans l'expression de $\bar{\Sigma}$, même si l'inégalité (1.28) n'est pas vérifiée [Nihoul et Adam (1975)]. L'hypothèse que la concentration de particules est quasi-homogène sur la hauteur de la colonne d'eau demande une justification complémentaire, car elle est contraire à l'image habituelle qu'on a de la distribution d'une suspension dans

un fluide laminaire. En effet, dans une mer peu profonde ($H \sim 20$ m) où les courants de marée peuvent atteindre des vitesses de 1 m/s, le mélange turbulent vertical est extrêmement intense. En l'absence de ce mélange turbulent, le profil vertical des matières en suspension varierait fortement, la concentration approchant zéro à la surface et croissant très rapidement au voisinage du fond. En régime turbulent, la situation est complètement différente. Il existe sur le fond une couche limite peu épaisse où la turbulence affaiblie par la proximité du sol permet une sédimentation quasi-laminaire caractérisée par des gradients de concentrations importants. Dans le reste de la colonne d'eau, énergiquement brassée, par contre, la concentration est presque uniforme. Occasionnellement, lorsque les courants sont les plus intenses, la turbulence de fond devient suffisamment forte pour bouleverser la couche limite et remettre en suspension dans la masse d'eau les sédiments qui se déposaient sur le fond. On s'intéresse ici à la turbidité et au dépôt résultant d'un déversement en mer dans des conditions où les tensions de Reynolds sur le fond, si elles peuvent occasionnellement bouleverser la couche limite, ne sont jamais suffisamment fortes pour éroder les sédiments consolidés du sol (lesquels sont d'ailleurs en grande partie d'une nature différente de ceux qui sont déversés). On distingue par conséquent les sédiments "en suspension" dans la colonne d'eau turbulente et les sédiments "de fond" s'accumulant dans la couche limite (pour éventuellement se consolider ultérieurement sur le fond).

Dans cet esprit, l'intégration verticale effectuée dans la première partie est faite de la surface libre à la limite supérieure de la couche limite, la masse totale accumulée dans la couche limite constitue dans ce modèle le "dépôt" sur le fond.

La concentration des sédiments "en suspension" diminue continuellement après le déversement à cause de la sédimentation mais la turbulence assure une redistribution quasi instantanée des suspensions et maintient dans la colonne d'eau une concentration quasi uniforme. On a donc dans la colonne d'eau, à chaque instant $\hat{c} \ll \bar{c}$.

On peut donc, comme précédemment, exprimer $\bar{\Sigma}$ par :

$$(1.29) \quad \bar{\Sigma} = H^{-1} \nabla \cdot \left[\gamma \frac{H^2}{\bar{u}} \bar{u} (\bar{u} \cdot \nabla c) \right]$$

Dans cette évaluation on a négligé des termes du second ordre, notamment un terme de l'ordre

$$(1.30) \quad \frac{H}{L} \bar{S} \ll \bar{S}$$

qui en vertu des conclusions du §2 de ce chapitre est très petit. On posera, pour des raisons de simplicité, car ce terme est petit devant $\bar{\Sigma}$:

$$(1.31) \quad \bar{T} = \nabla \cdot (\kappa \nabla c) .$$

Il s'agit maintenant d'exprimer de manière simple le flux moyen de particules; si la tension de fond n'est pas trop élevée, il existe une couche limite "quasi laminaire" à cet endroit. Le flux de matière en suspension se réduit au flux de sédimentation. Lorsque la tension sur le fond dépasse une valeur critique, la couche limite est perturbée et la turbulence remet le sédiment en circulation.

Pour des tensions de Reynolds modérées susceptibles de dépasser la tension critique de stabilité de la couche limite pendant une fraction seulement du cycle de marée et par ailleurs toujours inférieure à la tension critique d'érosion des sédiments consolidés du sol, on peut admettre en première approximation que le flux \bar{S} est proportionnel à la différence entre la tension effective et la tension critique de stabilité [Nihoul (1975)].

La tension sur le fond peut être exprimée en termes de la vitesse à une distance conventionnelle du fond (1 m par exemple) en introduisant un coefficient de résistance. Connaissant le profil vertical de vitesse dans la région du déversement, on peut en déduire la tension de fond en fonction de la vitesse moyenne et définir une vitesse moyenne critique correspondant à la tension critique.

Dans ces conditions, on peut montrer que \bar{S} peut s'écrire [Owen et Odd (1970)] :

$$(1.32) \quad \bar{S} \sim - \frac{\sigma}{H} \bar{c} \left(1 - \frac{\bar{u}^2}{u_{cr}^2} \right) .$$

Le facteur entre parenthèses estime la proportion de sédiments qui ne sont pas absorbés par la couche limite et sédimentés et tient compte du fait que les instabilités de cette couche limite (d'autant plus fréquentes que \bar{u} est grand) permettent à la turbulence de remettre des matières en suspension, voire, lorsque $\bar{u} > u_{cr}$, de renverser le sens du processus et de réalimenter la colonne d'eau à partir des sédiments de fond.

D'autre part, désignant par C la masse spécifique du dépôt (masse totale dans la couche limite par unité de surface du fond), on peut associer à (1.27), l'équation d'évolution du dépôt :

$$(1.33) \quad \frac{\partial C}{\partial t} = - H \bar{S}$$

Bien que la formulation ci-dessus soit assez rudimentaire et qu'on puisse imaginer la remplacer par des équations mieux adaptées quand celles-ci seront parfaitement au point [Lebon et Lambermont (1974)], on a néanmoins pu effectuer grâce à elle des simulations numériques de déversements contenant ou produisant des suspensions, effectués périodiquement au large des côtes belges.

La vitesse critique d'érosion est estimée à cet endroit à

$$(1.34) \quad u_{cr} \sim 0,8 \text{ m/s}$$

et est dépassée pendant une fraction du cycle de marée. Le profil vertical de vitesse dans cette région est du type log-parabolique (profil logarithmique jusqu'à une certaine hauteur au dessus du fond prolongé jusqu'à la surface libre par un profil parabolique. Pour ce type de profil, on a $\gamma \sim 0,45$. La vitesse de sédimentation pour le déversement considéré est estimée à $\sigma \sim 10^{-3}$ m/s.

Les figures 2 à 5 montrent l'évolution sur une période de marée des courbes d'égales concentrations pour les suspensions et les sédiments déposés. Les côtés des rectangles sont dirigés est-ouest horizontalement et sud-nord verticalement. La zone de déversement correspond

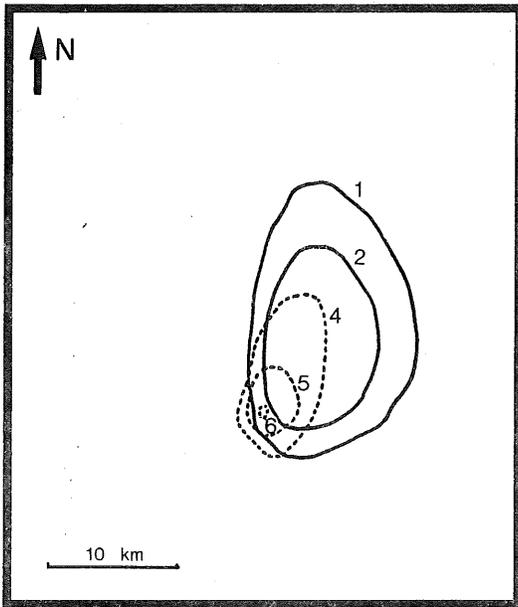


fig. 2.

Courbes d'égales concentrations des matières en suspension et des sédiments déposés sur le fond $\frac{1}{4}$ de période de marée après le déversement.

La courbe 1 correspond à la concentration de matières en suspension de 1 mg/m^3 ; la courbe 2 à la concentration de 10 mg/m^3 . La courbe 4 correspond à la concentration de 10 mg/m^2 de sédiments déposés ; la courbe 5 à 100 mg/m^2 de sédiments déposés ; la courbe 6 à 500 mg/m^2 de sédiments déposés.

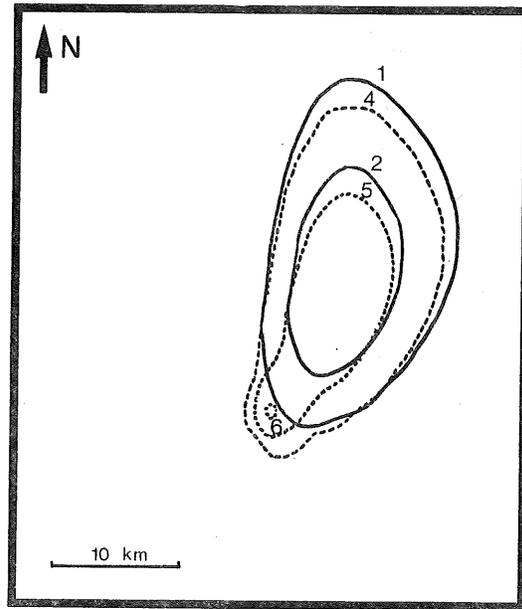


fig. 3.

Courbes d'égales concentrations des matières en suspension et des sédiments déposés sur le fond $\frac{1}{2}$ période de marée après le déversement.

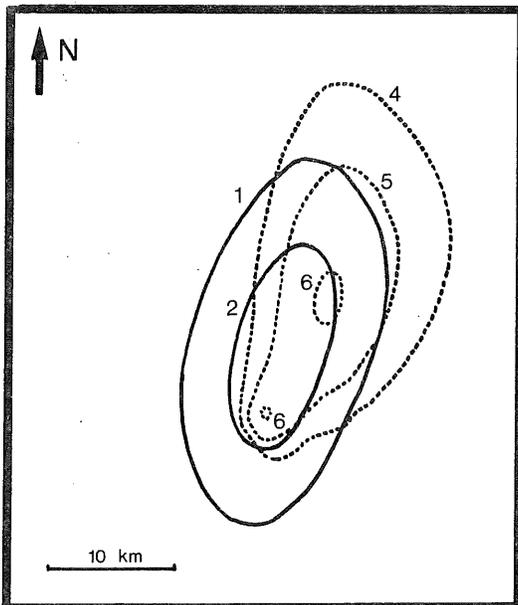


fig. 4.

Courbes d'égales concentrations des matières en suspension et des sédiments déposés sur le fond $\frac{3}{4}$ de période de marée après le déversement.

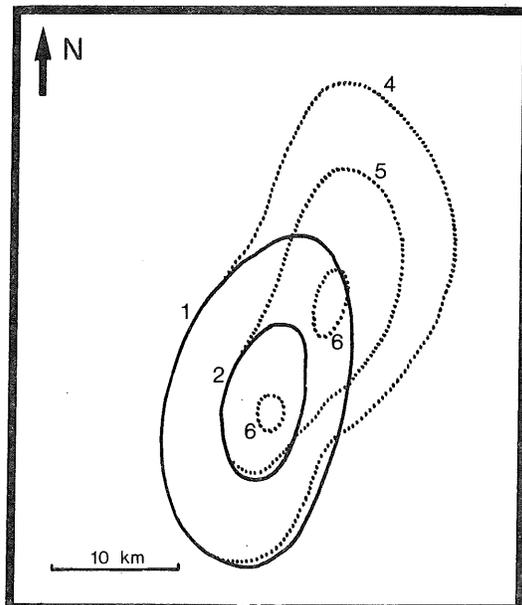


fig. 5.

Courbes d'égales concentrations des matières en suspension et des sédiments déposés sur le fond une période de marée après le déversement.

à la courbe 6 (à sa partie sud sur les figures 4 et 5). Les courbes 1 et 2 en traits pleins correspondent à des concentrations de 1 et 10 mg/m^3 respectivement dans la colonne d'eau; les courbes 4, 5 et 6 à des concentrations de 10, 100 et 500 mg/m^2 respectivement sur le fond.

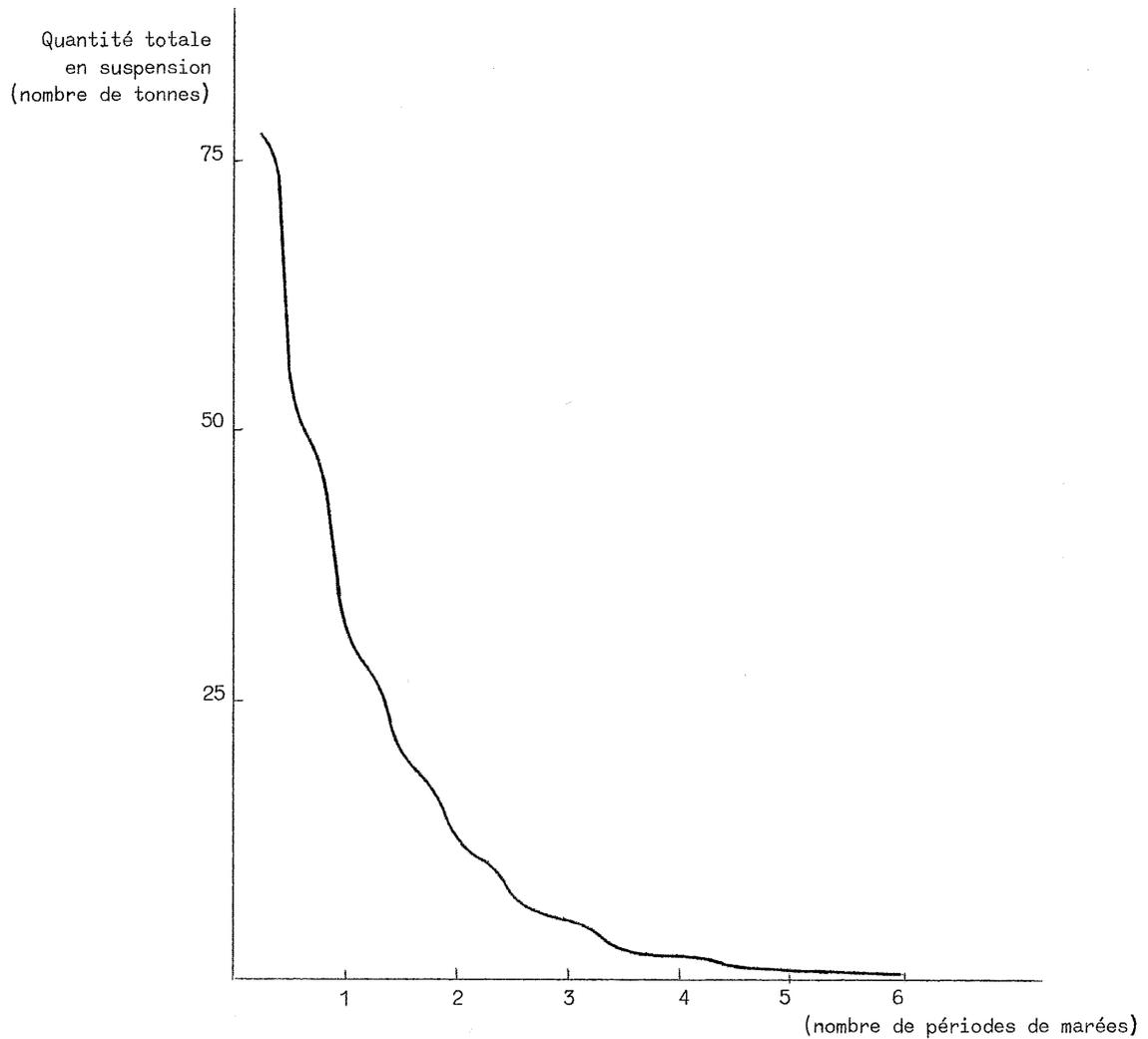


fig. 6.

Evolution temporelle de la quantité totale de matière en suspension. Noter l'influence des remises en suspension périodiques, caractérisées par les "bosses" de la courbe.

La figure 6 montre l'évolution dans le temps (exprimé en nombre de périodes de marées) de la quantité totale de matière en suspension. (Le déversement n'étant pas instantané, le début de la courbe est légèrement décalé par rapport à l'origine des temps. La courbe commence à la fin de l'opération de déversement.)

Les résultats théoriques concordent avec les observations accumulées lors des campagnes d'observation organisées dans le cadre du programme national belge sur l'environnement physique et biologique et lors des opérations de surveillance effectuées par la station des pêcheries d'Ostende. Les points principaux sont les suivants :

- Une décroissance rapide de la quantité totale de matière en suspension malgré une remise en suspension périodique au moment des courants de marées les plus intenses (fig. 6). Les bosses régulières apparaissant sur la courbe de décroissance générale reflètent la remise en suspension.

Un déplacement résiduel des sédiments de fond vers le nord-est manifesté en particulier par la division de la courbe 6 (500 mg/m^2) en deux et l'apparition d'une seconde zone de forte concentration de sédiments au nord-est du point de déversement. Ce déplacement résiduel est confirmé par les opérations de surveillance effectuées par la Station de Recherches sur les Pêcheries d'Ostende [De Clerck *et al.* (1972)].

L'accord entre résultats théoriques et observations est qualitatif parce que les observations ne se traduisent pas en mesures chiffrées.

Les figures 2 à 6 sont extraites de l'article de Nihoul et Adam (1975).

6.- Expression des interactions en fonction des concentrations moyennes

Jusqu'à présent, on a justifié la validité de l'équation (1.1) pour modéliser l'évolution de variables d'état soumises uniquement à la diffusion, l'advection et la sédimentation. La plupart du temps, les différentes variables d'état qui représentent le système formé par les

polluants déversés et la masse d'eau qui les reçoit interagissent entre elles, suivant des taux d'interactions [les \bar{I}_a de la formule (1.1)] qui dépendent généralement des concentrations et de divers paramètres et coefficients. La dérivation de l'équation (1.1) par intégration de l'équation tridimensionnelle sur la hauteur de la colonne d'eau a été effectuée en supposant qu'il existait dans l'équation originale des termes de sources et puits répartis dans le volume de la masse d'eau.

Les interactions linéaires (termes d'apparition ou de disparition proportionnels à la concentration) peuvent être supprimées par un changement de variable dépendante. Quant aux termes volumiques, ils n'interviennent pas (dans la paramétrisation de l'expression des variations verticales des concentrations en fonction des gradients horizontaux de celles-ci) si $H \ll L$, ce qui est une condition générale et nécessaire de validité de (1.1).

Les interactions non-linéaires dépendent des concentrations r_a , r_β , ... des variables d'état. Pour la dérivation de l'équation (1.1), on peut les considérer comme des sources volumiques (positives ou négatives selon qu'elles entraînent une apparition ou une disparition de la variable).

Elles apparaissent dans l'équation réduite sous la forme :

$$(1.35) \quad \bar{I}_a = H^{-1} \int_{-h}^{\xi} I_a(r_a, r_\beta, \dots, x_3, t) dx_3$$

où r_a, r_β, \dots n'ont pas encore été intégrées sur la profondeur. Le problème est d'exprimer les \bar{I}_a en fonction des $\bar{r}_a, \bar{r}_\beta, \dots$; on peut ici distinguer deux cas, selon que les \bar{I}_a doivent être déduits de connaissances acquises au laboratoire ou sont estimés d'après des mesures *in situ*.

a) Premier cas : on connaît la forme locale des interactions

Des connaissances sur la forme des I_a peuvent être acquises à la suite d'expériences en laboratoire, réalisées de manière à reproduire le mieux possible les conditions *in situ*; on peut en déduire des formulations analytiques des I_a en fonction des concentrations r_a, r_β, \dots . Les conditions de laboratoire sont en général telles qu'il

Il y a une parfaite homogénéisation des milieux fluides dans lesquels les expériences sont effectuées, c'est-à-dire qu'en tout point, la concentration est égale à la concentration moyenne :

$$(1.36) \quad r_a = \bar{r}_a = \frac{1}{V} \int_V r_a \, d\tau .$$

On obtient donc des formes d'interactions en fonction des concentrations locales. Si on veut passer de ces formes aux interactions exprimées en fonction de valeurs moyennes sur la profondeur des concentrations des variables d'état, il faut décomposer les formes initiales en série de Taylor, en se basant sur le fait que

$$(1.37) \quad r_a = \bar{r}_a + \hat{r}_a$$

$$(1.37') \quad \hat{r}_a \ll \bar{r}_a$$

autrement dit,

$$(1.38) \quad \begin{aligned} & I_a(r_a, r_\beta, x_3, t) \\ &= I_a(\bar{r}_a, \bar{r}_\beta, x_3, t) + \hat{r}_a \frac{\partial I_a}{\partial r_a} + \hat{r}_\beta \frac{\partial I_a}{\partial r_\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \hat{r}_\alpha \hat{r}_\beta \frac{\partial^2 I_a}{\partial r_\alpha \partial r_\beta} + \dots \end{aligned}$$

Si $\frac{\partial I_a}{\partial x_3}$ est très petit, on trouve en intégrant sur la profondeur et en négligeant les termes d'ordre supérieur

$$\bar{I}_a = H^{-1} \left[\int_{-h}^{\xi} I_a(\bar{r}_a, \bar{r}_\beta, x_3, t) \, dx_3 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \frac{\partial^2 I_a}{\partial r_\alpha \partial r_\beta} \int_{-h}^{\xi} \hat{r}_\alpha \hat{r}_\beta \, dx_3 \right]$$

les termes du premier ordre s'annulant par définition des \bar{r}_a , \bar{r}_β , ... ; l'annulation des intégrales

$$\int_{-h}^{\xi} \hat{r}_\alpha \hat{r}_\beta \, dx_3$$

n'est pas démontrable, mais on peut être certain de leur petitesse; il reste donc la première intégrale qui, si I_a dépend peu de x_3 , donne

$$(1.39) \quad \bar{I}_a = I_a(\bar{r}_a, \bar{r}_\beta, t)$$

au premier ordre.

Par conséquent, on peut donner aux termes \bar{I}_a la même forme qu'aux termes I_a en remplaçant simplement les r_a par leurs valeurs intégrées

\bar{r}_a ; l'erreur ainsi commise est du deuxième ordre; ce procédé n'est pas justifié si les interactions dépendent très fort de la profondeur. Il vaut mieux alors essayer de déterminer les formes des interactions à partir d'expériences où interviennent les concentrations préalablement intégrées; en l'occurrence, on retombe sur le deuxième cas.

b) Deuxième cas : les interactions sont estimées à partir de mesures *in situ*

La plupart du temps, les formes des interactions dont on dispose ont été estimées, par ajustement de paramètres (dont la description sort du cadre de ce travail) et réflexion théorique, à partir de courbes d'évolution des variables d'état en cause déterminées à l'aide de mesures *in situ*. Les courbes montrent en général des variations temporelles des concentrations intégrées, et l'information qu'on peut en déduire s'exprime donc directement en fonction des \bar{r}_a , que les interactions dépendent fortement ou non de la profondeur : l'effet de celle-ci est automatiquement intégré par le processus d'extraction de l'information. Il faut de plus noter que le plus généralement interviennent alors des concentrations intégrées non seulement sur la profondeur, mais sur des zones (surfaces) caractéristiques. L'information qu'on tire de cette sorte d'estimation est plus globale, moins locale donc moins précise que dans le premier cas; par contre, elle est directement exprimée en fonction des formes pratiquement utilisées des variables d'état.

Il faut noter avant d'aborder les développements suivants, qu'à l'heure actuelle, les termes d'interactions sont plus estimés que connus (que l'information ait été extraite de mesures en laboratoire ou *in situ*) et que, faute de moyens matériels, on n'a pas encore pu tester les résultats de simulations faisant intervenir de tels termes; les mesures effectives de variations de la concentration de tel ou tel composé provoquées par un déversement particulier sont difficiles, étant donné qu'à cause de la très grande dilution, ces variations sont d'un ordre de grandeur inférieur ou égal à l'erreur de mesure et aux fluctuations saisonnières naturelles. La simulation numérique basée sur

un modèle mathématique est donc quasiment le seul outil dont on dispose pour estimer la dispersion et le comportement à court terme de polluants issus de déversements.

7.- Remarques sur le choix des variables d'état

Les variables dont l'évolution est calculée à l'aide des équations de dispersion et du modèle de simulation sont les variables d'état du système étudié. Toutes les autres variables dépendantes (u, H) sont considérées comme des paramètres connus en fonction de l'espace et du temps, qui sont fournis par un autre modèle. C'est ce qui a permis notamment l'intégration K.B.M. des coefficients de diffusion exprimés en fonction de ces paramètres; un tel traitement ne serait évidemment pas possible si les (u, H) devaient être fournis par le modèle de simulation.

Chapitre II

L'intégration numérique de l'équation de dispersion

1.- Nécessité de l'intégration numérique

On a vu dans le chapitre précédent qu'il est possible de calculer une solution analytique (de similitude) de l'équation décrivant la dispersion d'un contaminant dont la concentration est \bar{r}_a dans une mer peu profonde; cette solution n'est cependant valide que si

- la variable d'état représente un composé passif n'interagissant pas avec le milieu; ou encore un composé disparaissant ou apparaissant en quantité proportionnelle à sa concentration, avec un taux de variation indépendant du temps;

- la distribution des courants est homogène sur toute la surface de la tache de polluant;

- l'ellipse de marée, c'est-à-dire le lieu que parcourt l'extrémité du vecteur-vitesse représentant le courant pendant une période de marée est effectivement une ellipse centrée;

- la profondeur est constante sur la même surface et l'élévation due à la marée est négligeable vis-à-vis de cette même profondeur.

Les restrictions à la validité de la solution analytique apportées par ces hypothèses sont telles que, en général, on ne peut l'utiliser pour les prédictions pratiques. En effet,

- la plupart des polluants déversés en mer interagissent avec l'écosystème marin, et les taux d'interaction dépendent très souvent du temps, de la concentration de la variable d'état elle-même et des concentrations d'autres variables d'état; les équations de dispersion des

diverses variables d'état du système étudié sont donc généralement fortement couplées entre elles par l'intermédiaire des termes d'interactions; même dans le cas où l'on peut admettre que l'apparition ou la disparition de la variable d'état ne dépend pas de la concentration d'autres composés (on en verra des exemples dans le chapitre consacré à l'étude des déversements industriels), le taux dépend soit du temps (cas de la sédimentation d'une suspension), soit de la variable d'état elle-même (cas de l'absorption par une biomasse de phytoplancton à peu près constante); le couplage non linéaire exclut toute possibilité de solution analytique générale, de même que la dépendance temporelle des taux d'interactions, car celle-ci est calculée à partir de paramètres dont les valeurs ne sont connues qu'en un nombre discret d'instantanés séparés par des intervalles de temps réguliers, et ne possède par conséquent aucune formulation analytique;

- les variations spatiales de la direction instantanée du courant ne sont pas nécessairement négligeables sur l'étendue d'une tache de polluant; ainsi si l'on se réfère à la figure 1 on constate que l'isocourbe mesurée a une allure 'en boomerang' proche de l'isocourbe théorique; on peut estimer que cette déformation est due à l'inhomogénéité du champ de vitesse, qui provoque une advection différentielle;

- le vecteur vitesse ne décrit jamais une ellipse parfaite; la présence d'harmoniques déforme le contour de l'ellipse et l'existence d'un courant résiduel jamais négligeable en mer du Nord la décentre. Par conséquent, l'expression (1.16') du vecteur vitesse est inexacte;

- les variations spatiales de la profondeur peuvent être prises en compte et la profondeur réelle

$$H = h + \zeta$$

varie avec ζ qui n'est pas beaucoup plus petit que h dans le Southern Bight ($\frac{\zeta}{h} \sim 0,2$ à $0,4$).

Cependant, si la présence de termes de couplage empêche de résoudre analytiquement la dispersion de polluants actifs, si l'influence des inhomogénéités spatiales du champ des vitesses est importante car le terme d'advection est dominant dans l'équation (1.1), les variations

de la profondeur et la déformation de l'ellipse de marée ont pour seule conséquence d'empêcher un calcul analytique des coefficients de diffusion; donc, si le champ des vitesses est homogène, il est possible de calculer numériquement les coefficients de diffusion à l'aide de la formule (1.18) et si les variables d'état sont passives, d'introduire ces coefficients dans la solution analytique (1.19), à condition que les axes choisis soient les axes principaux de l'ellipse de diffusion. En effet, la déformation de l'ellipse de marée et la variation de la profondeur ne changent rien au fait que, dans un système de référence se déplaçant à la vitesse du courant de marée, la variation totale des concentrations des variables d'état au cours d'une période de marée est faible; les hypothèses permettant l'utilisation de la technique K.B.M. reçoivent encore la même justification.

Par conséquent, seules les deux premières raisons imposent véritablement l'emploi d'une méthode d'intégration numérique.

2.- Utilité de la technique K.B.M.

L'intégration K.B.M. dont on vient de rappeler la validité dans le paragraphe précédent, permet de simplifier l'expression des diffusivités produites par l'effet cisailant; la solution obtenue analytiquement ou numériquement, est une solution approchée, qui est valide tant que, pour la variable étudiée, la variation due à la diffusion sur la période d'intégration est faible, ce qui est le cas dans les conditions énoncées précédemment; l'erreur commise sur la solution complète sera donc faible; en particulier, si l'on étudie l'évolution sur des intervalles de temps supérieurs à la période de la marée, l'erreur commise sur l'influence des termes de diffusion sera faible elle aussi. L'intégration K.B.M. ne modifie pas, d'autre part, l'influence des termes d'advection qui est dominante à court terme. Bien que l'on ne recherche pas une solution analytique approchée de l'équation (1.1), l'intégration K.B.M. est cependant intéressante car elle produit une forme de l'opérateur de diffusion, issue de (1.17) en tenant compte que H

varie plus faiblement que $\bar{u} \bar{u}$ au cours du temps :

$$(2.1) \quad \mathcal{D}^*(\bar{r}) = H^{-1} \nabla \cdot \left[\int_t^{t+\tau} \gamma \frac{H^2}{\bar{u}} \bar{u} (\bar{u} \cdot \nabla) d\tau \right] \bar{r}$$

mieux conditionnée pour la résolution de l'équation de dispersion par la plupart des méthodes aux différences finies, comme on va le montrer dans le paragraphe suivant. Par contre, lorsque les méthodes aux différences finies ne nécessitent pas cette manipulation, elle devient inutile.

3.- Type de l'équation de dispersion

En décomposant les opérateurs différentiels d'advection et de diffusion en dérivées suivant les axes de coordonnées, en laissant de côté les termes \bar{I}_α et \bar{S}_α qui n'interviennent pas dans la détermination du type de l'équation puisqu'ils ne contiennent jamais de gradients, et en ignorant les indices α pour la simplicité de l'écriture, on obtient

$$(2.2) \quad \begin{aligned} & \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_1} + \bar{u}_2 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_2} \\ & = H^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial x_1} \left(\gamma \frac{H^2}{\bar{u}} \bar{u}_1^2 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\gamma \frac{H^2}{\bar{u}} \bar{u}_1 \bar{u}_2 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_2} \right) \right. \\ & \quad \left. + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\gamma \frac{H^2}{\bar{u}} \bar{u}_1 \bar{u}_2 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\gamma \frac{H^2}{\bar{u}} \bar{u}_2^2 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_2} \right) \right] . \end{aligned}$$

L'équation est donc du deuxième ordre de dérivation, et bien que les termes d'advection $\bar{u}_i \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_i}$ puissent, au moment où le courant est maximum, être beaucoup plus grands (20 à 50 fois) que les termes de diffusion

$$H^{-1} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\gamma \frac{H^2}{\bar{u}} \bar{u}_i \bar{u}_j \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_j} \right)$$

du deuxième ordre de dérivation, ceux-ci ne peuvent être négligés. Leur rôle est physiquement essentiel dans le comportement des variables d'état; ainsi, la diffusion est le phénomène dominant si l'on se place dans un référentiel en mouvement avec la marée (voir chapitre I, deuxième partie) et si l'on suppose que les interactions sont négligeables et la distribution des paramètres hydrodynamiques homogène. La partie principale de

l'opérateur spatial est, au sens de la théorie des opérateurs différentiels [Epstein (1962)] :

$$H^{-1} \sum_{i,j=1}^2 \gamma H^2 \frac{\bar{u}_i \bar{u}_j}{\bar{u}} \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_i \partial x_j} + \epsilon \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial t^2}$$

car seules interviennent les dérivées d'ordre supérieur pour la détermination du type de l'équation. En posant

$$\mu_{ij} = \gamma H^2 \frac{\bar{u}_i \bar{u}_j}{\bar{u}}$$

l'équation (2.2) s'écrit

$$(2.4) \quad H^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial t} \right) \begin{pmatrix} \mu_{11} & \mu_{12} & 0 \\ \mu_{21} & \mu_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial t} \end{pmatrix} \bar{r} \\ = f \left(\frac{\partial \bar{r}}{\partial t}, \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_1}, \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_2}, \dots \right) .$$

Comme $\epsilon = 0$, la matrice des coefficients des termes d'ordre de dérivation supérieur est semi-définie, ce qui permet de conclure que l'équation (2.2) est de type parabolique [Epstein (1962)]. Cependant, ce n'est pas une équation parabolique de type classique comme l'équation de la chaleur, car la matrice des coefficients de l'opérateur spatial

$$(2.5) \quad H^{-1} \begin{pmatrix} \mu_{11} & \mu_{12} \\ \mu_{21} & \mu_{22} \end{pmatrix}$$

est également semi-définie; en effet :

$$(2.6) \quad \Delta = H^{-2} \text{dtm} \begin{pmatrix} \mu_{11} & \mu_{12} \\ \mu_{21} & \mu_{22} \end{pmatrix} = \frac{\gamma^2 H^2}{\bar{u}^2} [(\bar{u}_1 \bar{u}_2)^2 - \bar{u}_1^2 \bar{u}_2^2] = 0 .$$

L'opérateur spatial est donc lui aussi parabolique, contrairement à l'opérateur spatial de l'équation de la chaleur qui est elliptique; ce caractère particulier entraîne que, en choisissant un système d'axes adéquat, on peut réduire la dimension de l'opérateur spatial : il suffit

à chaque instant, de prendre x_1 dans la direction du courant, de sorte que

$$\bar{u}_1 = \bar{u}, \quad \bar{u}_2 = 0;$$

l'équation (2.2) s'écrit dès lors

$$(2.7) \quad \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x} = H^{-1} \frac{\partial}{\partial x} \left(\gamma H^2 \bar{u} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x} \right)$$

qui représente une diffusion unidirectionnelle. Physiquement, il est clair que la diffusion horizontale apparente induite par l'effet de cisaillement a lieu dans la direction du courant instantané; la diffusion n'est bidimensionnelle qu'à cause de la rotation du vecteur vitesse de la marée. Par contre, la diffusion turbulente est à chaque instant bidimensionnelle; on l'a négligée jusqu'ici, ce qui a provoqué la dégénérescence de l'opérateur spatial; l'addition du terme

$$(2.8) \quad \bar{T} = \nabla \cdot (\kappa \nabla \bar{T})$$

à l'équation (2.2) et (2.4) supprime une des racines nulles, de sorte que l'opérateur spatial devient elliptique.

La valeur du déterminant est alors :

$$(2.9) \quad H^{-2} \det \begin{pmatrix} \mu_{11} + \kappa H & \mu_{12} \\ \mu_{21} & \mu_{22} + \kappa H \end{pmatrix} \sim -\kappa (\gamma H \bar{u}).$$

Ce déterminant est une mesure de l'aplatissement de l'ellipse de diffusion, comme on le montrera plus loin.

L'équation d'évolution est donc parabolique, avec un opérateur spatial également parabolique et où les termes d'advection (du premier ordre) sont dominants : ils sont en moyenne 15 à 30 fois plus grands que les termes de diffusion. L'intégration numérique d'une telle équation de type advectif-diffusif est un problème encore mal résolu à l'heure actuelle [Hirsch (1975)], *a fortiori* si l'opérateur de diffusion est singulier. La contribution essentielle de ce travail est de proposer deux méthodes relativement bien adaptées à la solution de ce difficile problème. Avant d'aborder dans les détails les difficultés soulevées par ce type d'équation, on va se pencher sur les conditions initiales et aux limites nécessaires pour la détermination de la solution.

4.- Nature du problème d'évolution

Un problème d'évolution comme celui modélisé par l'équation (2.2) peut être soit aux valeurs initiales, soit aux valeurs initiales et conditions aux limites. Le problème de l'évolution des concentrations de polluants issus de déversements en pleine mer est physiquement, de la première espèce. En effet, après intégration des équations tridimensionnelles originales sur la hauteur de la colonne d'eau, l'effet des frontières physiques que sont l'interface air-mer et l'interface mer-sédiment est inclus dans les équations d'évolution bidimensionnelles (2.2); il ne reste plus de frontières réelles sur lesquelles on puisse *imposer* des valeurs aux concentrations des variables d'état ou à leurs flux (les déversements étant sensés s'effectuer au large, l'influence des côtes, frontières physiques bien nettes, est négligeable). Cependant, pour des raisons pratiques liées aux techniques d'intégration de problèmes aux valeurs initiales, il est difficile de profiter de la simplicité de résolution qui caractérise ces problèmes.

a) Seules les méthodes explicites sont utilisables pour l'intégration de problèmes aux valeurs initiales. En plus des conditions de stabilité numérique souvent draconiennes, des difficultés particulières qui seront détaillées plus loin prohibent leur utilisation.

b) On est obligé dans tous les cas d'effectuer l'intégration numérique sur une grille de dimensions limitées : le temps pendant lequel on peut calculer l'évolution est déjà borné par ces dimensions; et, dans le problème qui est l'objet de ce travail, la tache initiale se déplace au gré des courants, s'étale sous l'effet de la diffusion et des interactions avec le milieu marin, tant et si bien qu'elle finit par s'approcher des limites de la grille. On peut alors adopter plusieurs attitudes :

i) considérer que l'évolution est terminée; or cela arrive d'autant plus vite que la surface de la grille est plus limitée (c'est-à-dire d'autant plus vite que la grille est fine), on ne peut donc calculer de longues évolutions (quelques heures, pour fixer les idées);

ii) modifier la valeur sur la frontière; cela n'est pas possible avec une méthode aux valeurs initiales pures, puisque sur la 'frontière'

(la limite de la grille) les variables dépendantes gardent leur valeur initiale tout au long de l'intégration. Le maintien de cette 'valeur limite initiale' a par ailleurs une autre conséquence : tout se passe comme si la frontière se comportait comme un puits ou comme une source (comme un puits si la concentration intérieure est supérieure à la concentration sur la frontière, comme une source dans le cas contraire).

Cet effet parasite demeure négligeable tant que la valeur des variables d'état dans la région proche de la frontière reste très voisine de la valeur fixée, mais modifie considérablement le comportement et l'allure des taches de polluants lorsque celles-ci s'approchent de la limite de la grille, ce qui arrive tôt ou tard; pour éviter un tel inconvénient, on peut

- mettre à jour les valeurs sur la frontière en tenant compte des valeurs voisines; on retombe ainsi sur un problème mixte, puisqu'on doit utiliser des relations aux frontières. Cette possibilité n'est justifiable que tant que les valeurs des variables près des frontières restent petites par rapport à leurs valeurs maximales.

- élargir à temps la grille pour éviter la croissance exagérée des valeurs des concentrations sur sa limite. L'élargissement n'est possible que si les valeurs limites sont modifiées au cours du temps; cette dernière possibilité n'est applicable que si on profite simultanément de la technique précédente. Le chapitre 3, deuxième partie, exposera en détail les problèmes associés à des déplacements des grilles d'intégration.

Considérer un problème aux valeurs initiales pures limite donc fortement les possibilités de simulation. Cependant, le phénomène de dispersion en question n'est pas, comme on l'a dit plus haut, un problème où l'on peut imposer des conditions aux limites. On a donc affaire à un problème mixte un peu particulier, car les frontières sont des limites imposées par le calcul numérique, et non par la physique elle-même. Il n'y a pas d'inconvénient à utiliser des techniques implicites pour l'intégration, à condition que l'on tienne compte de la nature particulière des frontières pour déterminer les relations aux limites. On reviendra plus loin sur les avantages des méthodes implicites.

5.- Examen des conditions aux limites

Comme on l'a suggéré plus haut, les conditions aux limites ne servent pas à imposer des relations sur une frontière physique, mais à déterminer les variations des valeurs des variables d'état aux points limites d'une grille d'intégration. Comme l'advection est le phénomène qui influence le plus le comportement des taches de polluants, il est important d'en tenir compte dans l'expression des conditions aux limites.

La figure 7 montre une grille d'intégration schématisée, avec, attaché en chacun de ses points, un vecteur représentant la vitesse

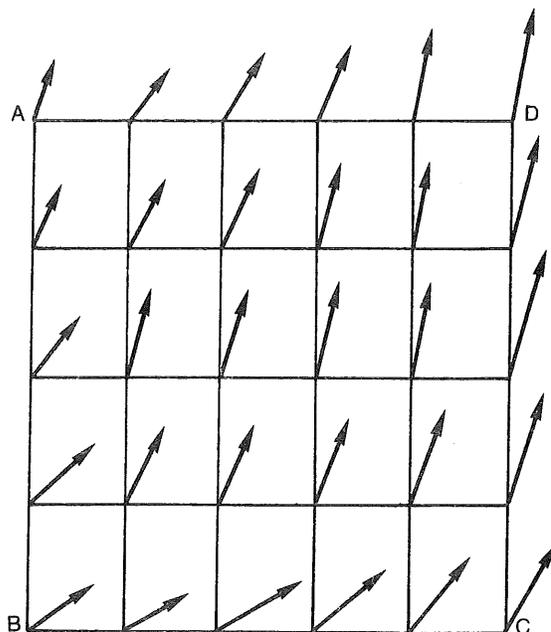


fig. 7.

Grille d'intégration aux points de laquelle sont schématisés les vecteurs représentant le champ de vitesse instantanée.

instantanée du courant. L'effet de l'advection est de faire entrer dans la zone recouverte par la grille, des masses d'eau par les côtés AB et BC, et d'en faire sortir par les côtés CD et DA. Les masses d'eau 'fraîche' apportées par le courant dans la zone de déversement

ne contiennent pas de polluants produits par le déversement lui-même, ou en contiennent une très faible quantité que la diffusion y a apportée; en tous cas, les concentrations en polluants déversés de ces masses d'eau sont nécessairement beaucoup plus faibles que les concentrations maxima dans la zone étudiée, car on ne permet pas, par des techniques décrites dans le chapitre suivant, aux taches de polluants de s'approcher trop près des limites de la grille. Par conséquent, on peut admettre sans faire une grande erreur que les concentrations des masses d'eau fraîche en polluants sont égales aux concentrations moyennes dans la région entourant la zone de déversement; les concentrations aux points situés sur les côtés AB et BC peuvent donc prendre ces valeurs moyennes.

Par contre, sur les côtés CD et DA, les concentrations dépendent essentiellement des valeurs qu'avaient les variables d'état dans les instants précédents dans une région voisine de ces côtés : à ces points limites, on imposera simplement une relation qui implique que l'équation d'évolution de chaque variable y est vérifiée. Mathématiquement les côtés CD et DA sont des frontières ouvertes où aucune condition aux limites ne peut être imposée (il ne faut pas oublier que, bien que le type des équations d'évolution soit parabolique, la dominance des termes d'advection leur donne un caractère quasi hyperbolique, surtout dans les régions où les courbures des distributions de concentrations sont faibles, ce qui est particulièrement le cas en dehors des régions centrales des taches de polluants). Des relations entre points situés près des régions frontières sont nécessaires pour résoudre les systèmes d'équations engendrés par les méthodes implicites d'intégration; les seules qui soient admissibles sur des frontières ouvertes sont des relations non contraignantes, dont les plus naturelles dérivent directement les équations d'évolution elle-mêmes [Marchuk (1970)]. On précisera plus loin la forme de ces relations. La discrétisation des équations utilisée dans ces relations est moins précise que celle qui est utilisée aux points intérieurs, mais l'erreur supérieure qui apparaît près des frontières pour cette raison n'affecte pas la précision globale pour deux raisons :

- par construction des algorithmes, les concentrations aux frontières doivent rester beaucoup plus faibles que les concentrations intérieures; même si l'erreur relative due à la discrétisation est plus forte, l'erreur absolue est plus petite que l'erreur absolue aux points intérieurs;

- cette erreur à la frontière est 'chassée' par le courant qui pointe vers l'extérieur du domaine d'intégration le long des côtés de la frontière où elle se produit, elle ne peut donc se propager à l'intérieur de la grille.

Le courant dû à la marée (éventuellement combiné à un courant dû à une tempête) n'a pas une direction constante; périodiquement, il se produit des renversements de courant qui ont pour effet, dans le problème étudié ici, de modifier le type des frontières : ainsi, une demi-période de marée après la situation représentée sur la figure 7, les types des frontières ABC et CDA sont-ils permutés; on peut alors imposer des concentrations sur CDA et des relations naturelles sur ABC. Pour qu'on puisse imposer les valeurs moyennes sur CDA, il faut que les concentrations qu'on y a calculées par application des relations naturelles ne soient pas trop différentes des concentrations moyennes, ce qui implique que la tache de polluant ne se soit pas trop rapprochée de CDA au cours de la demi période de marée qui précède. En pratique, au lieu d'imposer les valeurs moyennes, on peut imposer les valeurs à l'instant précédent aux mêmes points; cela permet de laisser les taches se rapprocher un peu plus de la frontière; cependant de cette façon, les frontières deviennent des sources de polluants si les différences avec la zone extérieure sont trop marquées. Dans tous les cas, donc, il vaut mieux que les frontières demeurent aussi éloignées que possible du centre des distributions de polluants issus de déversements.

Un dernier phénomène doit être considéré : lorsque le courant est presque parallèle à un des axes de coordonnées, la valeur de la composante du vecteur vitesse suivant l'axe perpendiculaire est faible et peut changer de signe d'un côté à l'autre de la grille, suivant les cas, on a convergence du courant (et deux conditions aux limites à imposer), ou divergence (deux frontières ouvertes, donc aucune condition physique, mais éventuellement des relations naturelles. Dans la région

centrale de la grille, il y a 'convergence' ou 'divergence' des masses d'eau; ce phénomène de courte durée, et associé à une vitesse transversale faible, est très curieux : en deux points voisins de la grille, la composante transversale du vecteur-vitesse change de signe (ceci n'est possible, bien entendu, qu'à cause de la dimension finie de la grille d'intégration); la présence d'un terme de diffusion physique ou artificielle est nécessaire pour amortir ce 'choc'.

On pourrait songer à lever les difficultés causées par l'obligation de traiter un problème aux valeurs initiales pures comme un problème mixte en imposant des conditions aux limites issues d'une solution analytique valable pour $\|s\| \rightarrow \infty$. Ainsi, sur une frontière Γ , on pourrait imposer

$$\bar{r}(s_{\Gamma}, t) = \int_0^t G(s_{\Gamma}, t-\tau) d\tau$$

où G est la fonction de Green du problème, obtenue en supposant que les coefficients des équations d'évolution sont homogènes, les inhomogénéités locales n'ayant guère d'importance au loin. Cependant, outre une grande complexité du calcul de cette fonction, due notamment au fait que les coefficients dépendent du temps, l'impossibilité d'appliquer le principe de superposition à des équations non linéaires (or les termes d'interaction sont le plus souvent non linéaires) prohibe cette technique dans le cas le plus général. Pour terminer il faut encore insister sur le fait que, dans le problème traité, les conditions aux limites ne sont que des relations mathématiques, nécessaires seulement à la résolution des équations algébriques engendrées par les schémas de discrétisation.

6.- Choix des méthodes numériques d'intégration

La plupart des méthodes d'intégration numérique sont conçues pour traiter des équations de type bien défini : hyperbolique, parabolique ou elliptique. Or, si l'équation décrivant la dispersion des polluants dans une mer peu profonde est parabolique, le caractère dominant des termes d'advection tend à la rapprocher des équations de type hyperbolique. Comme on l'a déjà signalé, des méthodes efficaces pour résoudre

de telles équations n'existent guère dans la littérature consacrée aux problèmes aux dérivées partielles, ainsi qu'on va le mettre en évidence dans l'étude qui suit. Cependant, avant d'aborder l'étude critique de différentes méthodes possibles, il convient de rappeler quelques notions classiques relatives aux schémas d'intégration numérique, ainsi que de préciser un autre concept encore peu habituel mais fort utile.

6.1.- Erreur de troncature

L'erreur de troncature d'un schéma discret est la différence entre le développement en série de Taylor du schéma et l'équation aux dérivées partielles que le schéma est sensé approcher. Les termes de l'erreur de troncature sont groupés en fonction du degré des incréments temporel et spatiaux : Δt , h_1 , h_2 .

Ainsi l'erreur d'un schéma quelconque s'écrit généralement

$$A \Delta t + B_1 h_1 + B_2 h_2 + C \Delta t^2 + D_1 h_1^2 + D_2 h_2^2 + D_3 h_1 h_2 + \dots$$

La partie principale de l'erreur de troncature est l'ensemble des termes de degré minimum de chacun des incréments, dont les coefficients ne sont pas nuls. Ainsi, la partie principale de l'erreur d'un schéma précis au premier ordre en Δt et au deuxième ordre en h_1 et h_2 est

$$A \Delta t + D_1 h_1^2 + D_2 h_2^2 + D_3 h_1 h_2 .$$

On dit souvent que le schéma est alors

$$O(\Delta t + h_1^2 + h_2^2 + h_1 h_2) .$$

6.2.- Diffusion numérique

La diffusion numérique est une conséquence de l'imprécision du schéma. La diffusion numérique du deuxième ordre est l'ensemble des termes de l'erreur de troncature contenant les dérivées secondes spatiales; le(s) coefficient(s) de diffusion numérique est (sont) le(s) coefficient(s) de la (des) dérivée(s) seconde(s); la diffusion numérique du quatrième, sixième, ... ordre est l'ensemble des termes contenant des dérivées quatrièmes, sixièmes, etc.; une diffusion d'ordre élevé n'a d'effet que si la diffusion d'ordre inférieur est nulle ou négligeable.

Lorsque les coefficients de diffusion numérique sont positifs, ils contribuent à l'amortissement de la solution numérique; dans le cas contraire, la diffusion numérique est souvent une source d'instabilité. Le cas où la diffusion numérique est du deuxième ordre est particulièrement remarquable : la forme de ce terme est analogue à celle d'une diffusion physique; ceci est particulièrement important lorsque l'équation à résoudre modélise, entre autres, des phénomènes de diffusion. On reviendra plus loin sur cette question.

6.3.- Solution élémentaire de l'équation différentielle

Soit l'équation linéaire

$$(2.10) \quad \frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} .$$

Une solution élémentaire de cette équation est

$$(2.11) \quad c(x,t) = \rho(t) \exp(i\omega x) .$$

Introduisant (2.11) dans (2.10), on trouve

$$\rho(t) = \rho_0 \exp[(-iV\omega - D\omega^2) t]$$

d'où

$$c(x,t) = \rho_0 \exp[-(iV\omega + D\omega^2) t] \exp(i\omega x) .$$

La phase de la solution élémentaire est

$$\omega(x - Vt)$$

et son module vaut

$$\rho_0 \exp(-D\omega^2 t) .$$

Tous deux dépendent du nombre d'onde ω .

6.4.- Facteur d'amplification d'un schéma numérique

Le facteur d'amplification d'un schéma numérique s'obtient en introduisant l'expression (2.11) dans le schéma. Ainsi, si on discrétise

(2.10) par

$$(2.12) \quad c_j^{n+1} - c_j^n = -\frac{\Delta t V}{2h} (c_{j+1}^n - c_{j-1}^n) + \frac{D \Delta t}{h^2} (c_{j+1}^n + c_{j-1}^n - 2 c_j^n) ,$$

on obtient

$$(2.13) \quad a = \frac{\rho^{n+1}}{\rho^n} = 1 - 2 \frac{D \Delta t}{h^2} (1 - \cos \omega h) - i \frac{V \Delta t}{h} \sin \omega h .$$

Le facteur d'amplification

$$a = \frac{\rho^{n+1}}{\rho^n}$$

qui représente la déformation de la solution élémentaire (2.13) au cours d'un pas temporel Δt est caractérisé par sa phase et son module, dépendant tous deux de ω . La plupart du temps, et contrairement à ce qui se passe pour la solution élémentaire de l'équation différentielle exacte, la phase et le module du facteur d'amplification dépendent tous deux simultanément de V et de D . Ainsi, la phase de (2.13) vaut

$$\text{arctg} \frac{- \frac{V \Delta t \sin \omega h}{h}}{1 - \frac{2 D \Delta t (1 - \cos \omega h)}{h^2}}$$

et son module vaut

$$\left\{ \frac{V^2 \Delta t^2}{h^2} \sin^2 \omega h + \left[1 - \frac{2 D \Delta t}{h^2} (1 - \cos \omega h) \right]^2 \right\}^{\frac{1}{2}} .$$

6.5.- Facteur de propagation

Leendertse (1967) a introduit cette notion pour mesurer l'écart de phase et d'amplitude entre la solution élémentaire de l'équation différentielle et la solution élémentaire du schéma numérique. Le facteur de propagation est défini comme le rapport entre l'onde (ou solution élémentaire) calculée et l'onde (ou solution élémentaire) théorique après que celle-ci se soit propagée sur une distance égale à sa longueur d'onde $L = \frac{2\pi}{\omega}$.

La phase de l'onde physique vaut $- 2\pi$ et son module

$$\rho_0 \exp(- D\omega^2 T) .$$

Or T , temps de propagation sur une distance égale à L , vaut $\frac{L}{V}$; le module vaut donc

$$\exp(-D \frac{4\pi^2 V}{L}) .$$

Si Δt est tel que $m \Delta t = T$ (m sera supposé entier pour simplifier) alors, il faut m applications d'un schéma numérique tel que (2.16) pour arriver à la solution numérique au temps T ; la déformation de l'onde est produite par m applications du facteur a ; le facteur de propagation vaut donc

$$f = a^m \exp(D \frac{4\pi^2 V}{L}) \exp(+2i\pi) .$$

Si $a = |a| \exp(-i\varphi)$,

alors

i) $|f| = |a|^m \exp(4\pi^2 D \frac{V}{L})$ représente le rapport entre l'amortissement numérique et l'amortissement physique; si ce rapport est < 1 , les modes numériques sont plus vite amortis que les modes physiques. Idéalement, ce rapport doit être aussi proche que possible de 1.

ii) $-m\varphi + 2\pi$ représente le déphasage entre l'onde numérique et l'onde physique. Idéalement : $-m\varphi + 2\pi = 0$; si $-m\varphi + 2\pi > 0$ l'onde numérique se propage moins vite que l'onde réelle; $\frac{m\varphi}{2\pi}$ est une mesure du rapport des vitesses de propagation numérique et physique; idéalement, $\frac{m\varphi}{2\pi} = 1$; généralement, $\frac{m\varphi}{2\pi} < 1$. Si $\frac{m\varphi}{2\pi}$ est très différent de 1, la *dispersion* des modes numériques est importante. $\frac{m\varphi}{2\pi}$ est égal au rapport $\frac{V_\omega^*}{V_\omega}$ des vitesses des ondes numériques et physiques de nombre d'onde ω .

6.6.- Remarque sur le facteur d'amplification

Le facteur d'amplification d'un schéma numérique est une caractéristique essentielle; non seulement il permet d'étudier l'amortissement et la dispersion des modes numériques mais encore, il conditionne la stabilité de la méthode, comme on le verra plus loin.

6.7.- Nombre de Reynolds de maille

Le nombre de Reynolds de maille mesure le rapport entre l'influence des termes d'advection et des termes de diffusion dans un schéma discret. Il vaut

$$R_m = \frac{\frac{|u| \Delta t}{h}}{\frac{D \Delta t}{h^2}} = \frac{|u| h}{D} .$$

Hirsch et Rudy (1974), entre autres, ont montré que ce paramètre conditionne la régularité des solutions des équations advecto-diffusives. Le coefficient D doit être pris comme la diffusion totale, y compris la diffusion numérique.

6.8.- Méthode prédicteur-correcteur

Soit une équation

$$(2.14) \quad \frac{\partial c}{\partial t} = f(t, c, x)$$

où f peut être un opérateur différentiel en x .

Yanenko (1970) et Marchuk (1970) définissent ainsi une méthode prédicteur-correcteur :

- prédicteur $c^{n+\frac{1}{2}}$:

$$(2.15) \quad c^{n+\frac{1}{2}} = c^n + \frac{\Delta t}{2} f^*(n \Delta t, x, c) ;$$

- correcteur c^{n+1} :

$$c^{n+1} = c^n + \frac{\Delta t}{2} f[(n + \frac{1}{2})\Delta t, x, c^{n+\frac{1}{2}}]$$

où f^* est une approximation de f au temps $n \Delta t$ ou au temps fictif $(n + \frac{1}{2}) \Delta t$.

Dans le cas où f n'est pas un opérateur différentiel, on montrera plus loin que ce schéma est marginalement stable; d'autre part, dans le cas le plus général, il est centré dans le temps : en effet, l'erreur en Δt vaut

$$\frac{\Delta t^2}{12} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}$$

sans qu'on ait dû recourir à une approximation implicite en f . Cette dernière qualité est particulièrement importante dans le problème traité ici car f , qui représente alors l'opérateur d'advection-diffusion et

les interactions, contient des termes en dérivées croisées et des fonctions non-linéaires des variables d'état; une approximation implicite de termes de ce type entraînerait une lourdeur de calcul incompatible avec les buts fixés pour cette présente étude; par conséquent, le schéma du type prédicteur-correcteur est bien adapté à la résolution d'équations telles que celles traitées dans ce travail.

Toutes les méthodes d'intégration sélectionnées dans une étape préliminaire sont donc du type prédicteur-correcteur.

7.- Applicabilité des méthodes conçues pour la résolution d'équations hyperboliques

On entend ici par équations hyperboliques des équations de la forme

$$(2.16) \quad \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \bar{r} = 0$$

c'est-à-dire similaire à (2.2) sans termes de diffusion. Pour cette étude préliminaire on se limitera à l'examen de méthodes applicables à des équations unidimensionnelles mais facilement généralisables à des problèmes bidimensionnels, et qui ont une structure prédicteur-correcteur. Une caractéristique générale des méthodes classiques pour l'intégration d'équations hyperboliques est la présence de termes introduisant une diffusion numérique. Comme l'équation à résoudre (2.2) comporte de la diffusion physique, il importe que la méthode choisie n'introduise pas une diffusion numérique trop importante ou de structure fort différente (par exemple isotrope alors que la diffusion physique est très anisotrope).

7.1.- Méthode de Lax-Wendroff

Le schéma de Lax-Wendroff a une structure prédicteur-correcteur [Richtmeyer et Morton (1967)] :

- prédicteur :

$$(2.17) \quad \frac{2}{\Delta t} \left[\bar{r}_j^{n+1/2} - \frac{1}{2} (\bar{r}_{j+1}^n + \bar{r}_{j-1}^n) \right] = - \frac{V}{2h} (\bar{r}_{j+1}^n - \bar{r}_{j-1}^n) ;$$

- correcteur :

$$(2.17') \quad \frac{1}{\Delta t} (\bar{r}_j^{n+1} - \bar{r}_j^n) = - \frac{V}{2h} (\bar{r}_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_{j-1}^{n+\frac{1}{2}}) .$$

Le facteur d'amplification du schéma vaut

$$\frac{\rho^{n+1}}{\rho^n} = 1 - 2q^2 \sin^2 \omega h - 2iq \sin \omega h \cos \omega h$$

en posant

$$q = \frac{V \Delta t}{2h} .$$

Le critère de stabilité est $q < 1$, donc n'est pas très restrictif.

Cependant, le premier pas du schéma est affecté d'une diffusion numérique

$$\frac{h^2}{\Delta t} \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x^2} .$$

Pour des valeurs typiques de V et Δt , par exemple $V = 0,5$ m/s et $\Delta t = 500$ s (on impose $\frac{V \Delta t}{h} = 1$), le coefficient de diffusion numérique vaut environ 125 m²/s alors que la diffusion physique ne dépasse jamais 20 m²/s au plus fort du courant de marée; cette diffusion numérique provient de la moyenne :

$$\frac{1}{2} (\bar{r}_{j+1}^n + \bar{r}_{j-1}^n) ;$$

dans le cas où on étend le schéma à deux dimensions, ce terme devient

$$\frac{1}{4} (\bar{r}_{i,j+1}^n + \bar{r}_{i,j-1}^n + \bar{r}_{i+1,j}^n + \bar{r}_{i-1,j}^n)$$

qui donne une diffusion numérique :

$$\frac{1}{2 \Delta t} (h_1^2 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1^2} + h_2^2 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2^2})$$

relativement isotrope, donc de structure fort différente de la diffusion physique réelle. Bien que dans l'erreur de troncature du schéma complet n'apparaisse pas de terme en $\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x^2}$, il apparaît un amortissement très net des modes numériques, comme on le voit sur la figure 12.

Le déphasage de ces modes sur les modes physiques équivalents est donné par le rapport $\frac{V_\omega^*}{V_\omega}$ des vitesses de propagation respectives. En comparant ce rapport à celui fourni par deux autres méthodes étudiées plus loin, on constate qu'il est nettement moins bon pour la méthode de

Lax-Wendroff. Ainsi, dans le domaine des ondes moyennes (longueurs d'onde équivalente à 10 à 15 fois le pas de la grille d'intégration), le déphasage des modes calculés par Lax-Wendroff est environ deux fois plus grand que celui produit par les deux autres méthodes. On constate également que, si les deux autres schémas cessent de reproduire les modes de la solution dont la longueur d'onde est $\leq 2h$, le schéma de Lax-Wendroff a sa fréquence de coupure à $n = 4$; encore une fois, ceci est dû à la moyenne sur \bar{r}_j^n . Or comme les solutions des phénomènes à simuler comporteront souvent des modes de moyen et grand nombre d'onde $\omega = \frac{2\pi}{Nh}$, cette caractéristique est très ennuyeuse. Le schéma de Lax-Wendroff s'avère donc très mal adapté à la résolution d'un problème de dispersion tel que celui traité ici.

7.2.- Schéma explicite I

On s'est donc tourné vers d'autres schémas prédicteur-correcteur explicites. Le premier, à l'instar du schéma de Lax-Wendroff, comporte de la diffusion numérique dans le prédicteur, mais pas dans le correcteur; la diffusion numérique provient d'une discrétisation décentrée de $\frac{\partial \bar{r}}{\partial x}$:

$$(2.18) \quad V \frac{\partial \bar{r}}{\partial x} \sim \frac{V}{h} (\bar{r}_j - \bar{r}_{j-1}) \quad \text{si} \quad V \geq 0$$

$$(2.18') \quad V \frac{\partial \bar{r}}{\partial x} \sim \frac{V}{h} (\bar{r}_{j+1} - \bar{r}_j) \quad \text{si} \quad V < 0$$

ces deux approximations produisent une diffusion numérique

$$(2.19) \quad \frac{|V| h}{2} \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x^2} .$$

Le coefficient vaut environ $60 \text{ m}^2/\text{s}$ mais dépend de V ; or, comme les problèmes numériques liés à l'intégration d'équations d'advection-diffusion sont surtout dus à la dispersion des modes numériques, qui dépend de V , et que la diffusion numérique est introduite essentiellement pour amortir les modes mal représentés et fort dispersés, on conviendra aisément que l'introduction d'une diffusion numérique dépendant directement de la cause des difficultés est extrêmement pratique et bien adaptée; la méthode de Lax-Wendroff précédemment étudiée ne jouit pas de cet avantage.

Le schéma s'écrit, pour $V > 0$:

- prédicteur :

$$(2.20) \quad \frac{2}{\Delta t} (\bar{r}_j^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_j^n) = -\frac{V}{h} (\bar{r}_j^n - \bar{r}_{j-1}^n)$$

- correcteur :

$$(2.20') \quad \frac{1}{\Delta t} (\bar{r}_j^{n+1} - \bar{r}_j^n) = -\frac{V}{2h} (\bar{r}_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_{j-1}^{n+\frac{1}{2}})$$

La diffusion numérique totale est nulle. Ceci ne signifie pas que le schéma n'amortit pas les modes numériques.

Le facteur d'amplification vaut [alors que l'équation (2.16) n'est pas dissipative] :

$$(2.21) \quad \frac{\rho^{n+1}}{\rho^n} = 1 - 2q^2 \sin^2 \omega h - 2iq \sin \omega h [1 - (1 - \cos \omega h) q]$$

La condition de stabilité déterminée à l'aide du critère de Von Neumann,

$$\left\| \frac{\rho^{n+1}}{\rho^n} \right\|^2 = 1 + 8 \sin^2 \omega h (1 - \cos \omega h) q^3 (q - 1) \leq 1,$$

est $q \leq 1$, ce qui n'est pas trop restrictif. Malheureusement, lorsque l'on introduit un terme de diffusion physique dans l'équation (2.16), le facteur d'amplification devient

$$(2.21') \quad \frac{\rho^{n+1}}{\rho^n} = 1 - 2q^2 \sin^2 \omega h - 2p (1 - \cos \omega h) [1 - (1 - \cos \omega h)(q + p)] - 2iq \sin \omega h [1 - (q + 2p)(1 - \cos \omega h)],$$

où
$$p = \frac{D \Delta t}{h^2} \dots$$

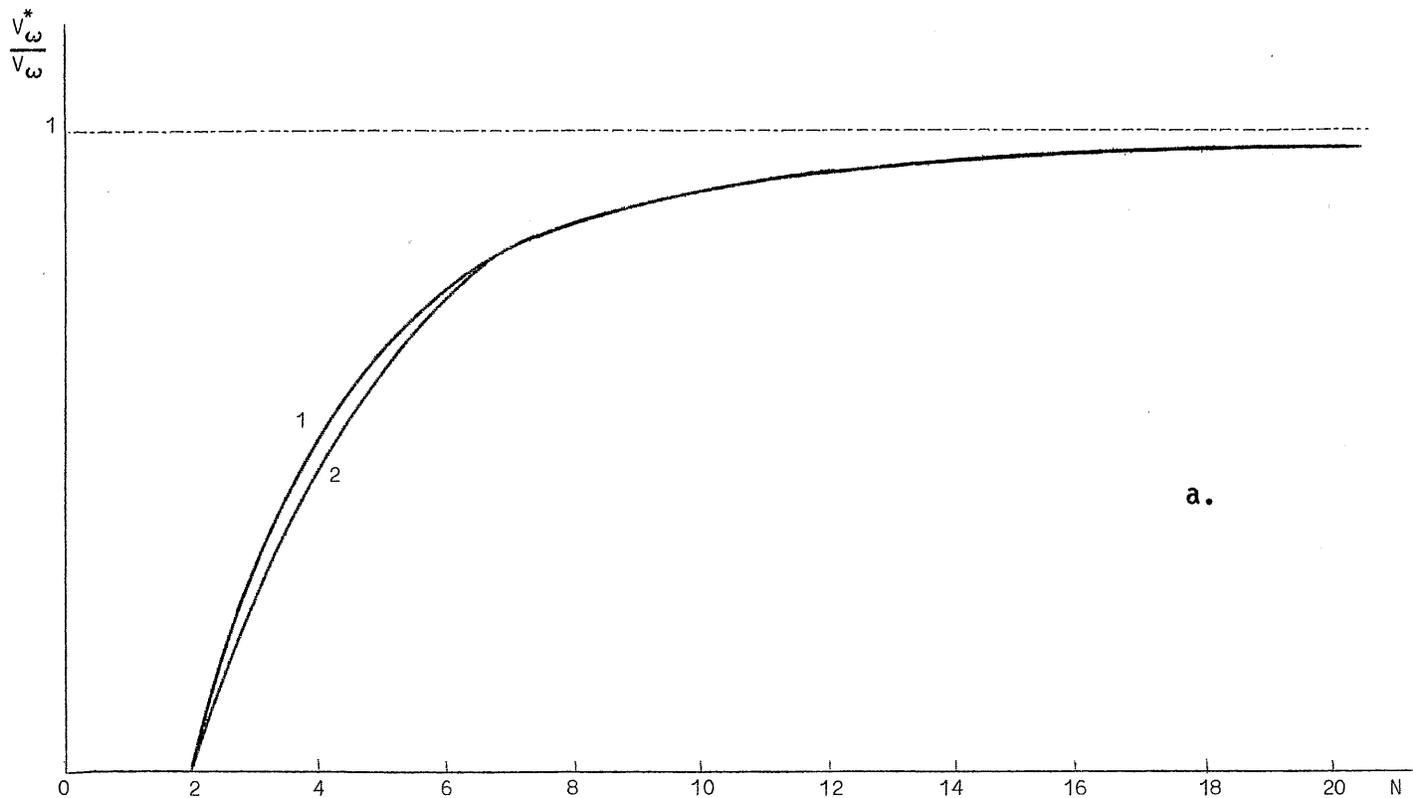
La condition de stabilité est extrêmement difficile à calculer analytiquement. Les calculs numériques montrent qu'il faut au moins satisfaire la condition

$$(2.22) \quad p + 2q \leq 0,85.$$

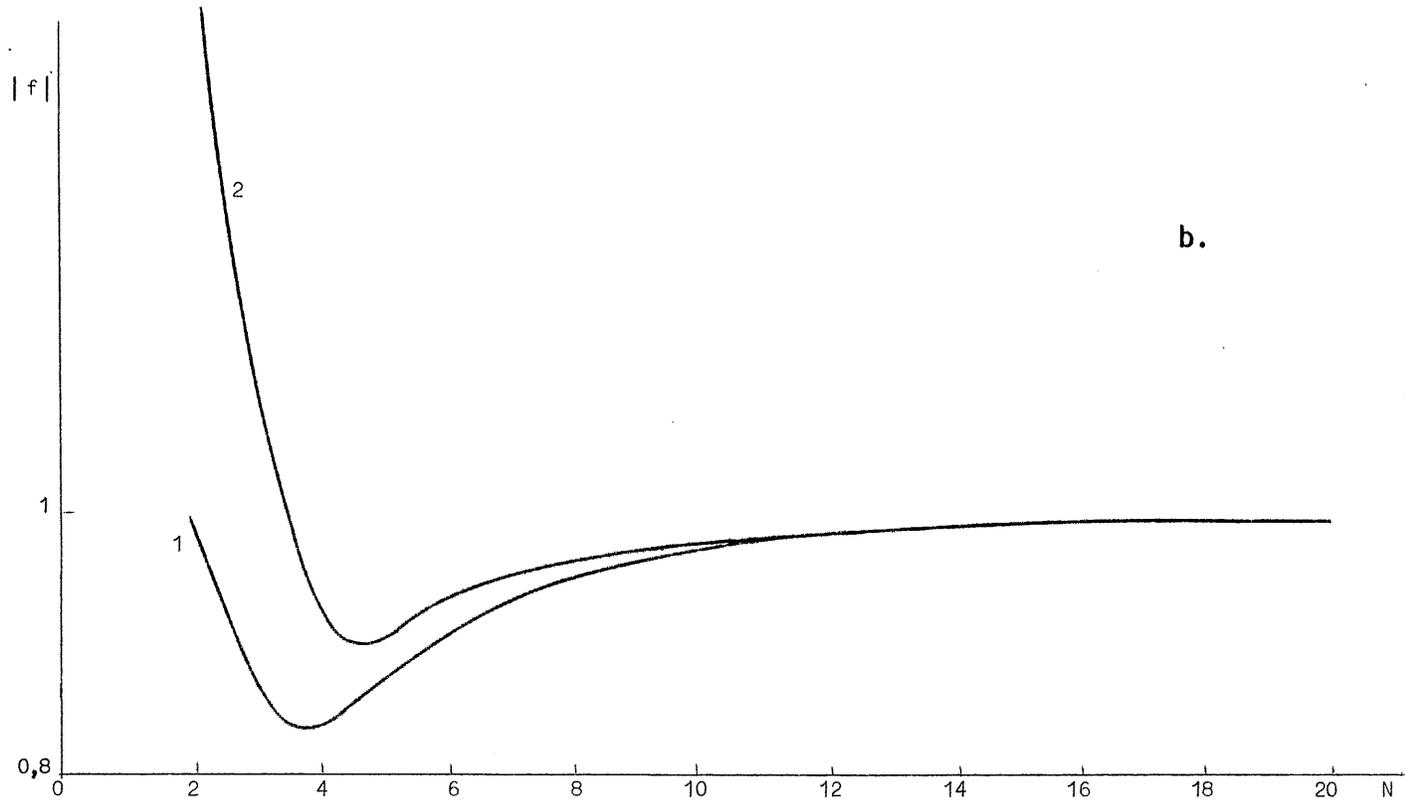
Pour le problème ici traité, où $D \sim 0,5 \text{ VH}$ cette condition peut s'écrire, pour $h \sim 250 \text{ m}$

$$\frac{V \Delta t}{h} < 0,78$$

ce qui est nettement plus restrictif que $\frac{V \Delta t}{h} < 2$.



a.



b.

fig. 8.

a.- Variation du rapport $\frac{V_{\omega}^*}{V_{\omega}}$ des vitesses de propagation des modes numériques du schéma (2.20) et théoriques. La courbe 1 correspond aux paramètres $q = 0,25$, $R_m = \infty$. La courbe 2 correspond aux paramètres $q = 0,25$, $R_m = 10$.

b.- Variation du rapport des modules des facteurs d'amplification numérique du schéma (2.20) et théorique. Les courbes 1 et 2 correspondent aux mêmes paramètres.

La figure 8 montre le rapport $\frac{V^*}{V\omega}$ et le module du facteur de propagation pour différentes valeurs des paramètres q et $R_m = \frac{Vh}{D}$ (nombre de Reynolds de maille) en fonction du rapport $N = \frac{L}{h}$.

7.3.- Schéma explicite II

Il peut arriver que la solution comporte une telle quantité de modes de fréquence élevée que la méthode sans diffusion numérique ne parvient pas à les amortir suffisamment vite; or ces modes de haute fréquence sont la cause de l'instabilité non-linéaire produite par un éclatement de la solution due à la dispersion des modes numériques; dans ce cas, qui est de règle lorsque les gradients de la distribution initiale de \bar{r} sont très élevés, il faut ajouter une diffusion numérique complémentaire qui amortit vigoureusement les modes de fréquence élevée et supprime l'instabilité non-linéaire.

Un schéma explicite contenant une diffusion numérique dans le correcteur peut être, pour $V > 0$:

- prédicteur :

$$(2.23) \quad \frac{2}{\Delta t} (\bar{r}_j^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_j^n) = -\frac{V}{h} (\bar{r}_j^n - \bar{r}_{j-1}^n)$$

- correcteur :

$$(2.23') \quad \frac{1}{\Delta t} (\bar{r}_j^{n+1} - \bar{r}_j^n) = -\frac{V}{h} (\bar{r}_j^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_{j-1}^{n+\frac{1}{2}})$$

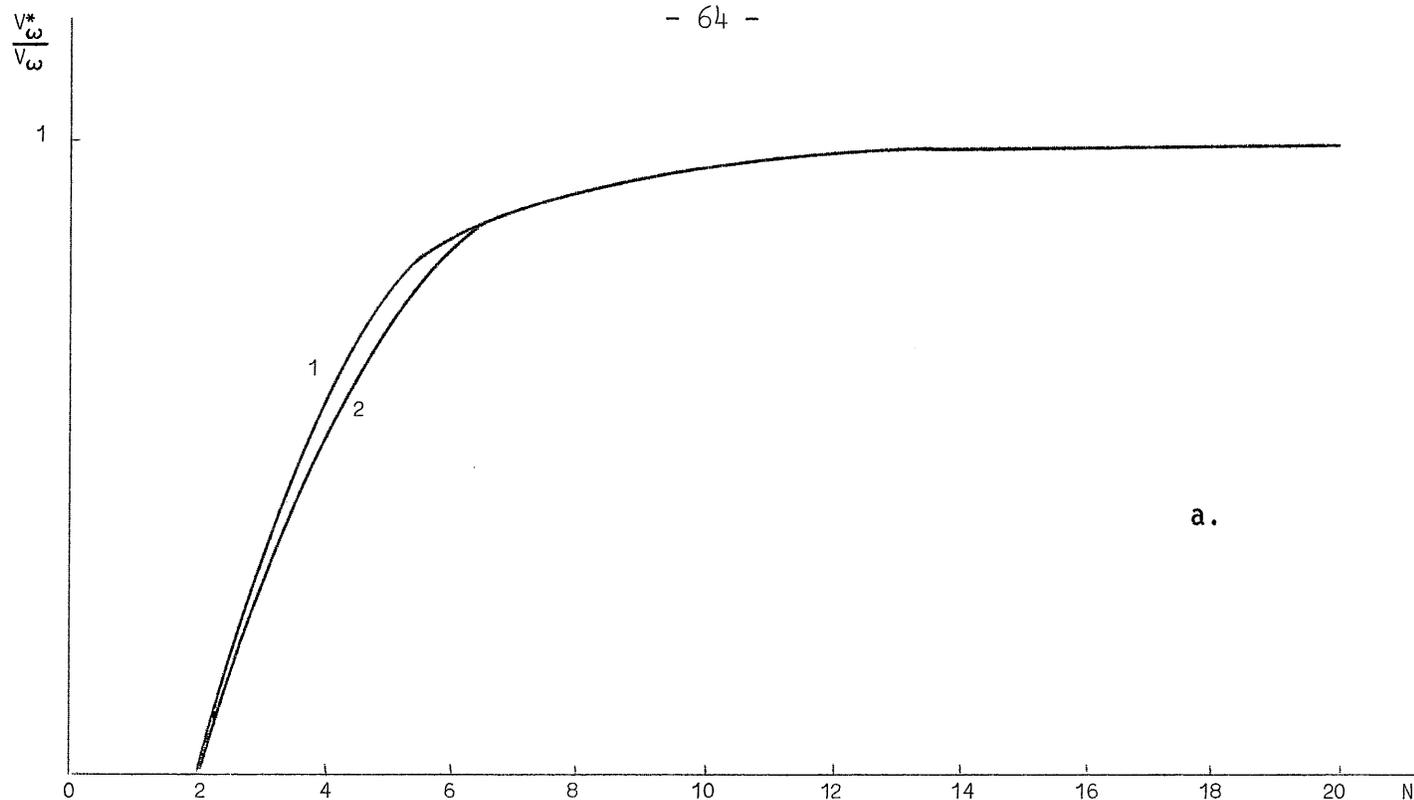
La diffusion numérique du schéma complet est

$$\frac{|V| h}{2} \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x^2}$$

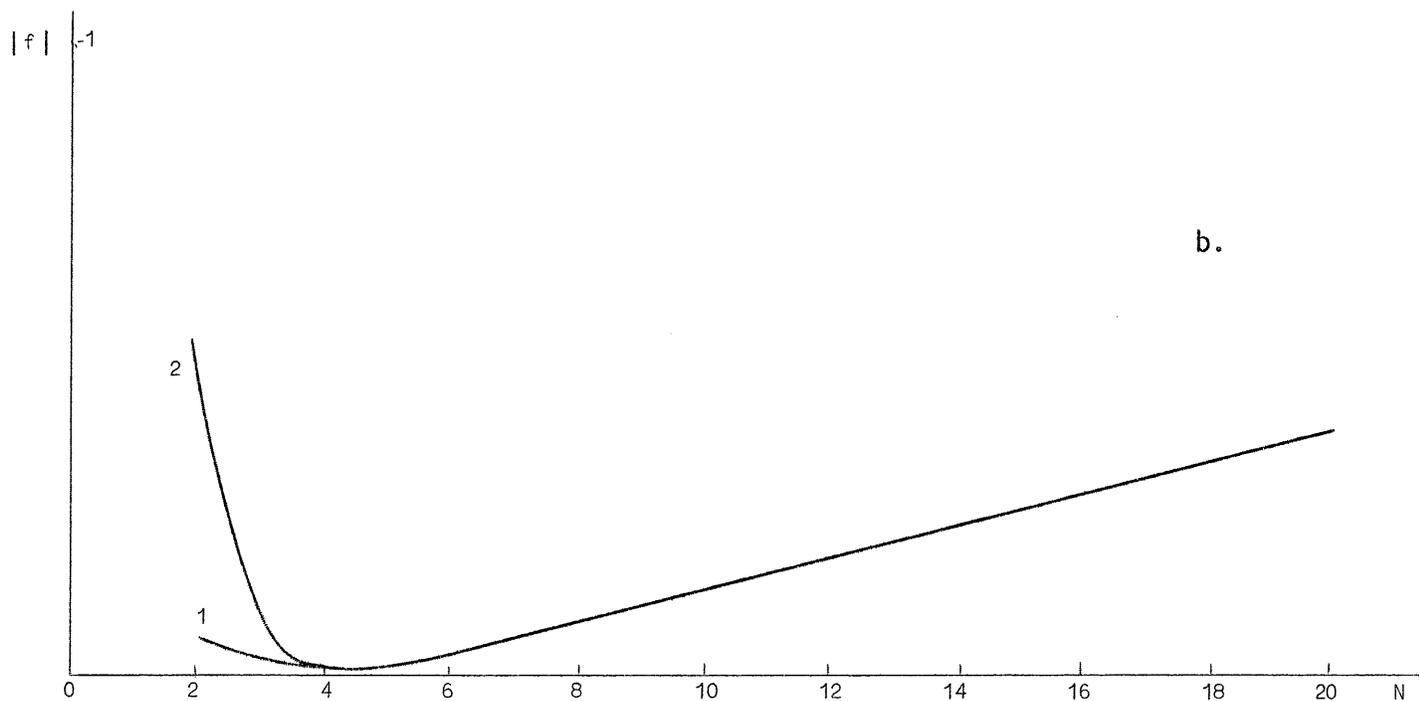
Par conséquent, bien que dans une généralisation à deux dimensions de ce schéma, la diffusion numérique soit anisotrope, elle est trop importante pour que ce schéma soit utilisable tel quel pour la résolution d'une équation d'advection-diffusion. Un schéma intermédiaire entre celle-ci et le premier peut être cependant un compromis acceptable, comme on va le montrer.

Le facteur d'amplification du schéma est

$$\frac{\rho^{n+1}}{\rho^n} = 1 - 2q^2 \sin^2 wh - 2q (1 - \cos wh)[1 - q(1 - \cos wh)] - 2iq \sin wh [1 - 2q (1 - \cos wh)]$$



a.



b.

fig. 9.

a.- Variation du rapport des vitesses de propagation des modes numériques du schéma (2.23) et théoriques.

b.- Variation du rapport des modules des facteurs d'amplification numérique du schéma (2.23) et théorique.

Les courbes 1 correspondent aux paramètres $q = 0,25$, $R_m = \infty$. Les courbes 2 correspondent aux paramètres $q = 0,25$, $R_m = 10$.

La condition de stabilité est $q < \frac{1}{2}$ ou $\frac{V \Delta t}{h} < 1$. Lorsque l'on introduit un terme de diffusion physique, la condition devient

$$(2.25) \quad p + q < \frac{1}{2} .$$

La figure 9 donne les mêmes paramètres que la figure 8 mais pour le schéma (2.23). Par rapport au premier schéma, on constate que $\frac{V_{\omega}^*}{V_{\omega}}$ est plus proche de l'unité, mais que par contre l'amortissement des modes numériques même de moyen et faible nombre d'onde, est beaucoup plus élevé que l'amortissement réel des modes physiques.

Cette caractéristique est favorable pour l'amortissement rapide des fréquences élevées responsables de l'instabilité non-linéaire, mais détériore la simulation des fréquences moyennes qui constituent la partie la plus importante de la solution. Soit un schéma intermédiaire tel que :

- prédicteur :

$$(2.26) \quad \frac{2}{\Delta t} (\bar{r}_j^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_j^n) = - \frac{V}{h} (\bar{r}_j^n - \bar{r}_{j-1}^n)$$

- correcteur :

$$(2.26') \quad \frac{1}{\Delta t} (\bar{r}_j^{n+1} - \bar{r}_j^n) = - \frac{\tau V}{h} (\bar{r}_j^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_{j-1}^{n+\frac{1}{2}}) - \frac{(1-\tau) V}{2h} (\bar{r}_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_{j-1}^{n+\frac{1}{2}})$$

où τ est un coefficient de pondération sans dimension variant entre 0 et 1. Pour $\tau = 0$, ce schéma reproduit le schéma (2.20). Pour $\tau = 1$, il reproduit le schéma (2.23).

Les qualités d'un tel schéma sont intermédiaires entre celles des deux schémas précédents; une condition suffisante de stabilité s'écrit en prenant (2.22) et (2.25) dans le sens le plus défavorable

$$(2.27) \quad p + q < 0,425 .$$

Les schémas explicites ci-dessus sont mieux adaptés que le schéma de Lax-Wendroff mais souffrent des limitations suivantes :

i) La condition de stabilité, sans être draconienne, est néanmoins plus restrictive que la condition de Courant-Friedrichs-Lewy (C.F.L.) $q \leq \frac{1}{2}$. De plus, en général, la condition de stabilité devient plus restrictive lorsqu'on généralise un schéma d'intégration à deux dimensions.

ii) Leendertse (1967) a renoncé à l'utilisation de méthodes explicites pour l'intégration d'équations d'advection-diffusion dans des domaines à frontières mobiles, à cause de phénomènes d'instabilité induits par les conditions aux limites; selon lui, seuls des schémas implicites peuvent filtrer de telles perturbations et empêcher la propagation des instabilités à partir des frontières. Or, on le verra plus loin, il est impératif d'utiliser des grilles mobiles pour suivre l'évolution des taches de polluants.

Par conséquent, des méthodes implicites semblent plus sûres, surtout si l'on veut éviter des conditions de stabilité trop draconiennes qui imposent un trop grand nombre de pas de calcul, faisant perdre le bénéfice de la plus grande rapidité d'exécution des méthodes explicites.

iii) Il ne faut pas perdre de vue que, la plupart du temps, les équations décrivant la dispersion de polluants comportent des termes non-différentiels (dans l'espace) qui représentent des interactions. Le schéma (2.15) est alors marginalement stable (facteur d'amplification égal à 1 quel que soit Δt) [Hamming (1962)]. De ce fait, toute perturbation de quelque nature qu'elle soit, n'est ni amplifiée, ni amortie; il est alors plus prudent de filtrer ces perturbations à l'aide de la partie du schéma qui intègre les opérateurs spatiaux; des schémas au moins partiellement implicites sont dès lors préférables. On va donc examiner des schémas semi-implicites (car aisément généralisables à plusieurs dimensions par désintégration) à structure prédicteur-correcteur, qui soient plus ou moins équivalents aux schémas (2.20) et (2.23).

7.4.- Schéma semi-implicite I

Un schéma implicite équivalent à (2.20) est

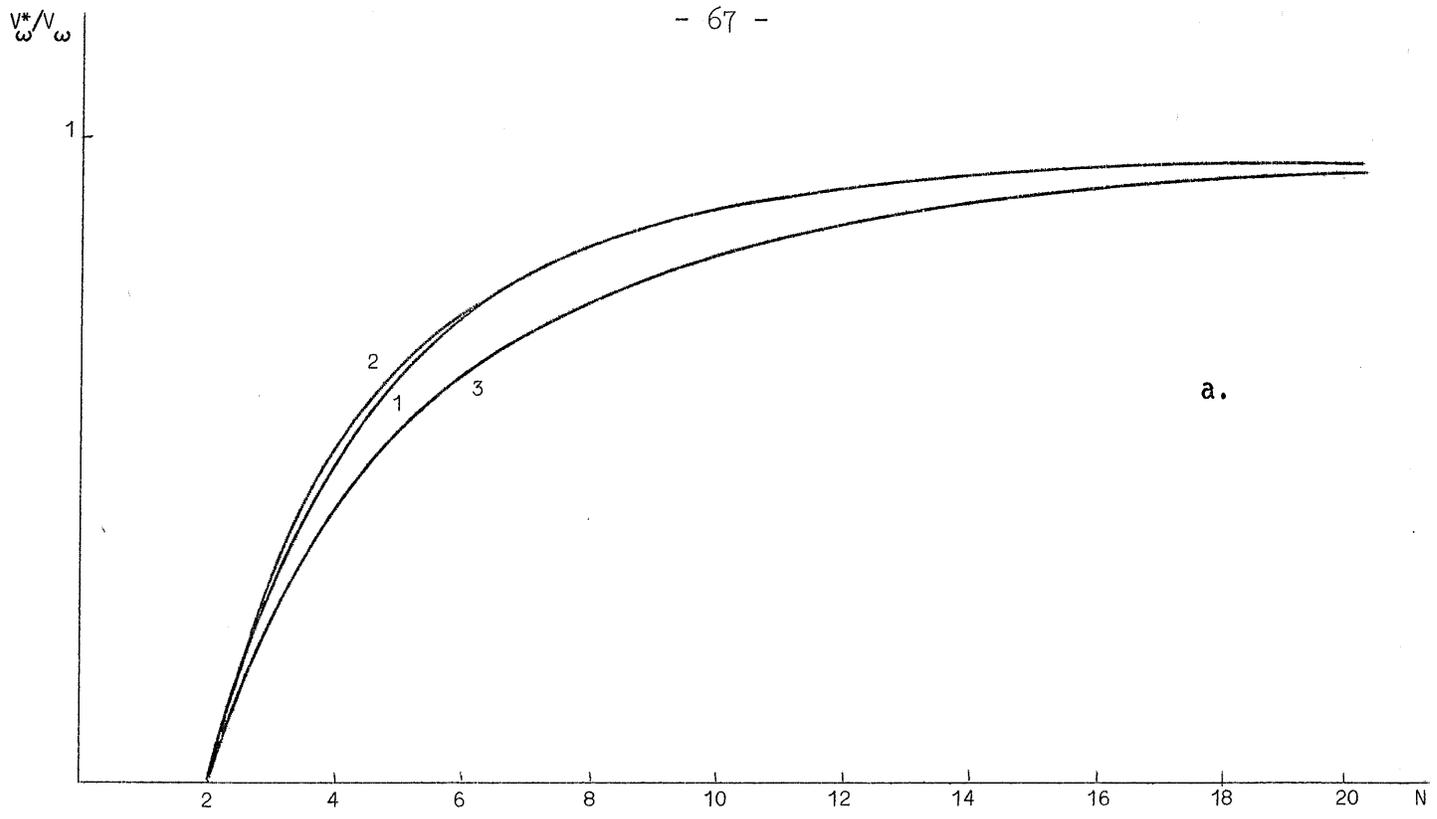
- prédicteur :

$$(2.28) \quad \frac{2}{\Delta t} (\bar{r}_j^{n+1/2} - \bar{r}_j^n) = - \frac{V}{h} (\bar{r}_j^{n+1/2} - \bar{r}_{j-1}^{n+1/2})$$

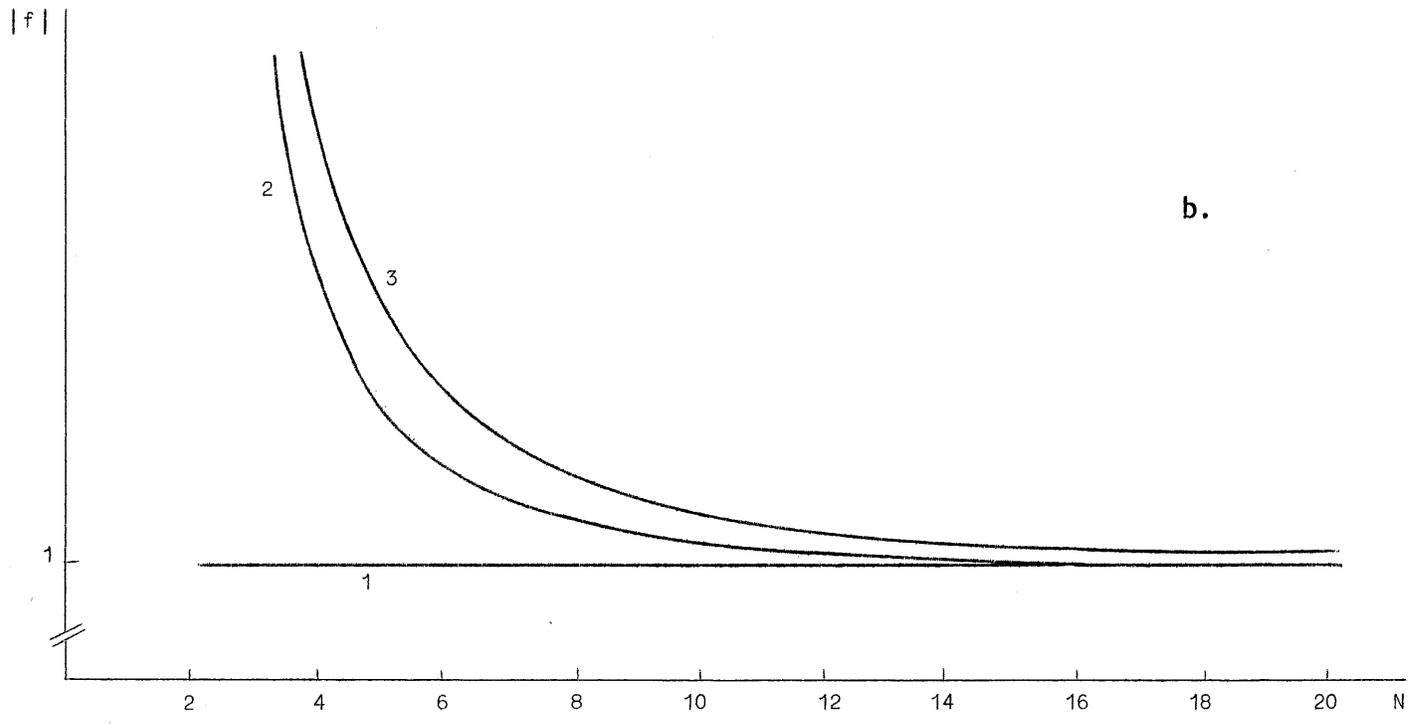
- correcteur :

$$(2.28') \quad \frac{1}{\Delta t} (\bar{r}_j^{n+1} - \bar{r}_j^n) = - \frac{V}{2h} (\bar{r}_{j+1}^{n+1/2} - \bar{r}_{j-1}^{n+1/2}) .$$

Seul le prédicteur est implicite, le correcteur devant être explicite pour les raisons exprimées précédemment. Les caractéristiques de



a.



b.

fig. 10.

Mêmes courbes que sur les figures 9, mais pour le schéma (2.28).

propagation de ce schéma sont reproduites sur les figures 10a et 10b. Si on les compare aux caractéristiques du premier schéma explicite, on constate qu'elles sont très semblables en ce qui concerne le déphasage. Pour un nombre de Reynolds de maille R_m égal à 10, les caractéristiques (courbe 3) sont légèrement moins bonnes pour $2q = 1$ que pour $2q = \frac{1}{2}$; par contre, le schéma (2.28) reste stable; lorsque l'équation n'est pas dissipative, ce schéma n'est pas dissipatif non plus : le module du facteur de propagation est égal à 1 quelle que soit la longueur d'onde; ceci devient un inconvénient pour les petites longueurs d'onde ($n = 2, 4$) dont le déphasage est très grand. De nouveau, si la solution comporte une densité importante de telles composantes, il faut ajouter une diffusion numérique au correcteur, ce qui conduit au schéma suivant.

7.5.- Schéma semi-implicite II

Un schéma semi-implicite équivalent à (2.23) est :

- prédicteur :

$$(2.29) \quad \frac{2}{\Delta t} (\bar{r}_j^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_j^n) = -\frac{V}{h} (\bar{r}_j^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_{j-1}^{n+\frac{1}{2}})$$

- correcteur :

$$(2.29') \quad \frac{1}{\Delta t} (\bar{r}_j^{n+1} - \bar{r}_j^n) = -\frac{V}{h} (\bar{r}_j^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_{j-1}^{n+\frac{1}{2}}) .$$

Les caractéristiques de propagation de ce schéma sont reproduites sur les figures 11a et 11b. Le déphasage des modes numériques calculés avec ce schéma est légèrement meilleur que pour le schéma explicite II, du moins pour les petites longueurs d'onde.

De plus, le déphasage diminue lorsque R_m diminue, contrairement à ce qui se passe pour le schéma explicite équivalent; ceci semble confirmer que les méthodes semi-implicites sont mieux adaptées que les méthodes explicites pour l'intégration d'équations dissipatives.

En ce qui concerne l'amortissement des modes numériques, on constate qu'il est nettement trop important également dans le schéma semi-implicite; on ne peut donc départager ces deux schémas sur ce critère; ceci implique en plus que le schéma (2.29) ne peut être utilisé tel quel.

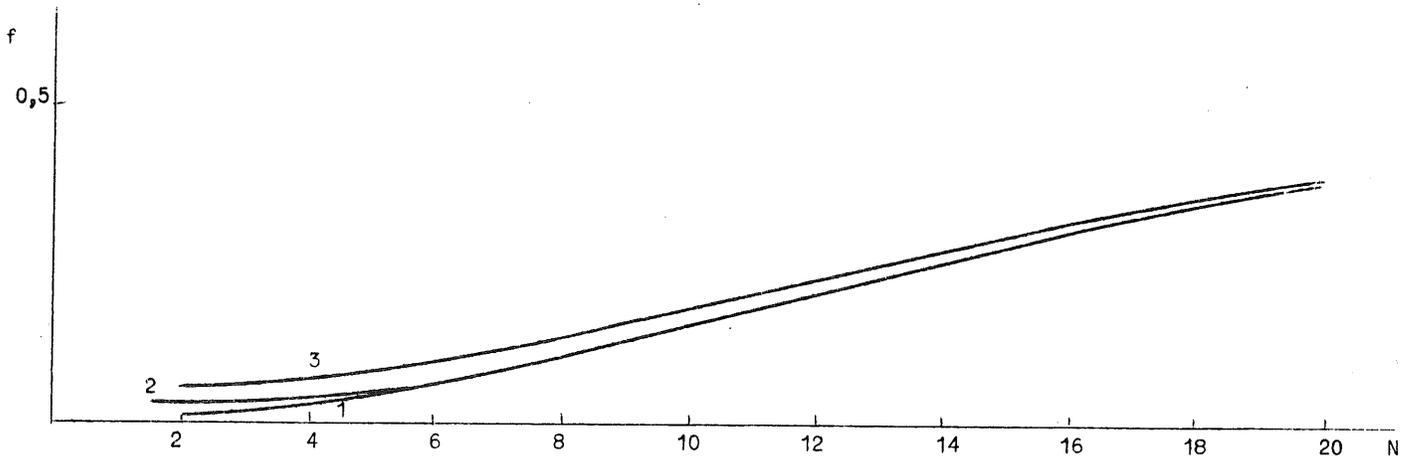
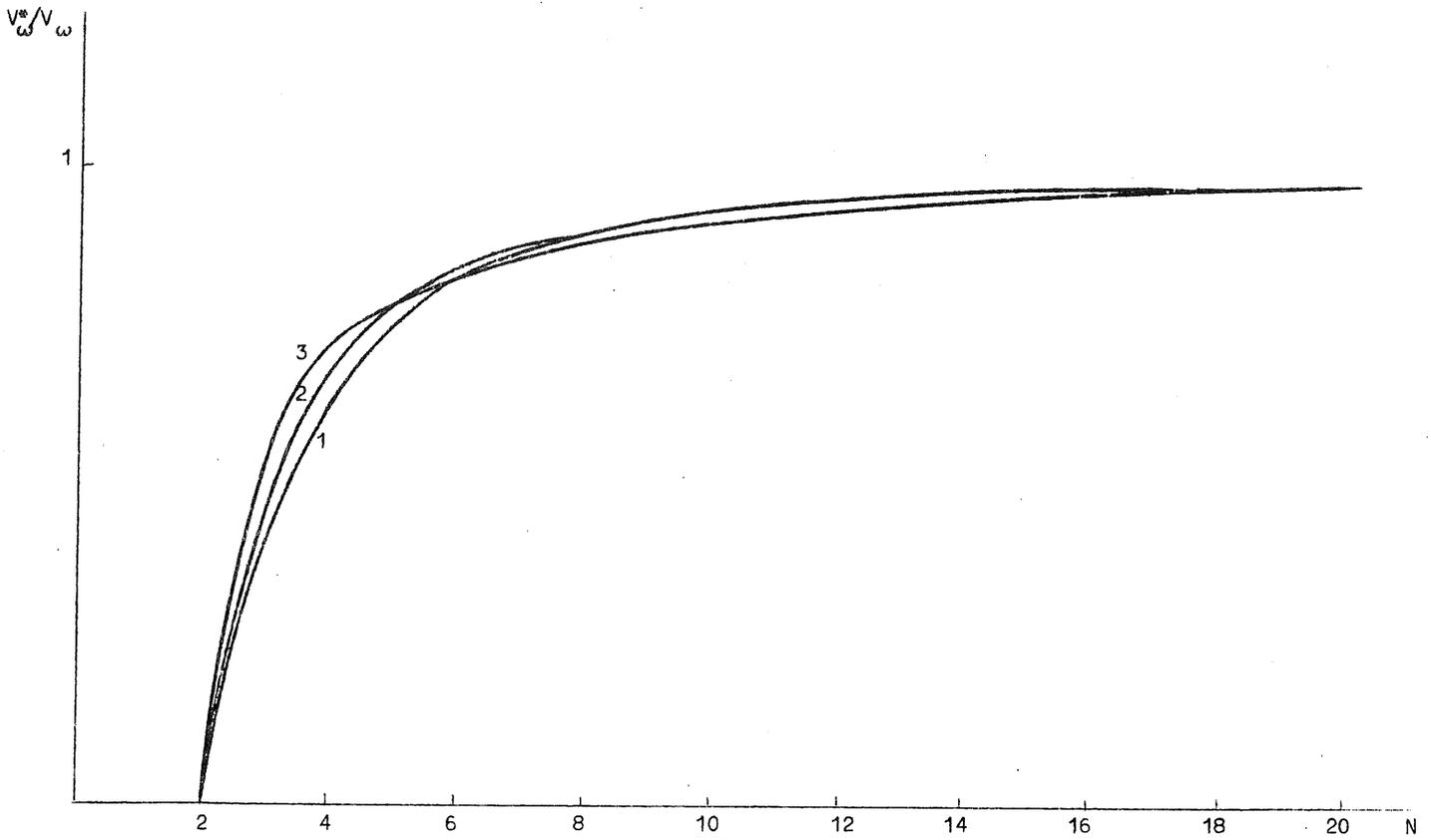
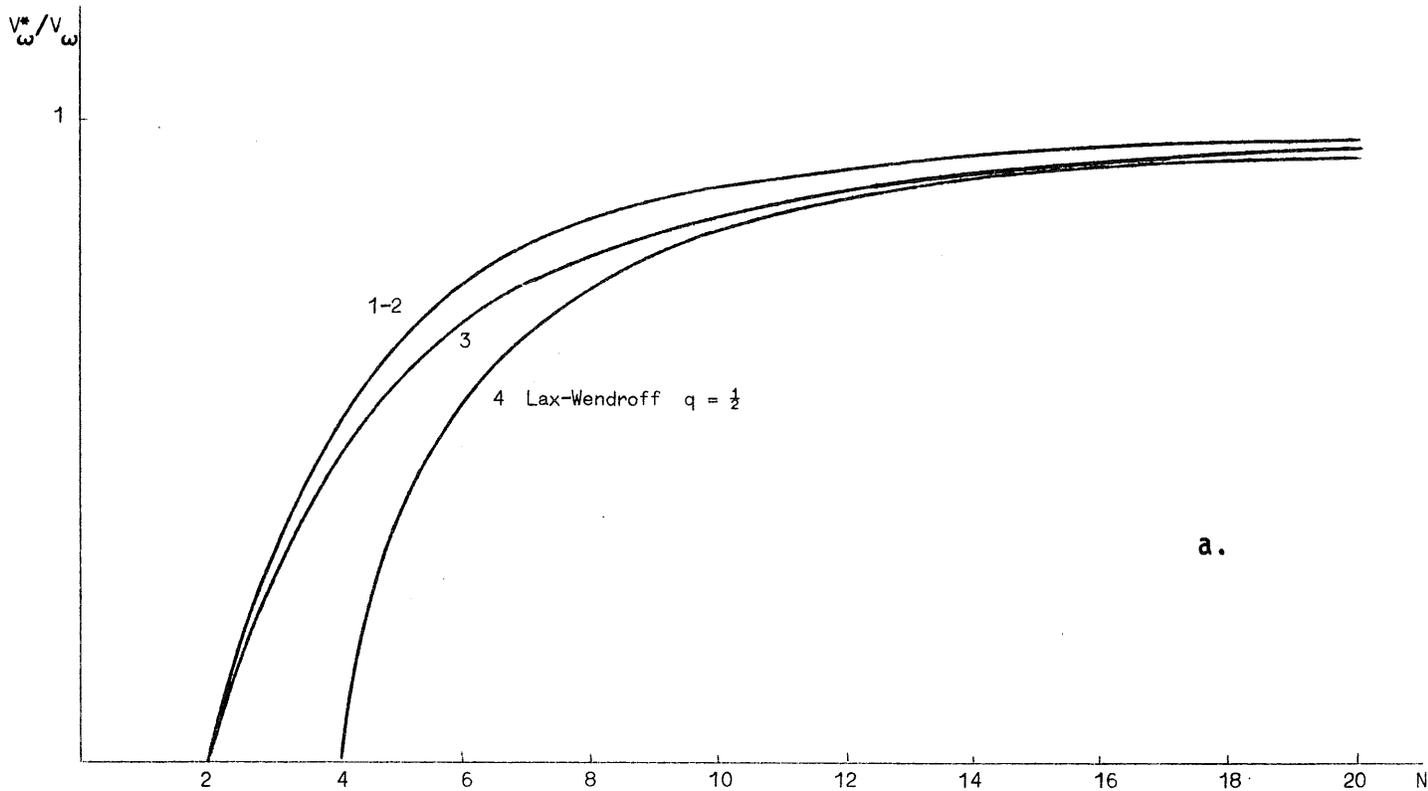


fig. 11.

Mêmes courbes que sur les figures 9, mais pour le schéma (2.29).



a.

fig. 12.a.

Mêmes courbes que sur la figure 9a, mais pour le schéma (2.30), pour $\tau = 0,25$. La courbe 4 correspond au schéma de Lax-Wendroff pour $q = \frac{1}{2}$, $R_m = \infty$.

On dérive donc un schéma intermédiaire

$$(2.30) \quad \frac{2}{\Delta t} (\bar{r}_j^{n+1/2} - \bar{r}_j^n) = -\frac{V}{h} (\bar{r}_j^{n+1/2} - \bar{r}_{j-1}^{n+1/2})$$

$$(2.30') \quad \frac{1}{\Delta t} (\bar{r}_j^{n+1} - \bar{r}_j^n) = -\frac{\tau V}{h} (\bar{r}_j^{n+1/2} - \bar{r}_{j-1}^{n+1/2}) - \frac{(1-\tau)V}{2h} (\bar{r}_{j+1}^{n+1/2} - \bar{r}_{j-1}^{n+1/2})$$

dont les caractéristiques sont données sur les figures 12a et 12b pour $\tau = 0,25$.

La diffusion numérique de (2.30) est

$$\tau \frac{|V| h}{2} \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x^2}$$

et le coefficient de diffusion associé vaut environ, pour $\tau = 0,25$ et V maximum, $20 \text{ m}^2/\text{s}$ et est du même ordre de grandeur que la diffusion

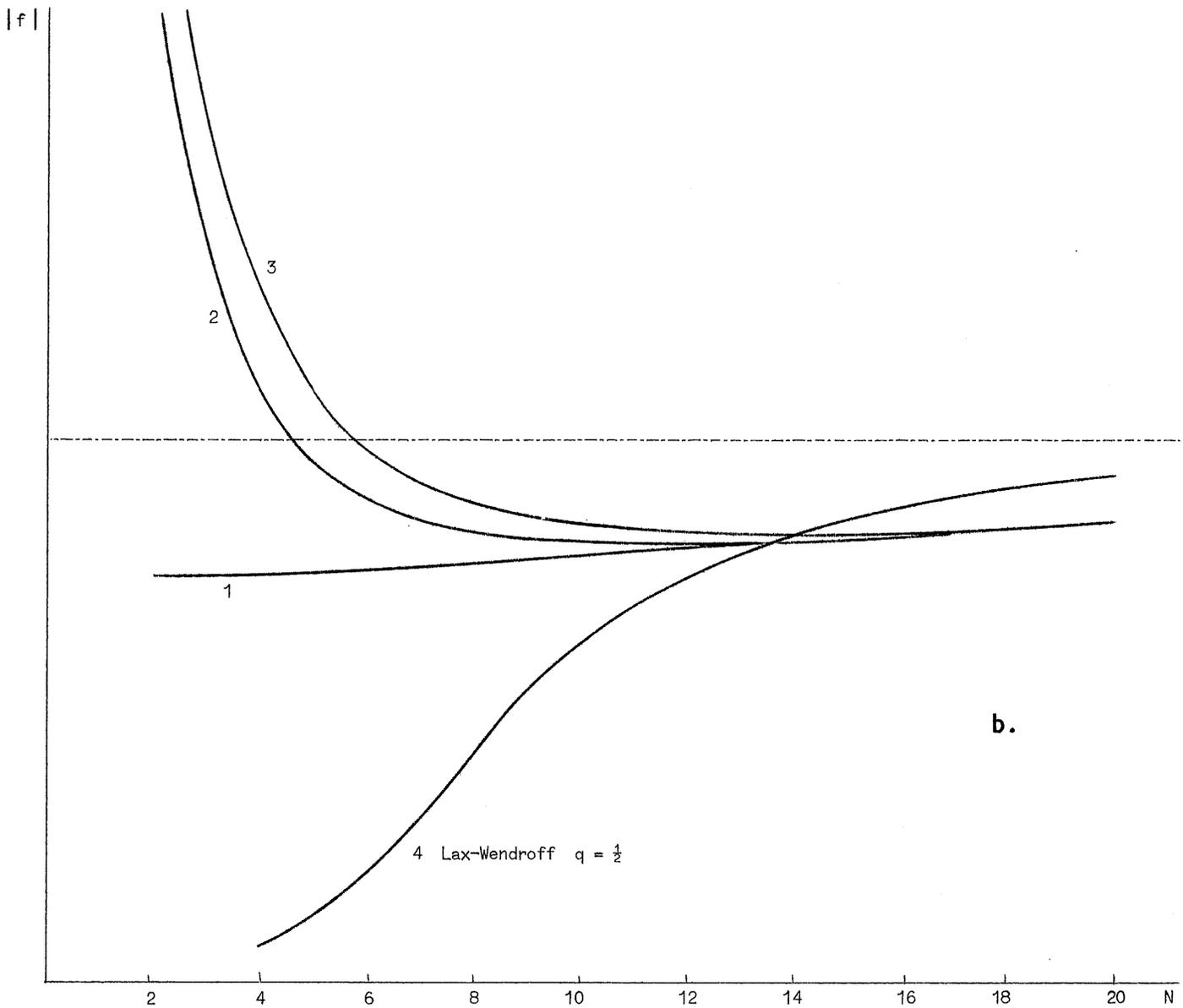


fig. 12.b.

Mêmes courbes que sur la figure 9b, mais pour le schéma (2.30), avec $\tau = 0,25$. La courbe 4 correspond au schéma de Lax-Wendroff pour $q = \frac{1}{2}$, $R_m = \infty$.

physique qui apparaît dans les problèmes traités. On reviendra plus loin sur les difficultés causées par la diffusion numérique mais on peut remarquer immédiatement qu'un schéma du type (2.30) ne peut être utilisé

pour une intégration à long terme que si τ est très proche de zéro. Tous les schémas implicites décrits plus haut sont inconditionnellement stables.

8.- Traitement des termes de diffusion

Après avoir examiné le problème de l'intégration des termes advectifs, on va maintenant se pencher sur l'approximation et l'intégration des termes de diffusion; bien que ces termes soient plus petits que les précédents, leur rôle est néanmoins important car ce sont eux qui, en l'absence d'interactions de nature chimique ou biologique, conditionnent l'étalement des taches de polluants, c'est-à-dire la diminution des concentrations.

Etant donnée la forme spéciale de l'opérateur de diffusion, on va étudier les méthodes numériques possibles dans le cas simple où l'advection est nulle et où les coefficients de diffusion sont constants. On généralisera un cas pratique ensuite.

Il faut noter que la présence d'une dérivée croisée empêche ici d'étudier d'abord le problème unidimensionnel et impose d'emblée l'examen du cas bidimensionnel.

8.1.- Remarque préliminaire

La plupart des méthodes classiques ont été développées pour intégrer des équations du type

$$(2.31) \quad \frac{\partial c}{\partial t} = v_1 \frac{\partial^2 c}{\partial x_1^2} + v_2 \frac{\partial^2 c}{\partial x_2^2}$$

c'est-à-dire sans termes en dérivées croisées. Certaines ont été étendues à des cas plus généraux [McKee et Mitchell (1971), Yanenko (1970)]. Dans tous ces cas, on fait l'hypothèse, implicite ou explicite, que le rapport entre $|\Delta|^{\frac{1}{2}}$ et les éléments du tenseur de diffusion n'est pas très petit, c'est-à-dire que l'opérateur de diffusion est fortement elliptique, ou encore, autrement dit, que l'on peut toujours trouver un système d'axes (ξ_1, ξ_2) orthogonaux tels que (2.3) se transforme en

$$v_1 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial \xi_1^2} + v_2 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial \xi_2^2}$$

où v_1 et v_2 sont du même ordre de grandeur.

L'opérateur de diffusion par effet de cisaillement ne jouit pas de cette propriété. On peut soupçonner que, dans ce cas, des problèmes apparaîtront lors de la résolution numérique. D'ailleurs, Chu *et al.* (1972), qui ont comparé diverses méthodes numériques pour l'intégration d'équations comportant des dérivées croisées, en ont mis en évidence le mauvais comportement pour $\Delta \rightarrow 0$. Or, il faut rappeler que la diffusion totale est la résultante de l'effet cisailant et d'un terme de diffusion turbulente horizontale \bar{T} dont l'influence est de loin plus faible.

Le déterminant Δ de l'opérateur complet vaut alors $\Delta = -\kappa \gamma \bar{H} \bar{u}$; ce déterminant, s'il est différent de zéro, est beaucoup plus petit que les termes qui le composent et dont les grandeurs vaut $\gamma^2 \bar{H}^2 \bar{u}^2$ car

$$\kappa \ll \gamma \bar{H} \bar{u}$$

comme on l'a évoqué dans le chapitre I, deuxième partie.

On a donc

$$\frac{|\Delta|}{\gamma^2 \bar{H}^2 \bar{u}^2} \sim o(1)$$

de sorte que l'opérateur de diffusion n'est pas fortement elliptique. On peut dès lors s'attendre à rencontrer des problèmes si on applique des méthodes aux différences finies fondées sur l'hypothèse d'ellipticité de l'opérateur de diffusion. On peut éviter de tels inconvénients étant donné que l'accord satisfaisant avec des observations expérimentales d'une solution analytique simplifiée permet de n'utiliser qu'une forme approchée de l'opérateur de diffusion, en l'occurrence l'opérateur $\mathcal{D}^*(\bar{r})$, qui satisfait mieux que la forme originale à la condition d'ellipticité. En effet, la partie principale de cet opérateur vaut

$$\begin{aligned}
 (2.32) \quad H^{-1} \left\{ \left(\int_t^{t+\Gamma} \gamma \frac{H^2}{u} \bar{u}_1^2 d\tau \right) \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1^2} + 2 \left(\int_t^{t+\Gamma} \gamma \frac{H^2}{u} \bar{u}_1 \bar{u}_2 d\tau \right) \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1 \partial x_2} \right. \\
 \left. + \left(\int_t^{t+\Gamma} \gamma \frac{H^2}{u} \bar{u}_2^2 d\tau \right) \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2^2} \right\} \\
 = \alpha_1 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1^2} + 2 \alpha_3 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1 \partial x_2} + \alpha_2 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2^2} .
 \end{aligned}$$

Dans ce cas, Δ s'écrit

$$(2.33) \quad \Delta = \alpha_3^2 - \alpha_1 \alpha_2 < 0$$

qui est strictement négatif car si on pose

$$f_i = \gamma^{\frac{1}{2}} H \bar{u}^{-\frac{1}{2}} \bar{u}_i \quad i = 1, 2$$

et qu'on définit le produit scalaire

$$(f_1, f_2) = \int_t^{t+\Gamma} f_1 f_2 d\tau$$

et les normes

$$\|f_i\| = (f_i, f_i)^{\frac{1}{2}}$$

l'inégalité (2.33) n'est autre que l'inégalité de Schwartz

$$|(f_1, f_2)| \leq \|f_1\| \|f_2\| .$$

Les calculs numériques montrent que

$$\Delta \sim O(\gamma^2 H^2 \bar{u}^{-2})$$

ce qui assure une forte condition d'ellipticité à l'opérateur de diffusion. L'équation (2.2) est donc, après intégration KBM des coefficients de diffusion, parabolique au sens habituel.

On va maintenant étudier sommairement les méthodes existantes adaptées à l'intégration de l'opérateur de diffusion, en l'occurrence :

- une méthode semi-implicite aux directions alternées,
- une méthode semi-implicite de désintégration.

Les méthodes explicites ont elles aussi été écartées pour les raisons suivantes :

- La méthode simple et rapide du second ordre de précision dans l'approximation spatiale produit, en l'absence de tout terme d'advection

donc de dispersion des modes numériques, des concentrations négatives importantes, même si les gradients de la distribution initiale sont faibles. Gorenflo (1970) montre qu'il en est ainsi lorsque

$$\alpha_1 \quad \text{ou} \quad \alpha_2 < |\alpha_3| ;$$

cette inégalité est souvent vérifiée pour les coefficients de diffusion par effet cisailant; la méthode explicite supporte donc mal la présence de dérivées croisées.

- Une méthode de haute précision ne connaît pas ces problèmes, mais est aussi lourde à mettre en oeuvre qu'une méthode semi-implicite; d'autre part, pour profiter complètement du gain de précision, il faut approcher les termes d'advection avec grande précision également. Dans ce cas, les méthodes explicites, soit sont instables (on en donnera un exemple plus loin), soit doivent respecter des conditions de stabilité fort strictes (plus strictes encore que les méthodes du deuxième ordre).

8.2.- Méthode semi-implicite aux directions alternées de McKee et Mitchell

Ces auteurs ont élaboré une méthode spécialement destinée à la résolution d'équations paraboliques où apparaissent des dérivées croisées; c'est une méthode aux directions alternées, l'intégration s'effectuant implicitement à chacun des deux pas suivant la direction d'un des axes de coordonnées; la dérivée croisée n'est jamais intégrée implicitement. Le schéma est le suivant (désintégration suivant la technique de Douglas-Rachford), pour l'équation

$$\frac{\partial \bar{r}}{\partial t} = \alpha_1 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1^2} + \alpha_2 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2^2} + 2 \alpha_3 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1 \partial x_2}$$

$$(2.34) \quad \left[1 + \left(\frac{1}{f} - \frac{p\alpha_1}{2} \right) \delta_1^2 \right] \bar{r}_{i,j}^* \\ = \left[1 + \left(\frac{1}{f} - \frac{p\alpha_1}{2} \right) \delta_1^2 + p\alpha_2 \delta_2^2 + 2p\alpha_3 \delta_1 \delta_2 + \frac{p}{f} (\alpha_1 + \alpha_2) \delta_1^2 \delta_2^2 \right] \bar{r}_{i,j}$$

$$(2.34') \quad \left[1 + \left(\frac{1}{f} - \frac{p\alpha_2}{2} \right) \delta_2^2 \right] \bar{r}_{i,j}^{n+1} = \bar{r}_{i,j}^* + \left(\frac{1}{f} - \frac{p\alpha_2}{2} \right) \delta_2^2 \bar{r}^n$$

où

$$(2.35) \quad \delta_1 \bar{r}_{i,j} = \frac{1}{2} (r_{i+1,j} - r_{i-1,j}) \quad ; \quad \delta_2 \bar{r}_{i,j} = \frac{1}{2} (\bar{r}_{i,j+1} - \bar{r}_{i,j-1})$$

et
$$p = \frac{\Delta t}{h^2},$$

f est un paramètre scalaire ajustable et δ_1^2 et δ_2^2 sont les expressions discrètes classiques des dérivées secondes.

La précision de ce schéma est

$$O(\Delta t + h^2).$$

Cependant, lorsque $f = 12$ et $\alpha_3 = 0$ (pas de dérivée croisée), ce schéma se réduit à un schéma de haute précision proposé par Mitchell et Fairweather (1964). Le schéma est inconditionnellement stable si $f \leq 0$ ou $f > 4$ [McKee et Mitchell (1971)]. Pour $f = 12$, la stabilité est assurée et la précision obtenue pour l'approximation de $\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1^2}$ et $\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2^2}$ est du quatrième ordre. Cependant, la précision sur l'approximation de $\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1 \partial x_2}$ est du second ordre seulement; comme les trois termes du deuxième membre de l'équation (2.21) sont du même ordre de grandeur, il n'y a guère d'intérêt à chercher une très bonne approximation pour certains d'entre eux et pas pour le dernier. Le gain de précision spatiale fourni par cette méthode sur d'autres comme celle proposée par Yanenko (1970)

$$(2.36) \quad \bar{r}^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}^n = \alpha_1 p \delta_1^2 \bar{r}^{n+\frac{1}{2}} + \alpha_3 p \delta_1 \delta_2 \bar{r}^n$$

$$(2.36') \quad \bar{r}^{n+1} - \bar{r}^{n+\frac{1}{2}} = \alpha_2 p \delta_2^2 \bar{r}^{n+1} + \alpha_3 p \delta_1 \delta_2 \bar{r}^{n+\frac{1}{2}}$$

est donc assez illusoire. La précision temporelle est la même.

Pour l'intégration de l'équation (2.21), la méthode est excellente tant que les gradients initiaux ne sont pas trop élevés; les concentrations négatives observées sont très faibles (beaucoup plus qu'avec la méthode explicite du deuxième ordre).

Cependant, les schémas (2.34) et (2.36) ne sont pas du type prédicteur-correcteur, et ne répondent donc pas aux besoins précédemment exprimés. De plus, Chu *et al.* (1972) ont montré que de telles méthodes se comportent assez mal lorsque $\Delta \rightarrow 0$.

8.3.- Méthode de désintégration avec décomposition de la dérivée croisée

L'effet de diffusion numérique du quatrième ordre provoqué par la discrétisation (2.25) dans des directions différant de la direction du

plus grand axe de l'ellipse de diffusion est surtout marqué lorsque l'anisotropie des coefficients de diffusion est importante et quand les gradients spatiaux sont extrêmement élevés. L'anisotropie qui est infinie si on utilise les coefficients de diffusion (2.3), est diminuée lorsqu'on effectue l'intégration KBM (c'est l'une des raisons pour lesquelles on a choisi d'opérer cette intégration) : en effet, l'anisotropie varie en fonction inverse de la valeur du déterminant Δ . Cependant, l'anisotropie demeure importante {le rapport des valeurs propres v_1 et v_2 [voir équation (2.10)] de la matrice des μ_{ik} intégrés peut aller de 2 à 10}. De plus, l'effet de diffusion numérique est d'autant plus fort que la distribution des concentrations présente des pics très aigus.

Divers auteurs [Pucci (1958); Chu, Morton et Roberts (1972)] ont étudié des approximations discrètes de la dérivée croisée présentant moins de propension à la diffusion numérique. L'idée est d'exprimer $\frac{\partial^2 \rho}{\partial x_1 \partial x_2}$ en fonction de dérivées secondes dans les directions des deux axes de coordonnées et d'un axe auxiliaire β convenablement choisi. Soit donc un axe β dont les cosinus directeurs par rapport aux axes de coordonnées e_1 et e_2 sont λ_1 et λ_2 . Le gradient d'un scalaire quelconque ρ dans cette direction, est donné par

$$(2.37) \quad \frac{\partial \rho}{\partial \beta} = \beta \cdot \nabla \rho = \lambda_1 \frac{\partial \rho}{\partial x_1} + \lambda_2 \frac{\partial \rho}{\partial x_2}$$

$$\text{où} \quad \lambda_1 = \beta \cdot e_1 \quad \text{et} \quad \lambda_2 = \beta \cdot e_2 .$$

La dérivée seconde dans cette direction est alors

$$(2.38) \quad \frac{\partial^2 \rho}{\partial \beta^2} = \beta \cdot \nabla (\beta \cdot \nabla \rho) = 2 \lambda_1 \lambda_2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_1 \partial x_2} + \lambda_1^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_1^2} + \lambda_2^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_2^2}$$

ce qui permet d'extraire

$$(2.39) \quad \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_1 \partial x_2} = \frac{1}{2 \lambda_1 \lambda_2} \left[\frac{\partial^2 \rho}{\partial \beta^2} - \lambda_1^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_1^2} - \lambda_2^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_2^2} \right] .$$

En choisissant convenablement la direction β , on peut aisément exprimer $\frac{\partial^2 \rho}{\partial \beta^2}$.

Chu, Morton et Roberts (1972) montrent que la diffusion numérique due à la discrétisation $\frac{1}{h_1 h_2} \delta_1 \delta_2 \bar{r}_{i,j}$ peut dépasser 6 à 15 fois celle due à une discrétisation fondée sur la relation (2.39) pour de petites valeurs de pv_2 et des valeurs très petites du rapport $\frac{v_1}{v_2}$. Les schémas de Yanenko (2.36) et McKee (2.34) utilisant la même expression de la dérivée croisée sont à cet égard parfaitement similaires; la différence entre les résultats issus de ces deux types de représentation de la dérivée croisée s'amenuise si pv_2 augmente et si $\frac{v_1}{v_2}$ tend vers 1; comme généralement, $pv_2 \sim (10^{-1})$ et $\frac{v_1}{v_2} \sim 0(10^{-1})$, en tenant compte des conclusions de Chu *et al.*, on peut affirmer que des discrétisations diagonales issues de (2.39) sont plus intéressantes pour la résolution de problèmes de déversements, d'autant plus que les gradients de la distribution initiale de polluants sont toujours fort grands; les auteurs précités montrent d'autre part que les discrétisations diagonales sont moins sensibles à la variation de l'angle entre les axes de coordonnées et la direction principale de diffusion que le schéma classique; il faut noter que dans chaque cas, la diffusion numérique est du quatrième ordre, ce qui explique que les différences de comportement soient plus marquées lorsque les gradients sont élevés; il est facile de calculer par contre, que si on remplace $\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1 \partial x_2}$ par une approximation issue de (2.31) qui sera précisée plus loin, ou par $\frac{1}{h_1 h_2} \delta_1 \delta_2 \bar{r}_{i,j}$ ou (2.25), l'erreur de troncature sur l'opérateur de diffusion complet (2.32) est exactement du même ordre de grandeur. L'opérateur (2.32) s'écrit, en y introduisant (2.39) :

$$(2.40) \quad \left(\alpha_1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \alpha_3 \right) \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1^2} + \left(\alpha_2 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \alpha_3 \right) \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2^2} + \frac{\alpha_3}{\lambda_1 \lambda_2} \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial \beta^2} .$$

On peut interpréter la nouvelle structure de l'opérateur de diffusion comme une tentative mathématique d'approcher la diffusion dans la direction où elle est la plus forte, par des diffusions dans les directions les plus proches qu'on puisse définir sur la grille numérique (par exemple, e_1 et β), tandis que la cohérence physique du phénomène impose une diffusion selon un dernier axe (ici e), diffusion qui peut d'ailleurs être négative dans certaines conditions. On reviendra plus loin sur ce problème.

Le schéma de désintégration proposé par Chu *et al.* (en supposant que $h_1 = h_2 = h$) est le suivant

$$(2.41) \quad \bar{r}^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}^n = p(\alpha_1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \alpha_3) \delta_1^2 \bar{r}^{n+\frac{1}{2}}$$

$$(2.41') \quad \bar{r}^{n+1} - \bar{r}^n = p\alpha_3 \delta_\beta^2 \bar{r}^{n+1} + p(\alpha_2 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \alpha_3) \delta_2^2 \bar{r}^{n+\frac{1}{2}}$$

lorsque $\alpha_1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \alpha_3 > 0$ et $\alpha_2 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \alpha_3 < 0$;

si $\alpha_1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \alpha_3 < 0$ et $\alpha_2 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \alpha_3 > 0$,

les auteurs proposent le schéma :

$$(2.42) \quad \bar{r}^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}^n = p(\alpha_2 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \alpha_3) \delta_2^2 \bar{r}^{n+\frac{1}{2}}$$

$$(2.42') \quad \bar{r}^{n+1} - \bar{r}^{n+\frac{1}{2}} = p \frac{\alpha_3}{\lambda_1 \lambda_2} \delta_\beta^2 \bar{r}^{n+1} + p(\alpha_1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \alpha_3) \delta_1^2 \bar{r}^{n+\frac{1}{2}}$$

quand $\alpha_1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \alpha_3$ et $\alpha_2 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \alpha_3$ sont simultanément positifs, les deux schémas sont utilisables; dans ce cas, la stabilité est conditionnelle car un terme de diffusion positif (qui se comporte donc comme un terme de diffusion physique habituel) est intégré explicitement; il est à remarquer que la direction β est toujours prise comme axe d'intégration implicite, tandis que l'autre axe est soit e_1 , soit e_2 selon que la diffusion corrigée est positive suivant l'un ou l'autre; un tel choix est approprié lorsque le rapport $\frac{v_1}{v_2}$ est très petit, car dans ce cas, comme on le montrera tout à l'heure, on a presque toujours l'une des deux diffusivités corrigées négative; la condition de stabilité s'écrit alors :

$$(2.43) \quad p v_1 < \frac{1}{2}$$

ce qui n'est pas très restrictif si $v_1 \ll v_2$; par contre si $\frac{v_1}{v_2} \sim 0(10^{-1})$, les deux diffusivités corrigées sont le plus souvent positives et la condition de stabilité est plus contraignante. Le choix d'un axe β , différent de e_1 et e_2 , pour une intégration implicite, est justifié si la diffusion est le phénomène dominant; ce n'est pas nécessairement le cas si l'advection est dominante. L'axe β ne peut être quelconque, car il faut qu'on puisse approcher facilement $\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial \beta^2}$ par une formulation

discrète $\delta_\beta^2 \bar{r}$; la direction β la plus aisément utilisable est la diagonale de la maille élémentaire; alors,

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

et

$$(2.44) \quad \delta_\beta^2 \sim \frac{1}{2} (\bar{r}_{i+1,j+1} + \bar{r}_{i-1,j-1} - 2 \bar{r}_{i,j}) .$$

D'autres directions peuvent être plus intéressantes; on reviendra plus loin sur ce sujet. Il faut noter que le schéma (2.42) n'a pas une structure prédicteur-correcteur.

9.- Résolution de l'équation de dispersion avec termes d'advection

Il est tentant d'effectuer un changement de coordonnées tel qu'on puisse exprimer l'équation (2.2) dans un système d'axes en mouvement avec le courant, afin d'éliminer les termes d'advection qui sont la source de la plupart des problèmes rencontrés dans l'intégration numérique. Mollowney (1975) propose cette technique et dérive la transformation à effectuer. Cependant,

i) Il n'est jamais possible d'éliminer complètement les termes d'advection; en effet, comme le courant n'est pas homogène, il reste toujours (sauf à l'origine du système d'axes mobiles) une advection différentielle non-négligeable : on peut en voir clairement l'effet dans l'expérience de Talbot (voir chapitre II, deuxième partie) où la tache de concentration est déformée par les gradients horizontaux du courant.

ii) Tous les coefficients (vitesse, profondeur, diffusivités) dépendent de l'espace et du temps, mais sont fournis par un modèle discret, donc ne sont pas connus analytiquement, de sorte que tous les éléments du jacobien de la transformation doivent être recalculés, numériquement, à chaque intervalle de temps; ceci entraîne de lourds calculs.

iii) Il est fréquent que des interactions existent entre les variables d'état représentant des éléments contenus dans la colonne d'eau et la couche de fond. Si on réécrit les équations dans un système d'axes entraîné par le mouvement de l'eau, le fond qui est immobile dans le système d'axes fixes, se déplace dans le système mobile, de sorte que la

transformation de coordonnées déplace le problème des termes d'advection, mais ne le simplifie en rien.

iv) Lors de simulations effectives, le déversement n'est ni ponctuel, ni instantané; dans un système d'axes mobiles, l'expression de la forme de la fonction qui représente les apports extérieurs est nettement plus complexe que dans un système fixe.

En conséquence, l'utilisation d'un système d'axes mobiles entraîne de lourds calculs, et, en général, ne simplifie pas le problème des termes d'advection; il faut donc garder ceux-ci et trouver des méthodes d'intégration adéquates.

Les équations d'évolution sont des équations paraboliques, où les termes d'advection sont nettement dominants; on ne peut pas les intégrer à l'aide de méthodes élaborées pour la résolution d'équations hyperboliques, car ce sont,

- soit les méthodes explicites, qu'on évite d'utiliser pour les raisons exposées précédemment,

- soit des méthodes implicites qui supposent alors que la propagation des substances se fait, instantanément, dans le même sens tout au long d'une ligne d'intégration [Mitchell (1960)] : on a montré (§6 de ce même chapitre) que ce n'est pas toujours vrai.

La présence de termes en dérivées premières dans des équations de diffusion trouble fortement la résolution numérique à partir du moment où ces termes deviennent d'un ordre de grandeur égal ou supérieur aux termes dissipatifs, si bien qu'on est le plus souvent forcé d'introduire une diffusion numérique complémentaire pour atténuer les oscillations engendrées dans les solutions numériques par la dispersion des modes.

Plusieurs auteurs montrent en outre que l'approximation centrée du deuxième ordre de dérivées premières dans des intégrations implicites est instable [Mardchuk (1970)], ou provoque des oscillations [Cheng et Chen (1972)], suivant le schéma adopté. C'est la raison pour laquelle on doit souvent utiliser des approximations non centrées, qui ont une précision $O(h)$ et provoquent une diffusion numérique $O(\bar{u}h)$. Dans la mesure où on désire une solution dont la précision spatiale globale est $O(h^2 + \Delta t^2)$, il faut corriger la solution; ceci est une autre raison

pour recourir à un schéma prédicteur-correcteur. On peut facilement, pour montrer l'intérêt de cette technique, calculer l'erreur de troncature d'un schéma semi-implicite aux directions alternées intégrant une équation de diffusion isotrope qui tient compte de l'advection par un courant \bar{u} et où on utilise une approximation décentrée des dérivées premières. Le schéma s'écrit, en supposant \bar{u}_1 et $\bar{u}_2 > 0$ et $\alpha_3 = 0$,

$$(2.45) \quad \begin{aligned} \bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_{i,j}^n + \frac{q}{2} \bar{u}_1 (\bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{q}{4} \bar{u}_2 (\bar{r}_{i,j+1}^n - \bar{r}_{i,j-1}^n) \\ = \frac{p}{2} \alpha (\delta_1^2 \bar{r}^{n+\frac{1}{2}} + \delta_2^2 \bar{r}^n) \end{aligned}$$

$$(2.45') \quad \begin{aligned} \bar{r}_{i,j}^{n+1} - \bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{q}{4} \bar{u}_1 (\bar{r}_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{q}{2} \bar{u}_2 (\bar{r}_{i,j}^{n+1} - \bar{r}_{i-1,j}^{n+1}) \\ = \frac{p}{2} \alpha (\delta_1^2 \bar{r}^{n+\frac{1}{2}} + \delta_2^2 \bar{r}^{n+1}) \end{aligned}$$

où

$$(2.46) \quad q = \frac{\Delta t}{h} .$$

On peut facilement calculer que les deux étapes ci-dessus permettent d'approcher l'équation

$$(2.47) \quad \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_1} + \bar{u}_2 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_2} = \alpha \left(\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2^2} \right)$$

avec une erreur de troncature

$$(2.48) \quad \begin{aligned} \frac{\bar{u}_1 h}{4} \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1^2} + \frac{\bar{u}_2 h}{4} \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2^2} + \frac{\bar{u}_1 \Delta t}{2} \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1 \partial t} + \frac{u_2 \Delta t}{2} \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2 \partial t} \\ + O(\Delta t^2) + O(h^2) . \end{aligned}$$

On voit que la première partie de l'erreur de troncature est d'ordre $O(\Delta t + h)$. Les termes en $\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1^2}$ et $\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2^2}$ qui sont des expressions mathématiques de termes de diffusion sont affectés de coefficients de diffusion numérique, respectivement $\frac{\bar{u}_1 h}{4}$ et $\frac{\bar{u}_2 h}{4}$, qui, positifs par hypothèse, se comportent comme des termes de diffusion physique; cette partie de l'erreur ne peut être diminué que par l'application d'un correcteur; on ne pousserapas plus loin l'analyse du correcteur éventuel d'un schéma semi-implicite aux directions alternées, car celui-ci, plus lourd, perd tout avantage qu'il pouvait avoir par rapport aux schémas de désintégration {notamment une meilleure précision temporelle et une préservation de la

consistence avec l'équation différentielle dans l'intervalle $[n \Delta t, (n+1) \Delta t]$ à partir du moment où on doit lui appliquer une étape supplémentaire de correction. On se tournera donc plutôt vers les méthodes de désintégration, plus simples et plus rapides.

10.- Critères pour le choix d'une méthode numérique

En tenant compte de tous les problèmes qu'on a abordés dans les paragraphes précédents, on demandera à une méthode numérique :

i) qu'elle soit précise;

Etant donnée la nature particulière des phénomènes à simuler, (interactions mal connues, flux aux frontières grossièrement modélisés, vérifications expérimentales difficiles voire impossibles), on ne peut évidemment demander une précision extrême (on montrera que l'erreur de troncature spatiale est nettement plus grande que l'erreur de troncature temporelle). La précision de l'approximation des termes advectifs doit être particulièrement recherchée puisque ce sont les termes les plus importants; ce sont eux qui, par ailleurs, causent généralement le plus d'ennuis. Dans le même ordre d'idées, la diffusion numérique qu'elle provienne de l'approximation des gradients ou de la dérivée croisée, doit être aussi faible que possible.

ii) qu'elle soit stable;

L'intervalle de temps entre deux distributions successives représentant l'état du système doit être limité par des considérations de précision et non par une condition de stabilité draconienne. Ainsi, comme le courant en mer du Nord est essentiellement dû à la marée, il faudra suivre les variations temporelles de la marée, c'est-à-dire utiliser un intervalle de temps petit par rapport à la période de la composante principale de la marée (12 h 25 en mer du Nord). Un intervalle raisonnable est

$$\Delta t \sim 1000 \text{ s} .$$

Par conséquent, toute condition de stabilité doit fournir une borne pour Δt égale ou supérieure à cette valeur; d'autre part, la méthode doit

être suffisamment stable pour que, lors des simulations, l'on puisse se consacrer à l'analyse du système et à la représentation de son comportement sans être trop limité par des problèmes de nature purement numérique.

iii) qu'elle soit facile à mettre en oeuvre;

Il faut notamment qu'on puisse très simplement, tout en gardant une bonne précision, inclure les termes (éventuellement non-linéaires) d'interaction et de migration qui apparaissent dans l'équation (1.1).

iv) qu'elle soit économique;

Dans le cas d'un problème d'évolution, dépourvu d'état stationnaire et de régime établi, cette condition prohibe les méthodes qui recourent à la résolution de grands systèmes d'équations, même linéaires.

On va maintenant décrire des méthodes semi-implicites à structure prédicteur-correcteur qui répondent à ces critères.

11.- Description de la méthode numérique du deuxième ordre

La méthode numérique proposée ici, et qui est le pivot du modèle de simulation de déversements, est une méthode prédicteur-correcteur fondée sur la désintégration de l'équation d'évolution.

En principe, le prédicteur est destiné à fournir des valeurs des distributions à un temps fictif $t^{n+\frac{1}{2}}$ compris entre $n \Delta t$ et $(n+1) \Delta t$ et à donner au schéma une réserve de stabilité numérique, tandis que le schéma correcteur est effectué pour augmenter la précision du résultat en $(n+1) \Delta t$, en améliorant l'approximation spatiale des dérivées premières et l'approximation temporelle de la contribution des termes d'interactions.

L'équation (1.1) s'écrit, en tenant compte de l'intégration K.B.M. des coefficients de diffusion :

$$(2.50) \quad \begin{aligned} & \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_1} + \bar{u}_2 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_2} \\ & = \frac{\partial}{\partial x_1} (\alpha_1 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_1}) + \frac{\partial}{\partial x_1} (\alpha_3 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_2}) + \frac{\partial}{\partial x_2} (\alpha_3 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_1}) + \frac{\partial}{\partial x_2} (\alpha_2 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_2}) + \bar{S} + \bar{I} . \end{aligned}$$

Provisoirement, et seulement pour faciliter l'exposé, on supposera que

$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ sont homogènes dans l'espace. L'hypothèse n'est d'ailleurs pas absurde car les variations de ces coefficients sont beaucoup plus faibles que les variations spatiales des concentrations, de sorte que

$$(2.51) \quad \alpha_j \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_i \partial x_k} \gg \frac{\partial \alpha_j}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_i} .$$

De façon similaire, on supposera que Δt est suffisamment petit pour que \bar{u} varie peu de $n \Delta t$ à $(n+1) \Delta t$ et qu'on puisse écrire

$$(2.52) \quad \bar{u}(n \Delta t + \tau \Delta t) \sim \bar{u}(n \Delta t) \quad 0 \leq \tau \leq 1 .$$

11.1.- Construction du prédicteur

Le prédicteur doit fournir une réserve de stabilité numérique au schéma complet, réserve dans laquelle pourra puiser un correcteur explicite sans rendre la méthode instable; une telle réserve ne peut s'accumuler que si l'intégration est implicite, car alors, la première étape agit comme un filtre qui élimine les fréquences parasites qui risqueraient de croître et de provoquer l'instabilité. Le prédicteur ne peut pas être complètement implicite, car alors, comme l'équation à intégrer est bidimensionnelle, le système d'équations à résoudre serait trop lourd et l'algorithme trop lent. Les seules techniques qui restent disponibles sont les méthodes semi-implicites à plusieurs pas, où successivement des intégrations implicites sont effectuées dans l'une et l'autre direction; comme on a déjà exclu les méthodes aux directions alternées, le choix se portera sur les méthodes de désintégration.

Il faut préciser dès maintenant que :

i) l'expression complète de la dérivée croisée, quelle qu'elle soit, ne peut être traitée implicitement, car le système d'équations (linéaires) devient alors trop lourd;

ii) les termes d'interaction et les termes de migration ne le peuvent pas davantage, car ils seraient alors difficiles à introduire dans le schéma de résolution, d'autant plus qu'ils peuvent être non-linéaires d'expression analytique quelconque, ce qui rendrait les systèmes d'équations (couplage entre variables d'état) vraiment très difficiles à résoudre.

On examinera séparément la désintégration des opérateurs d'advection et de diffusion, ainsi que des termes d'interaction-migration. On écrira l'expression complète du prédicteur après l'exposé de tous les problèmes.

11.1.1.- Désintégration de l'opérateur d'advection

Provisoirement, on supposera que $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \bar{I} = \bar{S} = 0$. L'équation à intégrer s'écrit donc

$$(2.53) \quad \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_1} + \bar{u}_2 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_2} = 0 .$$

On doit prédire une valeur en un pseudo-instant $(n + \frac{1}{2}) \Delta t$ à l'aide de deux intégrations semi-implicites, successivement suivant e_1 et e_2 ; on se rappelle d'autre part que l'intégration implicite de dérivées premières est instable ou génératrice d'oscillations parasites si on les représente par des approximations symétriques. Le schéma prédicteur pour l'équation (2.53) est donc le suivant [Marchuk (1970)], dérivé, par désintégration, du schéma (2.30) :

$$(2.54) \quad \bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2 h_1} \bar{u}_1 \nabla_1 \bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = \bar{r}_{i,j}^n$$

$$(2.54') \quad \bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2 h_2} \bar{u}_2 \nabla_2 \bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = \bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}$$

où ∇_1 est l'opérateur tel que

$$(2.55) \quad \nabla_1 \bar{r}_{i,j} = \bar{r}_{i,j} - \bar{r}_{i-1,j} \quad \text{si } \bar{u}_1 > 0$$

$$(2.55') \quad \nabla_1 \bar{r}_{i,j} = \bar{r}_{i+1,j} - \bar{r}_{i,j} \quad \text{si } \bar{u}_1 < 0 .$$

L'utilisation de différences 'avant' ou 'arrière' suivant le signe de la composante correspondante du vecteur-vitesse se justifie physiquement comme suit : l'information reçue lors de l'intégration au point (i,j) par l'intermédiaire du courant doit provenir d'un point situé en amont de (i,j) , en l'occurrence $(i-1,j)$ si $\bar{u}_1 > 0$ et $(i+1,j)$ si $\bar{u}_1 < 0$, puisque l'advection est le seul phénomène qui régit l'évolution.

11.1.2.- Désintégration de l'opérateur de diffusion

A priori, il peut sembler inutile de s'attacher à une étude détaillée de l'opérateur de diffusion, étant donné que la nécessité d'empêcher l'apparition d'une instabilité numérique non-linéaire impose l'emploi d'un terme de diffusion numérique, qui peut dans certains cas, être du même ordre de grandeur ou plus grande que la diffusion physique. Il faut cependant remarquer :

- que lorsque les gradients de la solution de l'équation de dispersion se sont adoucis, on peut diminuer fortement la diffusion numérique, qui peut devenir nettement plus petite que la diffusion physique (on n'en garde plus que la fraction juste suffisante pour empêcher la croissance de modes de haute fréquence engendrés par les variations spatiales des coefficients);

- que la technique numérique d'intégration d'un opérateur elliptique comportant des dérivées croisées, décrite dans ce travail, est originale; elle peut facilement être étendue à la résolution d'autres équations où les troubles créés par les termes d'advection sont beaucoup plus faibles et n'imposent pas l'utilisation de diffusion numérique.

On a montré, au §9 de ce même chapitre, l'intérêt de désintégrer l'opérateur de diffusion sous la forme (2.40) dans le cas où il est fortement anisotrope et où les gradients de la solution de l'équation de dispersion sont élevés; on a montré également qu'une méthode aux directions alternées n'était pas favorable dans le cas où l'advection domine.

Tenant compte de ceci, on va utiliser une forme désintégrée suggérée par Chu *et al.* (1972), mais en l'appliquant à la méthode prédicteur-correcteur choisie. Il faut noter tout de suite que la méthode ici proposée n'est pas identique à celle proposée par les auteurs précités, même au niveau de la désintégration de l'opérateur différentiel. En effet, la forme (2.40) n'est utilisée par ces auteurs que lorsque la direction de l'axe principal de l'ellipse de diffusion est proche de l'une ou l'autre des directions suivantes : e_1 , e_2 ou la diagonale des mailles du réseau d'intégration. Lorsque la direction de l'axe principal est fort différente, d'autres expressions de $\frac{\partial^2 r}{\partial x_1 \partial x_2}$ sont utilisées,

faisant intervenir, outre la direction de la diagonale, des directions 'privilegiées' de la grille, comme celles qui sont mises en évidence sur la figure 14, et n'utilisant pas les dérivées secondes selon e_1 et e_2 ; d'autre part, une des deux intégrations implicites se fait toujours dans la direction de l'axe diagonal [voir formule (2.42')] β ; ces deux choix sont concevables dans le cas où l'évolution est liée exclusivement à la diffusion; par contre, lorsqu'une importante advection est présente, et que les grilles d'intégration sont variables, les axes d'intégration doivent être de préférence les axes de la grille :

i) parce que les vitesses aux points de la grille sont fournies par un autre modèle mathématique (voir chapitre III, deuxième partie) sous forme de composantes \bar{u}_1 et \bar{u}_2 ; les traduire en composantes \bar{u}_1 et \bar{u}_β ou \bar{u}_2 et \bar{u}_β (selon le schéma) demande des calculs supplémentaires qui augmentent le coût de la résolution;

ii) parce qu'une intégration implicite suivant une diagonale augmente la complexité des algorithmes surtout si l'on utilise les grilles mobiles décrites au chapitre III, deuxième partie.

iii) parce que les conditions aux limites sont beaucoup plus complexes à exprimer dans un autre système d'axes.

La restriction des directions d'intégration implicite aux axes e_1 et e_2 empêche de se servir des schémas (2.41) et (2.42); on va donc élaborer un schéma prédicteur-correcteur qui utilise l'idée de la désintégration de l'opérateur de diffusion, en l'appliquant différemment. Pour la clarté de l'exposé, on supposera provisoirement que $\bar{u}_1 = \bar{u}_2 = \bar{S} = \bar{Q} = 0$.

Le principe est le suivant : intégrer implicitement dans chaque direction au moins une partie de la dérivée croisée, de manière à stabiliser au mieux le schéma total sans engendrer des systèmes d'équations algébriques de très grande dimension.

Le prédicteur doit fournir des valeurs $\bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}$ en un temps fictif, intermédiaire entre Δt et $(n+1)\Delta t$; on dit que le temps est fictif car le prédicteur n'est pas nécessairement totalement *consistent* avec l'équation différentielle; on réalise ce prédicteur à l'aide des deux étapes implicites :

$$(2.58) \quad \bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_{i,j}^n = \frac{\Delta t}{2 h_1^2} \left(\alpha_1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \alpha_3 \right) \delta_1^2 \bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}$$

$$(2.58') \quad \bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{4}} = \frac{\Delta t}{2 h_2^2} (\alpha_2 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \alpha_3) \delta_2^2 \bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} .$$

On montre facilement que le prédicteur est *consistent* à l'équation

$$(2.59) \quad \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} = \alpha_1 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1^2} + \alpha_2 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2^2} + 2 \alpha_3 \left(- \frac{\lambda_1}{2 \lambda_2} \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1^2} - \frac{\lambda_2}{2 \lambda_1} \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2^2} \right)$$

où le coefficient de α_3 est une partie de la dérivée croisée comme on peut le voir en faisant le rapprochement avec l'équation (2.39).

L'*inconsistence* n'est pas grave puisqu'elle sera éliminée par le choix d'un correcteur parfaitement *consistent*

La direction auxiliaire β , dont les cosinus directeurs sont λ_1 et λ_2 , n'est pas nécessairement la diagonale des mailles du réseau. On peut en effet la choisir de manière plus ou moins optimale en étudiant de manière approfondie les conséquences de la formulation (2.40) de l'opérateur de diffusion et en tenant compte du nombre limité de directions qui permettent une approximation discrète simple de δ_β^2 .

11.1.3.- Choix des directions β optimales

L'opérateur de diffusion peut être écrit sous la forme

$$(2.60) \quad \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_3 \\ \alpha_3 & \alpha_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \end{pmatrix} .$$

Le tenseur de diffusivité est représenté par la matrice

$$\mathcal{D} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_3 \\ \alpha_3 & \alpha_2 \end{pmatrix} ;$$

on lui associe une quadrique d'équation

$$(2.61) \quad (x_1, x_2) \mathcal{D}^{-1} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = C^{te}$$

qui est une ellipse car la matrice \mathcal{D} est de signe défini, comme on l'a montré au §3 de ce chapitre. Cette ellipse peut être réduite à la forme canonique dans le système d'axes (η_1, η_2) dirigés suivant ses directions principales. Son équation s'écrit alors

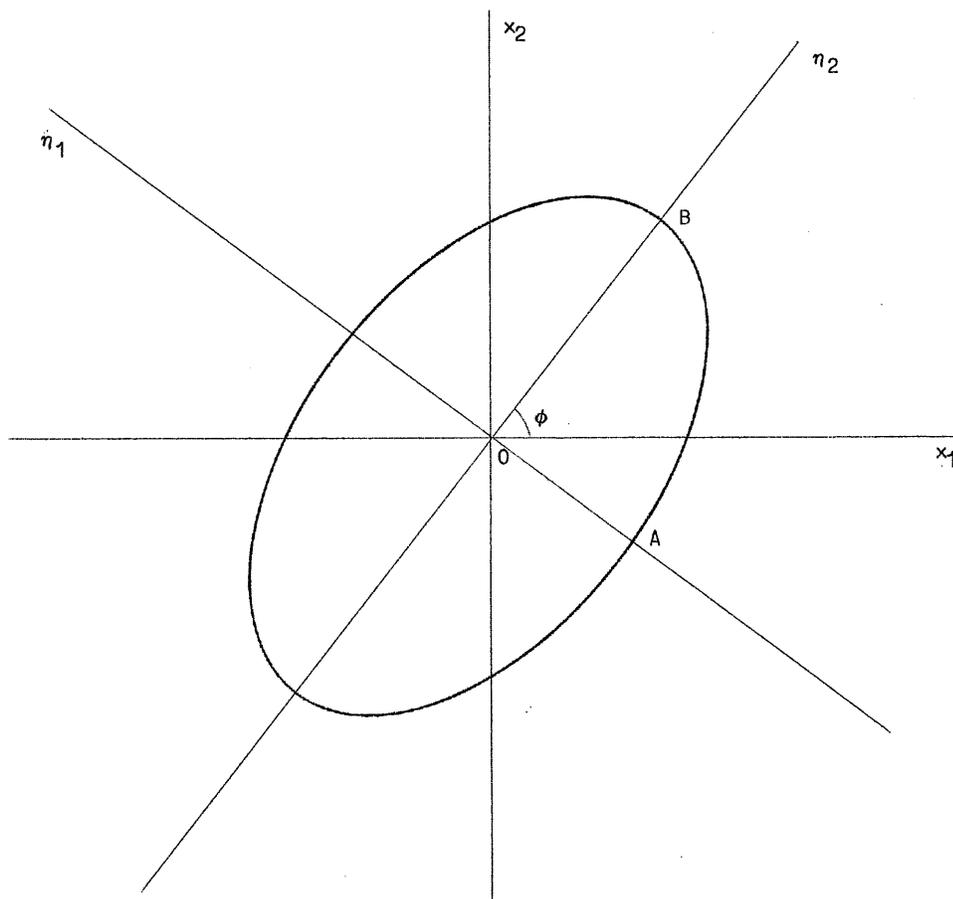


fig. 13.

Ellipse associée au tenseur de diffusivité. $OA = \nu_1^{\frac{1}{2}}$; $OB = \nu_2^{\frac{1}{2}}$ où λ_1 et λ_2 sont les valeurs propres de la matrice \mathcal{L} associée au tenseur.

$$(2.62) \quad \frac{\eta_1^2}{\nu_1} + \frac{\eta_2^2}{\nu_2} = K$$

où ν_1 et ν_2 , $\nu_2 > \nu_1$ sont les valeurs propres de la matrice \mathcal{L} et \mathbf{e}_{η_1} et \mathbf{e}_{η_2} ses vecteurs propres. Les directions principales sont celles suivant lesquelles la diffusivité est la plus ou la moins élevée (voir figure 13); soient ϕ et $\phi + \frac{\pi}{2}$ les angles entre \mathbf{e}_1 et les directions principales. On peut facilement se convaincre que la diffusion dans une direction est une combinaison de diffusions le long de directions privilégiées; l'algorithme numérique intégrant une équation de diffusion doit pouvoir rendre compte de cette dépendance; c'est notamment ce qui est

réalisé dans les désintégrations suggérées par Chu *et al.* (1972) et cela permet de choisir les directions β optimales : elles doivent suivre les directions principales de l'ellipse de diffusion, et de préférence, la direction suivant laquelle la diffusion est la plus importante, c'est-à-dire le vecteur propre correspondant à la valeur propre v_2 . Bien entendu, en pratique, on dispose d'un choix limité de directions β , ce qui fait qu'on peut rarement faire coïncider β et e_{n_2} et diminue la validité de la représentation comme on va le voir plus loin. La positivité de la solution des systèmes d'équations (2.58) implique :

$$(2.63) \quad \alpha_1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \alpha_3 > 0$$

$$(2.63') \quad \alpha_2 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \alpha_3 > 0$$

La méthode de Chu *et al.* (1972) implique également l'une ou l'autre de ces inégalités puisque le choix de la deuxième direction d'intégration e_1 ou e_2 (l'autre étant dans ce cas nécessairement β) est déterminé par le fait que la diffusion corrigée dans cette direction est positive comme on le constate en examinant les schémas (2.41) et (2.42).

Cette condition mathématiquement nécessaire peut être justifiée physiquement par le fait que, si une des inégalités n'était pas vérifiée, cela provoquerait dans la direction correspondante une diffusion négative. On va maintenant examiner sous quelles conditions les inégalités (2.63) sont vraies. On peut les réécrire en introduisant les identités :

$$(2.64) \quad \alpha_1 = v_1 \sin^2 \phi + v_2 \cos^2 \phi$$

$$(2.64') \quad \alpha_2 = v_1 \cos^2 \phi + v_2 \sin^2 \phi$$

$$(2.64'') \quad \alpha_3 = (v_2 - v_1) \sin \phi \cos \phi = \frac{1}{2} (v_2 - v_1) \sin 2\phi$$

et en posant

$$(2.65) \quad \varepsilon = \frac{v_1}{v_2} .$$

ε est une mesure de l'aplatissement de l'ellipse de diffusion; le déterminant de \mathcal{S} vaut $-\Delta$ et est égal à $v_1 v_2$; par conséquent $\Delta = -\varepsilon v_2^2$ est une mesure de l'aplatissement.

En substituant (2.64) dans (2.63) et en divisant par v_2 , on obtient :

$$(2.66) \quad \varepsilon \sin^2 \phi + \cos^2 \phi - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} (1 - \varepsilon) \sin \phi \cos \phi > 0$$

$$(2.66') \quad \sin^2 \phi + \varepsilon \cos^2 \phi - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} (1 - \varepsilon) \sin \phi \cos \phi > 0 .$$

Dans certains cas, les inégalités (2.66) sont vérifiées quelle que soit la valeur de ε ($\varepsilon > 0$ car la matrice \mathcal{G} est de signe défini).

Ainsi, pour

$$\frac{\lambda_2}{\lambda_1} = \operatorname{tg} \phi ,$$

c'est-à-dire si $\beta \equiv e_{\eta_2}$, les deux inégalités se réduisent à $\varepsilon > 0$, ce qui est identiquement vérifié; ceci confirme la présomption fondée sur l'intuition physique, selon laquelle la direction e_{η_2} est une direction β optimale, en ce sens que les diffusivités 'corrigées' restent positives.

Lorsque $\phi = 0$ ou $\phi = \frac{\pi}{2}$, c'est-à-dire si les axes principaux de l'ellipse sont les axes de la grille, les inégalités sont également toujours vraies. Par contre, lorsque ϕ est différent de ces valeurs privilégiées, il se peut que l'une ou l'autre de ces inégalités ne soit pas vraie (on montrera qu'elles ne peuvent pas être fausses simultanément).

Si l'on ne veut pas d'expressions trop sophistiquées de l'approximation discrète de $\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial \beta^2}$, ni utiliser des points trop éloignés du point (i, j) (on perdrait de la sorte le caractère local de l'approximation), on doit se limiter aux directions β indiquées en gras sur la figure 14; on n'a reproduit que les directions utilisées lorsque $\alpha_3 > 0$; les directions qui leur sont symétriques par rapport à e_2 doivent servir lorsque $\alpha_3 < 0$. Les approximations discrètes possibles de $\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial \beta^2}$ sont

$$(2.67) \quad \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial \beta^2} \sim \frac{1}{h_1^2 + h_2^2} \delta_\beta^2 \bar{r}_{i,j} \quad \text{avec} \quad \delta_\beta^2 \bar{r}_{i,j} = \bar{r}_{i+1,j+1} + \bar{r}_{i-1,j-1} - 2 \bar{r}_{i,j}$$

$$(2.67') \quad \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial \beta^2} \sim \frac{1}{2h_1^2 + h_2^2} \delta_\beta^2 \bar{r}_{i,j} \quad \text{avec} \quad \delta_\beta^2 \bar{r}_{i,j} = \bar{r}_{i+2,j+1} + \bar{r}_{i-2,j-1} - 2 \bar{r}_{i,j}$$

$$(2.67'') \quad \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial \beta^2} \sim \frac{1}{h_1^2 + 2h_2^2} \delta_\beta^2 \bar{r}_{i,j} \quad \text{avec} \quad \delta_\beta^2 \bar{r}_{i,j} = \bar{r}_{i+1,j+2} + \bar{r}_{i-1,j-2} - 2 \bar{r}_{i,j}$$

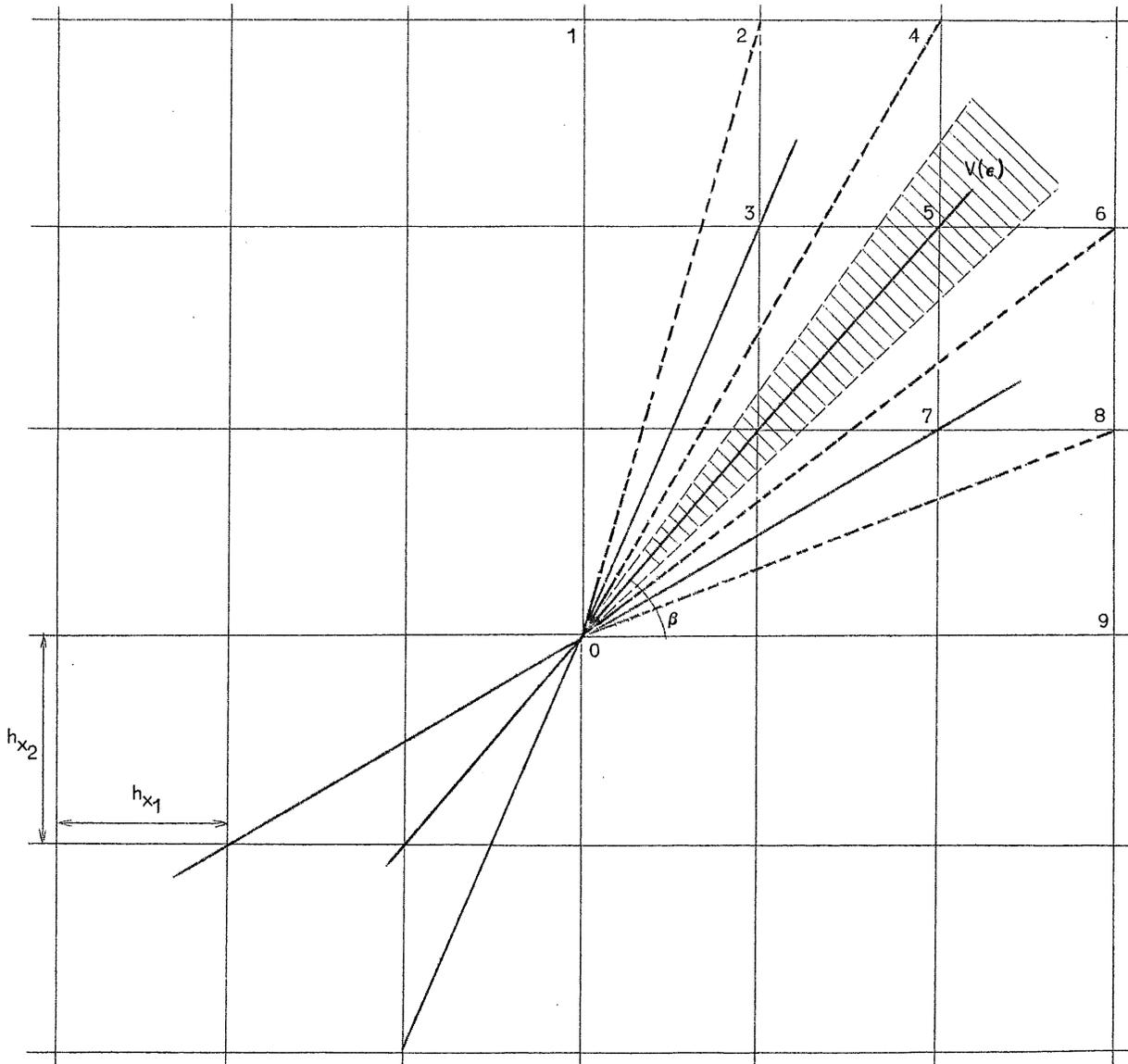


fig. 14.

Portion de la grille d'intégration montrant les directions utiles β ainsi qu'une représentation schématique d'un voisinage $V(e, \phi)$.

Lorsque $\alpha_3 < 0$, on utilisera les expressions symétriques; ainsi, au lieu de (2.67) on prendra

$$(2.68) \quad \delta_{\beta}^2 \bar{r}_{i,j} = \bar{r}_{i+1,j-1} + \bar{r}_{i-1,j+1} - 2 \bar{r}_{i,j}$$

etc. On a donc le choix entre six expressions de δ_{β}^2 , dont trois

conviennent lorsque α_3 (ou $\text{tg } \phi$) > 0 et trois autres lorsque α_3 (ou $\text{tg } \phi$) < 0 .

Pour examiner quand les inégalités (2.63) sont vérifiées, on supposera $\text{tg } \phi > 0$.

Soit

$$(2.69) \quad \lambda_1 = h_1 (h_1^2 + h_2^2)^{-\frac{1}{2}}$$

$$(2.69') \quad \lambda_2 = h_2 (h_1^2 + h_2^2)^{-\frac{1}{2}}.$$

On va essayer de définir autour de l'axe diagonal, un voisinage $V(\epsilon)$, tel que pour un ϵ donné, toute direction ϕ comprise dans ce voisinage est telle que les inégalités (2.66) sont vraies. La limite de $V(\epsilon)$ (zone hachurée sur la figure 14) est donnée par les équations

$$(2.70) \quad \epsilon \sin^2 \phi + \cos^2 \phi = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} (1 - \epsilon) \sin \phi \cos \phi$$

$$(2.70') \quad \sin^2 \phi + \epsilon \cos^2 \phi = \frac{\lambda_2}{\lambda_1} (1 - \epsilon) \sin \phi \cos \phi.$$

Lorsque

$$\phi > \text{arctg } \frac{h_2}{h_1},$$

c'est l'équation (2.70) qui fournit la courbe $\epsilon(\phi)$ qui décrit la frontière :

$$(2.71) \quad V_e(\phi) = \cotg \phi \frac{\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \sin \phi - \cos \phi}{\sin \phi + \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \cos \phi}$$

tandis que c'est l'équation (2.70') lorsque

$$0 < \phi < \text{arctg } \frac{h_2}{h_1}.$$

Le 'coefficient de diffusion corrigé' $\alpha_1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \alpha_3$ est donc négatif si le point (ϵ, ϕ) calculé à partir du tenseur de diffusion

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_3 \\ \alpha_3 & \alpha_2 \end{pmatrix}$$

est situé dans la région 3 de la figure 15 (sous la courbe CIE); c'est le coefficient $\alpha_2 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \alpha_3$ qui l'est si le point (ϵ, ϕ) est situé dans la région 2 (sous la courbe AGC). Dans la région 1, les coefficients sont tous deux positifs.

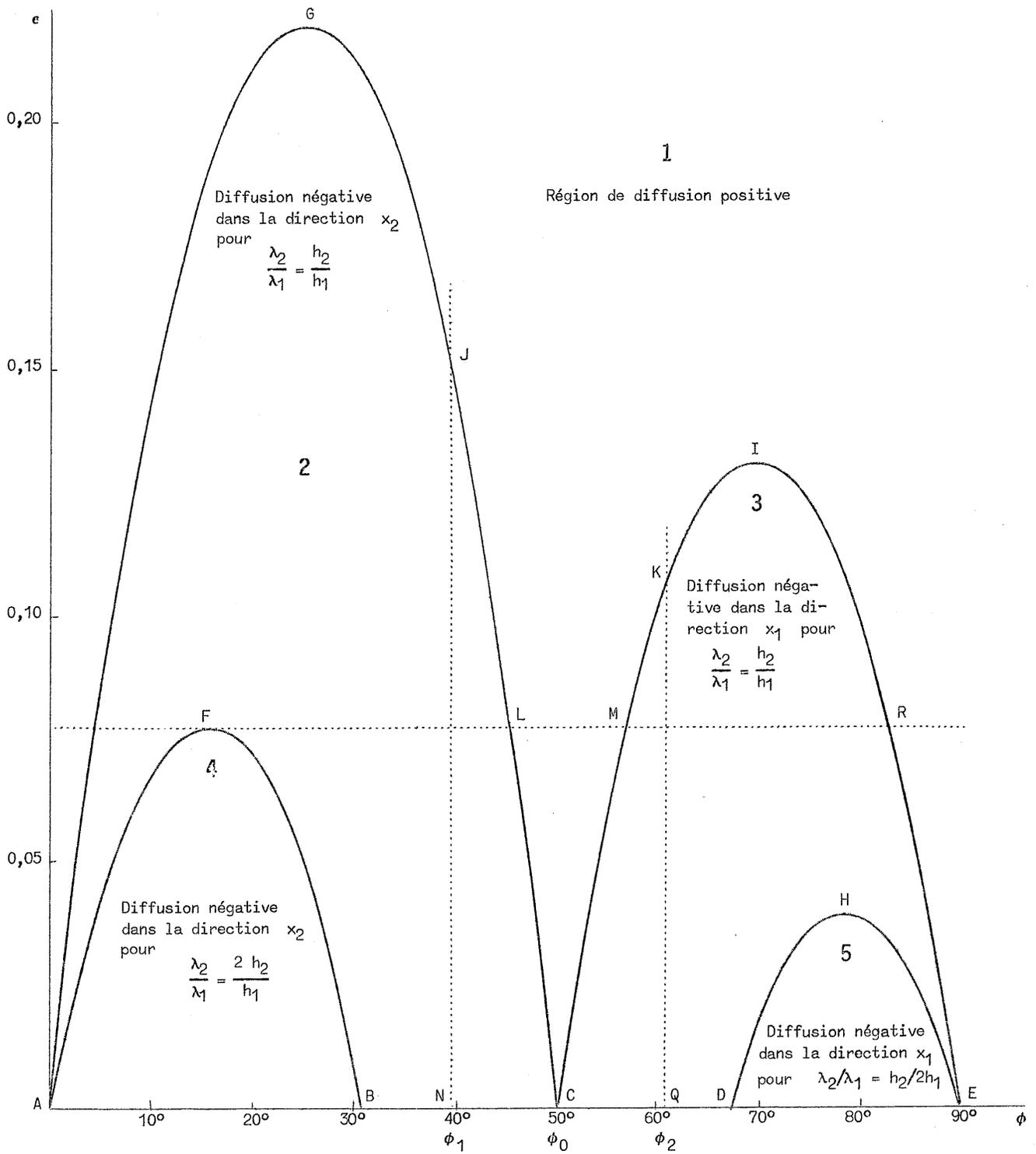


fig. 15.

Conditions paramétriques définissant les régions du plan (ϵ, ϕ) où la diffusion peut être négative

On peut diminuer la surface 'dangereuse' du plan (ϵ, ϕ) (région 2 + région 3) en choisissant d'autres approximations de δ_β^2 lorsque ϕ s'écarte trop de la direction de la diagonale. En effet, si pour les valeurs de ϕ supérieures à $\arctg \frac{h_2}{h_1}$, on choisit l'approximation (2.67'') au lieu de (2.67), et pour les valeurs de ϕ inférieures à $\arctg \frac{h_2}{h_1}$, on prend (2.67'), on montre facilement que

$$\alpha_1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \alpha_3 < 0 \quad \text{uniquement dans la région 5}$$

$$\alpha_2 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \alpha_3 < 0 \quad \text{uniquement dans la région 4 .}$$

Par conséquent, si au lieu de (2.67), on utilise à bon escient (2.67'') et (2.67') suivant que ϕ est plus grand ou plus petit que $\phi_0 = \arctg \frac{h_2}{h_1}$, on réduit très fortement les risques de voir apparaître des coefficients de diffusion négatifs. Dans l'exemple de la figure 15 où $\frac{h_2}{h_1} \sim 1,2$ on voit que les inégalités (2.63) sont vérifiées quel que soit ϕ si $\epsilon > 0,075$. En pratique, dans le Southern Bight, ϕ est supérieur à 50° le plus souvent, de sorte que l'approximation (2.67'') est la plus utilisée; dans ces cas, si $\epsilon > 0,04$ il n'y a pas de problème. Généralement, ϵ est d'ailleurs supérieur à 0,1 quand on effectue l'intégration KBM des coefficients de diffusion.

Il faut noter que la figure 15 représente les courbes limites de $\epsilon(\phi)$ pour un rapport $\frac{h_2}{h_1} \sim 1,2$; la région 5 est de surface inférieure à la région 4. Or, on peut montrer que plus le rapport $\frac{h_2}{h_1}$ est grand, plus petite est la surface de la région 5 et plus grande celle de la région 4; par contre, si $\frac{h_1}{h_2} > 1$, l'inverse se produit. Par conséquent si l'on a affaire à un problème où on sait que ϕ est proche de 90° , on a intérêt à augmenter le rapport $\frac{h_2}{h_1}$. Par contre, si ϕ varie de 0 à 90° sur la surface de la zone à étudier, il est préférable d'adopter un rapport des côtés de la maille le plus proche possible de 1.

Le calcul de ϕ et ϵ s'effectue en inversant les formules (2.64); on trouve

$$(2.72) \quad \phi = \frac{1}{2} \arctg \frac{2\alpha_3}{\alpha_1 - \alpha_2}$$

$$(2.72') \quad \epsilon = \left| \frac{z - 1}{z + 1} \right|, \quad z = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2\alpha_3} \sin 2\phi .$$

11.1.4.- Approximations des termes d'interactions

On regroupera ici sous ce vocable les termes d'interactions proprement dits [les \bar{I}_a de la formule (1.1)] et les termes de flux aux frontières air-mer et mer-fond (les \bar{S}_a de la même formule) et on les désignera par \bar{I}_a pour la facilité. Ces termes ont en commun le fait de refléter la part du comportement d'une variable d'état qui n'est pas purement hydrodynamique; ils introduisent de plus un couplage possible entre variables d'état.

Du point de vue strictement hydrodynamique, les variables d'état représentées par leurs concentrations \bar{r}_a évoluent indépendamment les unes des autres : l'advection et la diffusion opèrent sur chaque variable d'état isolément, comme si les autres n'existaient pas; c'est pourquoi, jusqu'à présent, on a pu écrire un schéma de simulation numérique absolument identique pour chacune des variables d'état du système étudié. Au contraire, les interactions que subit une variable d'état ne peuvent se calculer que si on connaît aussi (en général) la valeur des autres variables. Comme le nombre de variables d'état peut être différent d'une simulation à l'autre, et que pour la facilité de programmation, il faut écrire un algorithme général pour toutes les variables (de telle sorte qu'on puisse faire une 'boucle' sur l'ensemble des variables), il est donc exclu que les interactions s'expriment en fonction de l'état non connu des variables (c'est-à-dire implicitement), d'autant moins que les interactions sont souvent non-linéaires; l'expression implicite des termes d'interactions produirait un système d'équations algébrique (non-linéaires la plupart du temps) beaucoup trop difficile à résoudre; la formulation des interactions ne peut être qu'explicite. En supposant

$$\bar{u}_1 = \bar{u}_2 = \alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 0 ,$$

le prédicteur s'écrira donc, pour chaque variable α

$$(2.73) \quad \bar{r}_{a_{i,j}}^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_{a_{i,j}}^n = \frac{\Delta t}{2} \bar{I}_{a_{i,j}}^n$$

$$(2.73') \quad \bar{r}_{a_{i,j}}^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_{a_{i,j}}^{n+\frac{1}{4}} = 0$$

où \bar{I}_a^n est égal à $\bar{I}_a(\bar{r}_a^n, \bar{r}_\beta^n, \dots)$.

On n'a pas écrit directement

$$(2.74) \quad \bar{r}_a^{n+1/2} - \bar{r}_a^n = \frac{\Delta t}{2} \bar{I}_a^n$$

parce que, en pratique, la présence effective des termes d'advection et de diffusion nécessite l'usage de deux demi-étapes pour la construction du prédicteur.

11.1.5.- Réalisation du prédicteur effectif

En combinant (2.73), (2.54), (2.58), en utilisant (2.57) et en posant

$$(2.75) \quad A_1 = \frac{H^{-1} \Delta t}{2 h_1} \left(\alpha_1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \alpha_3 \right)$$

$$(2.75') \quad A_2 = \frac{H^{-1} \Delta t}{2 h_2} \left(\alpha_2 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \alpha_3 \right)$$

$$(2.75'') \quad A_3 = \frac{H^{-1} \Delta t}{4 h_1 h_2} \alpha_3 ,$$

le prédicteur s'écrit

$$(2.76) \quad \bar{r}_{a_{i,j}}^{n+1/2} + (\bar{u}_1' \delta_1^- + \bar{u}_1'' \delta_1^+ - A_1 \delta_1^2) \bar{r}_{a_{i,j}}^{n+1/4} = \frac{\Delta t}{2} \bar{I}_{a_{i,j}} (\bar{r}_a^n, \bar{r}_\beta^n, \dots) + \bar{r}_{a_{i,j}}^n$$

$$(2.76') \quad \bar{r}_{a_{i,j}}^{n+1/2} + (\bar{u}_2' \delta_2^- + \bar{u}_2'' \delta_2^+ - A_2 \delta_2^2) \bar{r}_{a_{i,j}}^{n+1/4} = \bar{r}_{a_{i,j}}^{n+1/4} .$$

Pour calculer les $\bar{r}_{a_{i,j}}^{n+1/4}$, on doit résoudre $n_a n_j$ systèmes d'équations algébriques tridiagonales; de même pour les $\bar{r}_{a_{i,j}}^{n+1/2}$, il faut résoudre $n_a n_i$ systèmes tridiagonaux, ou l'on a défini :

n_a = nombre de variables d'état,

n_i = nombre de points de la grille dans la direction e_1 ,

n_j = nombre de points de la grille dans la direction e_2 .

La résolution de tels systèmes est extrêmement aisée et rapide à l'aide de l'algorithme récursif de Thomas [Richtmeyer et Morton (1967)]. Ainsi, en désignant $\bar{r}_{a_{i,j}}^{n+1/4}$ ou $\bar{r}_{a_{i,j}}^{n+1/2}$ par u_k les systèmes (2.76) peuvent s'écrire

$$(2.77) \quad - a_k u_{k+1} + b_k u_k - c_k u_{k-1} = d_k$$

dont la solution s'obtient en calculant les e_k et f_k tels que

$$(2.78) \quad e_k = \frac{a_k}{b_k - c_k e_{k-1}} \quad k = 2, \dots, n-1$$

$$(2.78') \quad f_k = \frac{d_k + c_k f_{k-1}}{b_k - c_k e_{k-1}}$$

et en effectuant la récurrence

$$(2.79) \quad u_k = e_k u_{k+1} + f_k \quad k = n-1, \dots, 1 .$$

La stabilité de l'algorithme impose que [Marchuk (1970)] :

$$(2.80) \quad a_k + c_k \leq b_k$$

qui est une condition de dominance diagonale. On peut exprimer a_k , b_k , c_k pour (2.76) comme suit

$$(2.81) \quad a_k = (A_1 - \bar{u}_1'')_k$$

$$(2.81') \quad b_k = (1 + 2 A_1 + \bar{u}_1' - \bar{u}_1'')_k$$

$$(2.81'') \quad c_k = (A_1 + \bar{u}_1')_k$$

donc

$$(2.82) \quad a_k + c_k = (2 A_1 + \bar{u}_1' - \bar{u}_1'')_k < 1 + (2 A_1 + \bar{u}_1' - \bar{u}_1'')_k .$$

Si on n'avait pas utilisé des approximations 'amont' et 'aval' (2.55) pour l'expression des $\frac{\partial \bar{r}}{\partial x_i}$, on aurait obtenu

$$(2.83) \quad a_k = A_1 - (\bar{u}_1'' + \bar{u}_1')$$

$$(2.83') \quad b_k = 1 + 2 A_1$$

$$(2.83'') \quad c_k = A_1 + (\bar{u}_1'' + \bar{u}_1')$$

et

$$(2.84) \quad a_k + c_k = 2 A_1 < 1 + 2 A_1 .$$

Cependant, comme on peut facilement le montrer, on a généralement :

$$(2.85) \quad A_1 \ll (\bar{u}_1' + \bar{u}_1'')$$

$$(2.85') \quad A_1 \ll |\bar{u}_1' - \bar{u}_1''|$$

et dès lors

$$(2.86) \quad c_k \sim - a_k ;$$

c'est cette alternance de signes dans les coefficients qui affectent successivement une inconnue u_k quand k varie, qui, probablement,

est à la base du mauvais comportement des solutions implicites avec expression symétrique des dérivées premières. Par contre, bien que les inégalités (2.86) soient toujours vérifiées, quand on utilise les approximations (2.55), on a nécessairement par définition

$$(2.87) \quad \bar{u}'_1 \bar{u}''_1 = 0$$

$$(2.87') \quad \bar{u}'_1 > 0$$

$$(2.87'') \quad \bar{u}''_1 < 0 .$$

Par conséquent, si $A_1 > 0$ (et c'est presque toujours vrai, voir paragraphe 11.1.2), on a

$$(2.88) \quad a_k > 0 , \quad c_k > 0$$

et il n'y a pas possibilité d'apparition d'oscillations du fait de l'algorithme de récursion lui-même (il peut bien entendu y avoir des oscillations dans la solution pour d'autres raisons). La formule (2.77) est une formule où apparaissent trois points; si la diffusion était extrêmement faible, l'un ou l'autre des coefficients serait nul, selon la direction du vecteur vitesse et la formule (2.77) ne serait qu'apparemment à trois points, ce qui peut éventuellement poser des problèmes dans l'expression des conditions aux limites.

11.2.- Construction du correcteur

Le correcteur peut être explicite, à cause de la réserve de stabilité fournie par le prédicteur. Il doit être parfaitement *consistent* à l'équation d'évolution, sinon le schéma complet ne le serait pas non plus; il doit de plus approcher l'équation différentielle avec une précision suffisante. Le prédicteur a fourni des valeurs $\bar{r}_{a_{i,j}}^{n+1}$ en un pseudo-instant t^{n+1} , bien que le prédicteur ne soit pas parfaitement *consistent*, le temps t^{n+1} est bien centré entre $n \Delta t$ et $(n+1) \Delta t$ car l'*inconsistence* de l'approximation ne porte que sur des termes petits par rapport aux termes dominants, de sorte que si on construit la solution en $(n+1) \Delta t$ à l'aide des valeurs prédites, l'approximation temporelle sera relativement précise.

A ce stade, il faut en plus tenir compte du fait que l'équation (2.2) provient d'une équation de conservation. La quantité conservée est

$$(2.89) \quad \int_{\Omega} H \bar{r} \, d\Omega = C^{te} .$$

Lorsque les coefficients \bar{u}_1 , \bar{u}_2 , H , ... ne sont pas constants, l'équation (2.2) n'est pas écrite sous forme conservative. Or il est indispensable de disposer d'une forme conservative si l'on veut que l'on ait, en l'absence de termes d'interactions, la relation

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} H \bar{r} \, d\Omega = 0$$

qui se traduit de façon discrète par l'égalité

$$(2.90) \quad \sum_{i,j} H_{i,j}^{n+1} \bar{r}_{i,j}^{n+1} = \sum_{i,j} H_{i,j}^n \bar{r}_{i,j}^n .$$

Si l'on désigne par $C_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}$ une approximation discrète du second membre de l'équation

$$(2.91) \quad \frac{\partial}{\partial t} (H \bar{r}) = - \nabla \cdot (H \bar{u} \bar{r}) + \nabla \cdot \left[\gamma \frac{H^2}{u} \bar{u} (\bar{u} \cdot \nabla \bar{r}) \right] + H \bar{I}$$

qui est l'expression de (2.2) sous forme conservative, la réalisation de l'égalité (2.90) implique

$$\sum_{i,j} C_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = 0 .$$

On montre facilement que cette somme est identiquement nulle en groupant tous les termes affectant chaque $\bar{r}_{i,j}$ dans (2.92), pour $\bar{I} = 0$. La meilleure approximation d'un terme différentiel de la forme

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left(A \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_1} \right)$$

est

$$A_{i+\frac{1}{2}} (\bar{r}_{i+1} - \bar{r}_i) - A_{i-\frac{1}{2}} (\bar{r}_i - \bar{r}_{i-1})$$

où $A_{i+\frac{1}{2}}$ et $A_{i-\frac{1}{2}}$ sont respectivement les valeurs du coefficient A au milieu des intervalles $[i, i+1]$ et $[i-1, i]$ (approximations qu'on utilise également en pratique dans le prédicteur).

L'étape correctrice s'écrira donc

$$\begin{aligned}
 & H^{\frac{n+1}{r}} \\
 & = H^n \bar{r}^n + \left[- (1-\tau)(\delta_1^+ + \delta_1^-)(\overline{Hu}_1^+ \bar{r} + \overline{Hu}_1^- \bar{r})_{i,j} + \tau(\delta_1^- \overline{Hu}_1^+ \bar{r} + \delta_1^+ \overline{Hu}_2^- \bar{r})_{i,j} \right. \\
 (2.92) \quad & \quad - (1-\tau)(\delta_2^+ + \delta_2^-)(\overline{Hu}_2^+ \bar{r} + \overline{Hu}_2^- \bar{r})_{i,j} + \tau(\delta_2^- \overline{Hu}_2^+ \bar{r} + \delta_2^+ \overline{Hu}_2^- \bar{r})_{i,j} \\
 & \quad + 2 A_{1_{i+\frac{1}{2},j}} \delta_1^- \bar{r}_{i+1,j} - 2 A_{1_{i-\frac{1}{2},j}} \delta_1^- \bar{r}_{i,j} + 2 A_2 \delta_2^- \bar{r}_{i,j+1} \\
 & \quad \left. - 2 A_{2_{i,j-\frac{1}{2}}} \delta_2^- \bar{r}_{i,j} + 2 \delta_\beta (A_3 \delta_\beta \bar{r}_{i,j}) \right]^{n+\frac{1}{2}} + H \bar{I}^{n+\frac{1}{2}}
 \end{aligned}$$

où le dernier terme est cohérent avec l'approximation $\delta_{\beta\beta}^2$ utilisée dans le prédicteur.

En pratique, comme

$$(2.93) \quad \frac{1}{H} \frac{\partial H}{\partial t} \ll \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{r}}{\partial t}, \quad \frac{1}{u} \frac{\partial u}{\partial t} \ll \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{r}}{\partial t},$$

on fait systématiquement l'approximation

$$H^{n+1} \sim H^n, \quad \bar{u}^{n+\frac{1}{2}} \sim \bar{u}^n$$

pour diminuer le besoin de place en mémoire centrale de l'ordinateur. Cette approximation induit que

$$\sum_{i,j} C_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}$$

n'est pas constamment nul; cependant, grâce aux inégalités (2.93), l'erreur, périodique comme la marée, est d'amplitude très faible (moins de 1 % de la masse totale dans les conditions habituelles).

D'autre part, par suite de la présence d'opérateurs tels que $\delta_1^+ + \delta_1^-$, δ_1^2 , etc., il n'est pas possible d'effectuer les corrections aux points situés sur la frontière de la grille. Ces points seront donc affectés des valeurs prédites. Ceci n'a guère d'importance étant donné que les algorithmes de simulation sont construits de telle façon que les valeurs absolues des variables d'état sur la frontière restent faibles par rapport à ce qu'elles sont à l'intérieur de la grille, les erreurs systématiques en ces points sont donc petites par rapport à l'erreur globale.

On a dit plus haut que l'approximation de $\delta_{\beta\beta}^2$ la plus utilisée en pratique était (2.67''); il n'est pas possible de l'utiliser près des frontières du nord et du sud parallèles à e_1 sous peine d'introduire des valeurs indéterminées; il en est de même si l'approximation (2.67') est utilisée près des frontières parallèles à e_2 . En pratique donc, pour les points situés juste près du contour de la grille, on usera systématiquement de la formule (2.67); même si cet emploi entraîne une fréquence plus élevée de diffusivités négatives près de la frontière, l'effet de celles-ci sera faible pour les mêmes raisons que précédemment, d'autant plus que l'expression de relations aux frontières produit, comme on le verra plus loin une diffusion numérique positive qui vient compenser cet effet.

Quant à la diffusion numérique imposée aux points internes de la grille, on voit qu'elle est facilement ajustable grâce au paramètre τ qu'on peut varier de 0 à 1 (pour $\tau = 0$, il n'y a pas de diffusion numérique).

12.- Précision de la méthode

On va déterminer l'erreur de troncature du schéma prédicteur-correcteur (2.76) (2.89) en étudiant séparément la discrétisation des opérateurs 'hydrodynamiques' et des termes d'interactions. Ces derniers sont en effet *a priori* non-linéaires et il est difficile de leur appliquer la méthode habituelle d'élimination des valeurs intermédiaires qui suppose la linéarité et la commutativité des opérateurs. On supposera que les termes principaux de l'erreur sont additifs; cela revient à négliger, au premier ordre de l'erreur de troncature, le couplage entre les interactions physico-chimiques et le comportement hydrodynamique des variables d'état.

12.1.- Erreur sur l'intégration des interactions

Le schéma réalisant l'intégration des termes d'interactions est

$$(2.94) \quad \bar{r}_a^{n+1/2} = \bar{r}_a^n + \frac{\Delta t}{2} \bar{I}_a^n$$

$$(2.94') \quad \bar{r}_a^{n+1} = \bar{r}_a^n + \Delta t \bar{I}_a^{n+\frac{1}{2}}.$$

Comme aucun gradient n'apparaît dans \bar{I}_a , il n'y a pas d'erreur de troncature due à la discrétisation spatiale. En éliminant $\bar{r}_a^{n+\frac{1}{2}}$ entre (2.94) et (2.94'), on trouve :

$$(2.95) \quad \begin{aligned} \bar{r}_a^{n+1} &= \bar{r}_a^n + \Delta t \bar{I}_a(\bar{r}_a^{n+\frac{1}{2}}, \bar{r}_\beta^{n+\frac{1}{2}}, \dots) \\ &= \bar{r}_a^n + \Delta t \bar{I}_a(\bar{r}_a^n + \frac{\Delta t}{2} \bar{I}_a^n, \bar{r}_\beta^n + \frac{\Delta t}{2} \bar{I}_\beta^n, \dots) \\ &= \bar{r}_a^n + \Delta t [\bar{I}_a(\bar{r}_a^n, \bar{r}_\beta^n, \dots) + \frac{\Delta t}{2} \sum_{\beta} \bar{I}_\beta^n \frac{\partial \bar{I}_a}{\partial r_\beta} + \dots] \\ &= \bar{r}_a^n + \Delta t \bar{I}_a(\bar{r}_a^n, \bar{r}_\beta^n, \dots) + \frac{\Delta t^2}{2} \sum_{\beta} \bar{I}_\beta^n \frac{\partial \bar{I}_a}{\partial r_\beta} + \dots \end{aligned}$$

où \sum_{β} représente la somme des contributions de l'ensemble des variables d'état.

Or, si on décompose \bar{r}_a^{n+1} en série de Taylor, on trouve

$$(2.96) \quad \bar{r}_a^{n+1} = \bar{r}_a^n + \Delta t \frac{\partial \bar{r}_a}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 \bar{r}_a}{\partial t^2} + \dots$$

où

$$\frac{\partial \bar{r}_a}{\partial t} = \bar{I}_a(\bar{r}_a^n, \bar{r}_\beta^n, \dots)$$

car c'est l'équation qu'on tente d'intégrer,

$$\frac{\partial^2 \bar{r}_a}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t} \bar{I}_a^n = \sum_{\beta} \frac{\partial \bar{I}_a}{\partial r_\beta} \cdot \frac{\partial \bar{r}_\beta}{\partial t} = \sum_{\beta} \bar{I}_\beta^n \frac{\partial \bar{I}_a}{\partial r_\beta}$$

de sorte qu'en substituant dans (2.96), on trouve une expression identique à (2.95), jusqu'au second ordre. La précision du schéma (2.94) est donc du deuxième ordre : l'erreur de troncature sur l'équation différentielle

$$\frac{\partial \bar{r}_a}{\partial t} = \bar{I}_a(\bar{r}_a, \bar{r}_\beta, \dots)$$

est

$$O(\Delta t^2 \frac{\partial^3 \bar{r}_a}{\partial t^3}) \sim O(\Delta t^2 \bar{I}_a^3).$$

Le schéma proposé pour l'intégration est donc relativement bien centré dans le temps et précis au deuxième ordre.

12.2.- Erreur sur l'approximation des opérateurs différentiels

L'intégration de la partie 'hydrodynamique' de l'équation d'évolution se fait à l'aide des schémas (2.76) et (2.92) où \bar{I}^n et $\bar{I}^{n+\frac{1}{2}}$ sont supposés nuls, et tous les coefficients constants. Soit E l'opérateur-identité tel que

$$E \bar{r}_{i,j} = \bar{r}_{i,j}$$

et Λ_1 , Λ_2 , Λ des opérateurs différentiels tels que (2.76) s'écrive

$$(2.97) \quad (E + \Lambda_1) \bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = \bar{r}_{i,j}^n,$$

(2.76') s'écrive

$$(2.97') \quad (E + \Lambda_2) \bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = \bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}$$

et (2.92) s'écrive

$$(2.97'') \quad \bar{r}_{i,j}^{n+1} = \bar{r}_{i,j}^n + \Lambda \bar{r}_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}.$$

La commutativité des opérateurs est effective si les coefficients \bar{u}_1 , \bar{u}_1'' , ... , A_3 sont spatialement homogènes. En éliminant les valeurs aux temps fictifs $t^{n+\frac{1}{2}}$ et $t^{n+\frac{1}{2}}$, on trouve :

$$(2.98) \quad (E + \Lambda_1)(E + \Lambda_2)(\bar{r}_{i,j}^{n+1} - \bar{r}_{i,j}^n) - \Lambda \bar{r}_{i,j}^n = 0.$$

On calculera l'erreur de troncature de ce schéma en supposant que tous les coefficients sont constants et que la formule (2.67'') est utilisée pour l'approximation de δ_β^2 . Les valeurs de λ_1 et λ_2 sont

$$(2.99) \quad \lambda_1 = \frac{h_1}{(h_1^2 + 4 h_2^2)^{\frac{1}{2}}}$$

$$(2.99') \quad \lambda_2 = \frac{2 h_2}{(h_1^2 + 4 h_2^2)^{\frac{1}{2}}}.$$

Les tableaux 1 et 2 schématisent la décomposition en série de Taylor autour d'un point $c_{i,j}$ des valeurs d'une fonction c aux divers points possibles d'une grille d'intégration. Le tableau 1 donne la décomposition en série de Taylor 'spatiale', qui est valable pour les points de la grille correspondant à $n \Delta t$ et $(n + 1) \Delta t$; le tableau 2 donne les termes additionnels pour les points de la grille en $(n + 1) \Delta t$ ($c_{i,j}^{n+1}$, $c_{i+1,j}^{n+1}$, ...). On n'a représenté que le début du développement.

Tableau 1

Décomposition en série de Taylor autour d'un point c_{ij} d'une grille, des valeurs d'une fonction c sur les points voisins, au temps $n \Delta t$.

	$c_{i,j}$	$c_{i+1,j}$	$c_{i-1,j}$	$c_{i,j+1}$	$c_{i,j-1}$	$c_{i+1,j+2}$	$c_{i-1,j-2}$
c	1	1	1	1	1	1	1
$h_1 \frac{\partial c}{\partial x_1}$		1	-1			1	-1
$\frac{h_1^2}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x_1^2}$		1	1			1	1
$\frac{h_1^3}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial x_1^3}$		1	-1			1	-1
$\frac{h_1^4}{24} \frac{\partial^4 c}{\partial x_1^4}$		1	1			1	1
$h_2 \frac{\partial c}{\partial x_2}$				1	-1	2	-2
$\frac{h_2^2}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x_2^2}$				1	1	4	4
$\frac{h_2^3}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial x_2^3}$				1	-1	8	-8
$\frac{h_2^4}{24} \frac{\partial^4 c}{\partial x_2^4}$				1	1	16	16
$h_1 h_2 \frac{\partial^2 c}{\partial x_1 \partial x_2}$						2	2
$\frac{h_1^2 h_2}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x_1^2 \partial x_2}$						2	-2
$\frac{h_1^3 h_2}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial x_1^3 \partial x_2}$						2	2
$\frac{h_1 h_2^2}{2} \frac{\partial^3 c}{\partial x_1 \partial x_2^2}$						4	-4
$\frac{h_1 h_2^3}{6} \frac{\partial^4 c}{\partial x_1 \partial x_2^3}$						8	8
$\frac{h_1^2 h_2^2}{2} \frac{\partial^4 c}{\partial x_1^2 \partial x_2^2}$						4	4

Tableau 2

Termes supplémentaires de la série de Taylor pour les valeurs de la fonction c au temps $(n+1) \Delta t$

	$c_{i,j}$	$c_{i+1,j}$	$c_{i-1,j}$	$c_{i,j+1}$	$c_{i,j-1}$	$c_{i+1,j+2}$	$c_{i-1,j-2}$
$\Delta t \frac{\partial c}{\partial t}$	1	1	1	1	1	1	1
$\frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial t^2}$	1	1	1	1	1	1	1
$\Delta t h_1 \frac{\partial^2 c}{\partial t \partial x_1}$		1	-1			1	-1
$\Delta t \frac{h_1^2}{2} \frac{\partial^3 c}{\partial t \partial x_1^2}$		1	1			1	1
$\Delta t h_2 \frac{\partial c}{\partial x_2}$				1	-1	2	-2
$\Delta t \frac{h_2^2}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial t \partial x_2}$				1	1	4	4
$\Delta t h_1 h_2 \frac{\partial^2 c}{\partial x_1 \partial x_2}$						2	2
$\frac{\Delta t^3}{6} \frac{\partial^3 c}{\partial t^3}$	1	1	1	1	1	1	1

Tableau 3

Décomposition de l'opérateur discret $-\Lambda - (E + \Lambda_1)(E + \Lambda_2)$ en termes des points d'une grille d'intégration (opérateur appliqué à c^n).

	$c_{i,j}^n$	$c_{i+1,j}^n$	$c_{i-1,j}^n$	$c_{i,j+1}^n$	$c_{i,j-1}^n$	$c_{i+1,j+2}^n$	$c_{i-1,j-2}^n$
1	-1						
\bar{u}_1^I	-1	+1					
\bar{u}_1^{II}	1		-1				
\bar{u}_2^I	1			1			
\bar{u}_2^{II}	1				-1		
A_1	+2	-1	-1				
A_2	+2			-1	-1		
A_3	+4					-2	-2

Tableau 4

Décomposition de l'opérateur discret $(E + \Lambda_1)(E + \Lambda_2)$ en termes des points d'une grille d'intégration (opérateur appliqué à c^{n+1}).

	$c_{i,j}^{n+1}$	$c_{i+1,j}^{n+1}$	$c_{i-1,j}^{n+1}$	$c_{i,j+1}^{n+1}$	$c_{i,j-1}^{n+1}$	$c_{i+1,j+2}^{n+1}$	$c_{i-1,j-2}^{n+1}$
1	1						
\bar{u}_1'	1		-1				
\bar{u}_1''	-1	1					
\bar{u}_2'	1				-1		
\bar{u}_2''	-1			1			
A_1	2	-1	-1				
A_2	2			-1	-1		
A_3							

Les tableaux 3 et 4 donnent en fonction des points voisins, le résultat de l'application des opérateurs discrets δ_1^- , δ_1^+ , δ_2^- , δ_2^+ , δ_1^2 , δ_2^2 , δ_β^2 aux points $c_{i,j}$, chacun des opérateurs étant affecté du coefficient adéquat \bar{u}_1' , \bar{u}_1'' , ..., A_3 . Le tableau 3 correspond aux opérateurs appliqués à une fonction c en $n \Delta t$, le tableau 4 a la même signification en $(n + 1) \Delta t$; ces tableaux ont été écrits à partir de l'équation (2.98). A l'aide de simples produits scalaires entre lignes correspondantes, on calcule facilement la décomposition en série des opérateurs discrets de l'équation (2.98).

Après division par Δt et substitution de \bar{u}_1' , \bar{u}_2' , \bar{u}_1'' , \bar{u}_2'' , A_1 , A_2 , A_3 , on peut séparer cette décomposition en série de Taylor de l'équation (2.98) en

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_1} + \bar{u}_2 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_2} - \alpha_1 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1^2} - \alpha_2 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2^2} - 2 \alpha_3 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1 \partial x_2} \\
 & - (1 - \tau) \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{|\bar{u}_1| h_1}{2} \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1^2} + \frac{|\bar{u}_2| h_2}{2} \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2^2} \right) + \frac{\tau}{2} \left(|\bar{u}_1| h_1 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1^2} + |\bar{u}_2| h_2 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2^2} \right) \\
 & + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \bar{r}}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_1} + \bar{u}_2 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_2} - \alpha_1 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1^2} - \alpha_2 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_2^2} - 2 \alpha_3 \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1 \partial x_2} \right) \\
 & + \frac{\Delta t}{2} \left(+ \frac{h_1}{2h_2} \alpha_3 \frac{\partial^3 \bar{r}}{\partial t \partial x_1^2} + \frac{2h_2}{h_1} \alpha_3 \frac{\partial^3 \bar{r}}{\partial t \partial x_2^2} \right) + O(h_1 h_2, h_1^2, h_2^2, \Delta t^2) + \dots \\
 & = 0.
 \end{aligned}$$

La première ligne représente l'équation de dispersion elle-même; le schéma (2.98) est donc parfaitement *consistant* à l'équation différentielle qu'on cherche à résoudre. Le troisième terme est une diffusion numérique qui provient de l'approximation asymétrique des dérivées premières dans la construction du correcteur. Si on avait utilisé des dérivées centrées, ce terme n'apparaîtrait pas, mais on a expliqué plus haut la nécessité de ce genre d'approximation.

Le quatrième terme est lui aussi nul; le cinquième terme provient de la légère *inconsistance* (en Δt) entre le prédicteur et l'équation différentielle qui est due au fait que la dérivée croisée n'y est pas complètement exprimée. Les termes restants sont du deuxième ordre en pas temporel et pas spatiaux. On voit donc que quand $\alpha_3 = 0$ et qu'il n'y a pas de diffusion numérique dans le correcteur, le schéma est du deuxième ordre de précision.

13.- Stabilité de la méthode du deuxième ordre

La stabilité de la méthode sera étudiée à l'aide du critère de Von Neumann

$$(2.100) \quad \left\| \frac{\rho^{n+1}}{\rho^n} \right\| \leq 1 .$$

Le facteur d'amplification $\frac{\rho^{n+1}}{\rho^n}$ s'obtient en substituant à la solution \bar{r} une quelconque de ses composantes de Fourier $\rho(t) \exp(i\omega_1 x_1 + i\omega_2 x_2)$ dans l'équation (2.98). Les transformées de Fourier des opérateurs différentiels Λ_1 , Λ_2 , Λ , sont respectivement

$$(2.101) \quad G(\Lambda_1) = L_1 = (1 - c_1)(2A_1 + q_1 |\bar{u}_1|) + iq_1 \bar{u}_1 s_1$$

$$(2.101') \quad G(\Lambda_2) = L_2 = (1 - c_1)(2A_2 + q_2 |\bar{u}_2|) + iq_2 \bar{u}_2 s_2$$

$$(2.101'') \quad G(\Lambda) = L = -2i(1 - \tau)(q_1 u_1 + q_2 u_2 s_2) \\ - 4A_2(1 - c_1) - 4A_2(1 - c_2) - 4A_3(1 - c_{12}) \\ - 2\tau[(1 - c_1)q_1 |\bar{u}_1| + (1 - c_2)q_2 |\bar{u}_2| + iq_1 \bar{u}_1 s_1 + iq_2 \bar{u}_2 s_2]$$

où l'on a posé

$$q_1 = \frac{\Delta t}{2 h_1}$$

$$q_2 = \frac{\Delta t}{2 h_2}$$

$$c_1 = \cos \omega_1 h_1$$

$$c_2 = \cos \omega_2 h_2$$

$$s_1 = \sin \omega_1 h_1$$

$$s_2 = \sin \omega_2 h_2$$

$$c_{12} = \cos(\omega_1 h_1 + 2 \omega_2 h_2) .$$

On étudiera uniquement le cas où l'approximation (2.67") pour $\delta_{\beta\beta}^2$ est utilisée. Les autres cas s'établissent de manière similaire.

La transformée de Fourier de l'équation (2.98) s'écrit

$$(1 + L_1)(1 + L_2)(\rho^{n+1} - \rho^n) = L \rho^n$$

d'où l'on déduit le facteur d'amplification

$$(2.102) \quad \frac{\rho^{n+1}}{\rho^n} = \frac{L + (1 + L_1)(1 + L_2)}{(1 + L_1)(1 + L_2)} .$$

Les calculs sont très longs pour déterminer la condition de stabilité qui vérifie l'inégalité (2.100) quels que soient ω_1 et ω_2 .

On montre finalement

1) lorsque $A_3 = 0$, c'est-à-dire $\alpha_3 = 0$, le schéma (2.98) est inconditionnellement stable quel que soit τ compris entre 0 et 1 : l'introduction d'une diffusion numérique positive ($\tau > 0$) et limitée ne déstabilise pas le schéma;

2) lorsque la dérivée croisée apparaît (cas le plus fréquent dans le problème traité ici) une condition suffisante de stabilité est

$$(2.103) \quad \frac{\Delta t \alpha_3}{h_1 h_2} < 2 .$$

Il faut noter que dans ce cas, il n'y a pas d'interaction entre la diffusion et l'advection pour la détermination de la condition de stabilité, ce qui n'était pas vrai pour les méthodes explicites esquissées au début de ce chapitre.

La condition de stabilité ne dépend en aucun cas de la grandeur des termes d'advection, ce qui est essentiel pour le but poursuivi. D'autre part, Hamming (1962) a montré qu'une approximation prédicteur-correcteur telle que (2.15) est marginalement stable lorsque f n'est pas un opérateur différentiel. Les essais numériques ont confirmé qu'aucune instabilité n'apparaît si (2.103) est réalisée.

On ne calcule généralement la précision et la stabilité de méthodes numériques appliquée à des équations à coefficients variables qu'en découpant le domaine de variation en régions plus petites où l'on suppose la constance des coefficients; les analyses faites ici restent donc valables, à condition que les variations soient faibles (c'est le cas) et que les valeurs maximales des coefficients sur la zone à étudier soient prises en considération.

14.- Conditions aux limites

On a déjà abordé ce point précédemment; le problème majeur est de trouver une relation aux points frontières où le vecteur vitesse pointe vers l'extérieur. Soit la situation hydrodynamique représentée par la figure 7; le long des frontières CD et DA; Marchuk (1970) suggère d'imposer simplement que la partie principale issue de la désintégration de l'équation différentielle soit vérifiée; pour le premier pas du prédicteur on imposera donc que

$$(2.104) \quad \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_1} = \bar{I}$$

puisque c'est l'équation différentielle qui correspond à ce pas. La réalisation discrète en est

$$(2.105) \quad \bar{r}_{k,j}^{n+1/2} + \bar{u}_1 \frac{\Delta t}{2 h_1} (\bar{r}_{k,j}^{n+1/2} - \bar{r}_{k-1,j}^{n+1/2}) = \bar{r}^n + \frac{\Delta t}{2} \bar{I}^n$$

où k est le point frontière sur la ligne j .

Cette relation n'est pas tout à fait identique à (2.76) (absence de diffusion physique); par contre, la diffusion numérique est la même qu'aux points intérieurs. C'est l'expression discrète d'une condition du type de Fourier.

De même, au deuxième pas du correcteur, on vérifiera

$$(2.106) \quad \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} + \bar{u}_2 \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_2} = 0$$

dont la réalisation numérique est :

$$(2.107) \quad \bar{r}_{i,1}^{n+\frac{1}{2}} + \bar{u}_2 \frac{\Delta t}{2 h_2} (\bar{r}_{i,1}^{n+\frac{1}{2}} - \bar{r}_{i,1-1}^{n+\frac{1}{2}}) = \bar{r}^{n+\frac{1}{2}}$$

où ℓ est le point frontière sur la colonne i .

Le cas échéant, on applique (2.105) et (2.106) en $i = 1$ ou $j = 1$ suivant que le courant en ces points est dirigé vers l'extérieur du domaine d'intégration.

On n'applique pas de correcteur en ces points-frontière car il n'y a pas moyen d'utiliser des approximations centrées de précision supérieure. Il s'ensuit que les valeurs sur la frontière sont toujours des valeurs affectées d'une erreur en $(\Delta t, h_1, h_2)$; cela n'a guère d'importance dans la mesure où les algorithmes de résolution sont conçus de telle manière que les concentrations des variables d'état demeurent très faibles sur le contour de la grille d'intégration.

15.- Conclusion de l'analyse de la méthode numérique du deuxième ordre

La méthode proposée est celle qui, par expérience, s'est longtemps avérée la plus adéquate pour la simulation de déversements de polluants. Elle est précise au second ordre, stable pour des valeurs de Δt nettement supérieures à celles qu'on utilise dans les simulations effectives. On y introduit aisément une diffusion numérique lorsque c'est nécessaire, et les interactions, termes de couplage non-linéaires, y sont facilement exprimées. Les systèmes d'équations algébriques qui apparaissent dans les étapes semi-implicites du prédicteur sont tridiagonaux, de sorte que leur résolution est très rapide et alourdit peu le coût d'exploitation de la méthode.

16.- Elaboration d'une méthode numérique plus précise

La méthode précédemment décrite n'est pas satisfaisante à tous points de vue. En effet, la mauvaise représentation de la propagation des modes numériques de faible longueur d'onde ($n < 10$), inhérente aux méthodes du deuxième ordre, impose l'introduction d'une diffusion numérique relativement élevée pour amortir rapidement les modes numériques mal intégrés. Or la diffusion numérique nécessaire est souvent du même ordre de grandeur que la diffusion physique, en tous cas tant que les gradients spatiaux de la solution sont relativement élevés (pour donner un ordre de grandeur, pendant une période de marée). Pendant les déversements proprement dits, les pics de concentration en polluants sont extrêmement aigus, et de ce fait, la diffusion numérique nécessaire pour éviter le démantèlement de la solution par instabilité non-linéaire est plus élevée que la diffusion réelle pendant les premiers pas de la simulation.

On est donc confronté au dilemme suivant :

- ou bien on veut à toute force respecter la diffusion réelle, mais dans ce cas, par instabilité non-linéaire, la solution dégénère très rapidement et perd toute signification physique; elle devient parfaitement inutilisable;
- ou bien on tente de conserver à la solution un comportement physiquement acceptable (pas trop de concentrations négatives, tache de polluant relativement compacte), mais on utilise en pratique une diffusion différente de la diffusion physique.

La seconde alternative est un moindre mal : en effet, sauf pendant l'initialisation de la simulation, la diffusion effective est de 20 % à 100 % supérieure à la diffusion réelle *in situ*; de plus, elle possède à peu près la même structure anisotrope que cette dernière, en tout cas, dans le sud de la mer du Nord : pour s'en convaincre il suffit d'examiner la figure 16 représentant les ellipses associées respectivement au tenseur moyen de diffusion par effet cisailant (courbe 1) et au tenseur moyen de diffusion d'origine numérique (courbe 2).

Cependant, on peut malgré tout tenter d'encore mieux représenter le phénomène d'advection-diffusion; pour cela, il faut :

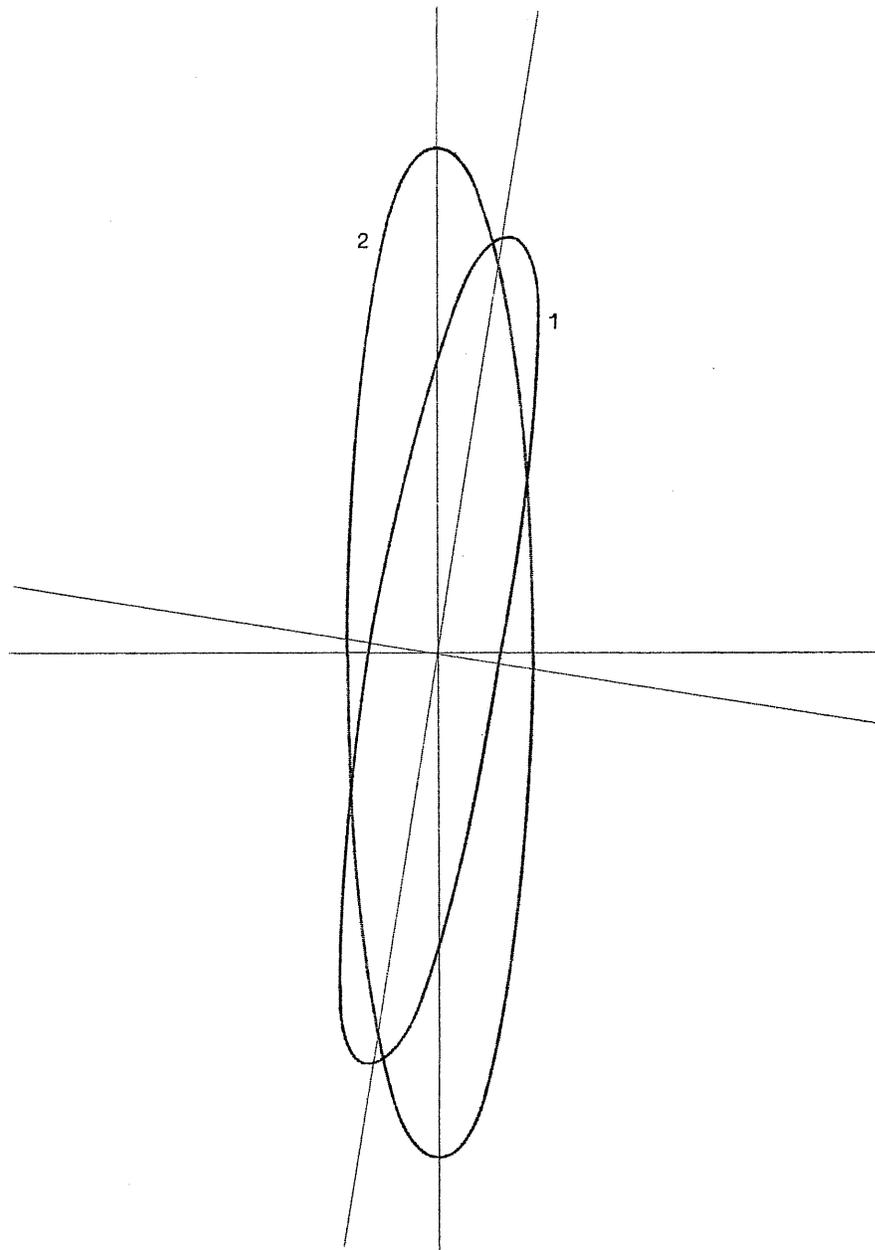


fig. 16.

Comparaison des coefficients de diffusion physique et numérique. La courbe 1 est l'ellipse associée au tenseur des coefficients de diffusion physique pour $\gamma = 0,45$. La courbe 2 est l'ellipse associée au tenseur des coefficients de diffusion numérique pour $\tau = 0,25$. On constate que les deux tenseurs ont une structure fort analogue.

- diminuer ou supprimer la diffusion numérique nécessaire à la stabilisation du schéma;

- trouver une approximation de la dérivée croisée qui n'introduise pas de diffusion parasite lorsque le déterminant du tenseur des coefficients de diffusion est nul ou très petit.

Pour rencontrer la première condition, C. Hirsch (1975) suggère l'utilisation de schémas plus précis aux différences finies, ou le recours à des méthodes aux éléments finis.

Ces dernières sont relativement difficiles à mettre en oeuvre et encore mal adaptées à la résolution d'équations d'évolution. On s'est donc tourné vers les méthodes aux différences finies du quatrième ordre; il n'est pas nécessaire d'aller au-delà car Kreiss (1972) a montré que le gain de précision est négligeable et l'augmentation de la complexité des algorithmes prohibitive. Comme les phénomènes de dispersion numérique dépendent essentiellement de l'erreur de troncature sur les dérivées spatiales du premier ordre, il n'est pas utile d'essayer d'augmenter la précision de l'approximation temporelle. On gardera donc la structure prédicteur-correcteur. L'utilisation d'approximations de haute précision, nécessairement symétriques, dans des schémas prédicteur-correcteur, impose des techniques semi-implicites car les schémas purement explicites sont inconditionnellement instables. Malheureusement, les méthodes classiques pour l'approximation précise des dérivées engendrent des systèmes d'équations linéaires pentadiagonales dont la résolution est nettement moins rapide que celles d'équations tridiagonales.

17.- Présentation des méthodes compactes de haute précision

Il existe des méthodes aux différences finies de haute précision qui engendrent des systèmes d'équations tridiagonales quand on les utilise dans des schémas implicites; il s'agit des méthodes compactes. L'idée de ces méthodes, encore appelées méthodes hermitiennes, a été développée indépendamment et à peu près simultanément par R. Hirsch (1975), reprenant une idée de Kreiss [Orszag et Israeli (1974)], et par l'auteur de ce travail [Adam (1975)]. On va d'abord en exposer le principe et

l'intérêt en considérant l'équation différentielle

$$(2.108) \quad \frac{\partial c}{\partial t} + V \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

qui est donc une équation d'advection-diffusion typique; on supposera provisoirement que V et D sont des constantes.

La façon classique d'obtenir les dérivées $\frac{\partial c}{\partial x}$ et $\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$ est de les exprimer comme des combinaisons linéaires des points voisins du point de la grille d'intégration où on veut les calculer: ainsi

$$\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_j \sim \frac{1}{2h} (c_{j+1} - c_{j-1}) + O(h^2)$$

$$\left. \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right|_j \sim \frac{1}{h^2} (c_{j+1} + c_{j-1} - 2c_j) + O(h^2)$$

ou encore des approximations d'ordre inférieur ou supérieur (on utilise alors cinq noeuds au lieu de trois).

On peut par ailleurs, calculer des approximations implicites très précises des dérivées

$$\frac{\partial c}{\partial x} \sim \hat{c}_x, \quad \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \sim \hat{c}_{xx},$$

grâce à des équations de la forme [Collatz (1960)].

$$(2.109) \quad \hat{c}_{x_{j+1}} + 4 \hat{c}_{x_j} + \hat{c}_{x_{j-1}} - \frac{3}{h} (c_{j+1} - c_{j-1}) + \frac{1}{30} h^4 \frac{\partial^5 c}{\partial x^5} + \dots = 0$$

$$(2.110) \quad \hat{c}_{xx_{j+1}} + 10 \hat{c}_{xx_j} + \hat{c}_{xx_{j-1}} - \frac{12}{h^2} (c_{j+1} + c_{j-1} - 2c_j) + \frac{1}{20} h^4 \frac{\partial^6 c}{\partial x^6} + \dots = 0.$$

De telles approximations, dites hermitiennes, sont implicites parce qu'il faut résoudre des systèmes d'équations linéaires pour obtenir les solutions \hat{c}_{x_j} , \hat{c}_{xx_j} aux points j de la grille. On les appelle également compactes, car, à précision égale, elles ne font intervenir que trois noeuds ($j+1, j, j-1$) au lieu de cinq pour l'expression de chaque dérivée. Des systèmes tels que (2.109) et (2.110) sont tridiagonaux, donc extrêmement simples à résoudre. Pour obtenir des méthodes compactes explicites, il suffit d'introduire les solutions

de (2.109) et (2.110) dans une forme discrète de (2.108); par exemple

$$(2.111) \quad \frac{1}{\Delta t} (c_j^{n+1} - c_j^n) = (-V \hat{c}_{x_j}^n + D \hat{c}_{xx_j}^n)$$

ou un schéma plus élaboré pour améliorer la précision temporelle; malheureusement, les conditions de stabilité qui affectent de tels schémas sont très strictes [R. Hirsch (1975)].

Pour obtenir des schémas compacts implicites, il faut introduire les solutions de (2.109) et (2.110) au temps $n \Delta t$; il reste à déterminer \hat{c}_{x_j} et \hat{c}_{xx_j} au temps $(n+1) \Delta t$. Ainsi, soit le schéma du type Crank-Nicholson :

$$(2.112) \quad \frac{2}{\Delta t} (c_j^{n+1} - c_j^n) = -V (\hat{c}_{x_j}^{n+1} + \hat{c}_{x_j}^n) + D (\hat{c}_{xx_j}^{n+1} + \hat{c}_{xx_j}^n)$$

dans cette équation, les c_j^n , $\hat{c}_{x_j}^n$ et $\hat{c}_{xx_j}^n$ sont connus. En chaque point j , il reste trois inconnues \hat{c}_j^{n+1} , $\hat{c}_{x_j}^{n+1}$, $\hat{c}_{xx_j}^{n+1}$. Comme sur une grille de m intervalles ($m+1$ points), on peut écrire $m-1$ équations (2.112), à $3(m+1)$ inconnues; en ajoutant $m-1$ équations (2.109) et $m-1$ équations (2.110) prises au temps $(n+1) \Delta t$, on dispose de $3(m-1)$ équations à $3(m+1)$ inconnues; les six inconnues restantes sont à déterminer à l'aide des conditions aux limites; on reviendra plus loin sur ce problème, qu'on supposera provisoirement résolu.

Il faut remarquer dès à présent que le système (2.112) combiné avec (2.109) et (2.110) exprimées en $(n+1) \Delta t$ est un système tri-diagonal; en effet,

$$(2.113) \quad - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \frac{3}{h} & -1 & 0 \\ \frac{12}{h^2} & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ \hat{c}_x \\ \hat{c}_{xx} \end{pmatrix}_{j+1}^{n+1} + \begin{pmatrix} \frac{2}{\Delta t} & V & -D \\ 0 & 4 & 0 \\ \frac{24}{h^2} & 0 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ \hat{c}_x \\ \hat{c}_{xx} \end{pmatrix}_j^{n+1}$$

$$- \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -\frac{3}{h} & -1 & 0 \\ \frac{12}{h^2} & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ \hat{c}_x \\ \hat{c}_{xx} \end{pmatrix}_{j-1}^{n+1} = \begin{pmatrix} d_j \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

où
$$d_j = \frac{2}{\Delta t} c_j^n - V \hat{c}_{x_j}^n + D \hat{c}_{xx_j}^n .$$

L'équation (2.113) peut s'écrire sous la forme matricielle, en posant

$$U_j = \begin{pmatrix} c \\ \hat{c}_x \\ \hat{c}_{xx} \end{pmatrix}_j^{n+1}$$

$$- A_j U_{j+1} + B_j U_j - C_j U_{j-1} = D_j$$

qui a pour solution

$$(2.115) \quad E_j = (B_j - C_j E_{j-1})^{-1} A_j \quad \left. \vphantom{E_j} \right\} j = 2, \dots, m$$

$$(2.115') \quad F_j = (B_j - C_j E_{j-1})^{-1} (D_j + C_j F_{j-1})$$

$$(2.115'') \quad U_j = E_j U_{j+1} + F_j \quad j = m-1, \dots, 1$$

Les c_j^{n+1} , $\hat{c}_{x_j}^{n+1}$, $\hat{c}_{xx_j}^{n+1}$ fournis par ces équations approchent la solution exacte avec une précision $O(\Delta t^2 + h^4)$; ici, c'est surtout la très bonne précision spatiale qui est intéressante.

18.- Elimination de la dérivée seconde

Bien que (2.114) soit tridiagonal, sa résolution reste assez lourde, car il faut inverser des matrices $(B_j - C_j E_{j-1})$ de 3×3 . Il est possible de réduire la dimension du système à résoudre sans perdre de précision ni détruire sa nature tridiagonale, en éliminant les $\hat{c}_{xx_j}^{n+1}$ de l'équation (2.112), à l'aide de relations hermitiennes, en fonction des c_j^{n+1} et $\hat{c}_{x_j}^{n+1}$; on pourrait bien entendu éliminer les \hat{c}_{x_j} au lieu des \hat{c}_{xx_j} , mais la première solution est de loin la plus intéressante parce que :

i) en général, les dérivées secondes n'apparaissent pas dans les conditions aux limites;

ii) dans le problème ici traité, les termes en dérivées premières sont dominants;

iii) les dérivées premières peuvent facilement être utilisées pour calculer une approximation très précise de la dérivée croisée.

L'élimination de la dérivée seconde proposée par l'auteur [Adam (1975)], est la différence essentielle entre ces travaux et ceux d'autres auteurs [*e.g.* R. Hirsch (1975)].

L'élimination peut se faire de deux façons :

i) Elimination implicite : on écrit l'équation (2.112) aux points $j, j+1, j-1$, et on construit une combinaison linéaire de ces équations identiques au premier terme de l'équation (2.110); on obtient donc

$$\begin{aligned}
 (2.116) \quad & \frac{2}{\Delta t} (c_{j+1}^{n+1} + 10 c_j^{n+1} + c_{j-1}^{n+1}) + V (\hat{c}_{x_{j+1}}^{n+1} + 10 \hat{c}_{x_j}^{n+1} + \hat{c}_{x_{j-1}}^{n+1}) \\
 & - \frac{12 D}{h^2} (c_{j+1}^{n+1} - 2 c_j^{n+1} + c_{j-1}^{n+1}) \\
 & = \frac{2}{\Delta t} (c_{j+1}^n + 10 c_j^n + c_{j-1}^n) - V (\hat{c}_{x_{j+1}}^n + 10 \hat{c}_{x_j}^n + \hat{c}_{x_{j-1}}^n) \\
 & + \frac{12 D}{h^2} (c_{j+1}^n - 2 c_j^n + c_{j-1}^n) .
 \end{aligned}$$

Il ne reste donc que les deux inconnues c_j^{n+1} et $\hat{c}_{x_j}^{n+1}$; il suffit de coupler l'équation (2.109) à (2.116) pour obtenir un système tel que (2.114) mais où les matrices A_j, B_j, C_j, U_j sont de dimension 2; la résolution à l'aide des équations (2.115) est donc nettement plus rapide; elle permet une approximation de l'opérateur de diffusion aussi précise qu'avec les équations complètes (2.113).

ii) Elimination explicite : on peut très simplement "éliminer" \hat{c}_{xx_j} à l'aide de

$$(2.117) \quad \hat{c}_{xx_j} = \frac{2}{h^2} (c_{j+1} - 2 c_j + c_{j-1}) - \frac{1}{2h} (\hat{c}_{x_{j+1}} - \hat{c}_{x_{j-1}}) + O(h^4)$$

Cette dernière élimination a été proposée par Adam (1977).

L'élimination implicite est plus précise que l'élimination explicite pour l'approximation de la dérivée seconde; en effet, si on suppose que l'erreur sur \hat{c}_{xx_j} est uniformément distribuée en tous les points j , (2.110) donne

$$\hat{c}_{xx_j} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \Big|_j - \frac{1}{240} h^4 \frac{\partial^5 c}{\partial x^5} + \dots$$

tandis que (2.117) donne

$$\hat{c}_{xx_j} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \Big|_j + \frac{1}{120} h^4 \frac{\partial^5 c}{\partial x^5} + \dots$$

Cependant, l'élimination (2.117) est plus facile à utiliser que (2.110) en effet, lorsque D dépend de x , il faut pour éliminer $\hat{c}_{xx_j}^{n+1}$, diviser préalablement l'équation (2.112) par D , ce qui crée des difficultés numériques si, à certains endroits, D devient très petit ou nul. L'élimination explicite est donc préférable dans ce travail, car les termes en dérivées secondes sont plus petits que les termes en dérivées premières; d'autre part, l'erreur sur ces dernières ne dépend pas de l'expression des dérivées secondes.

19.- Fermeture du système d'équations

Après élimination des dérivées secondes, il reste un système de $2(m-1)$ équations à $2(m+1)$ inconnues; qu'il faut compléter à l'aide de conditions aux limites. Sous leur forme la plus générale, celles-ci s'écrivent :

$$\text{en } j = 1 : r_1 c + s_1 \frac{\partial c}{\partial x} = v_1, \text{ qui devient}$$

$$(2.118) \quad r_1 c_1 + s_1 \hat{c}_{x_1} = v_1$$

$$\text{en } j = m : r_m c + s_m \frac{\partial c}{\partial x} = v_m, \text{ qui devient}$$

$$(2.118') \quad r_m c_m + s_m \hat{c}_{x_m} = v_m.$$

Les conditions aux limites physiques ajoutent donc deux équations les équations nécessaires restantes sont fournies par des conditions additionnelles liant les valeurs des c_j et des \hat{c}_{x_j} près des frontières. Ces relations ne sont que des relations mathématiques existant, à une certaine erreur de troncature près, entre les valeurs d'une fonction et de sa dérivée première, en des points voisins. Soit donc,

$$\text{en } j = 1 :$$

$$(2.119) \quad a_3 \hat{c}_{x_3} + a_2 \hat{c}_{x_2} + a_1 \hat{c}_{x_1} - \frac{1}{h} (b_3 c_3 + b_2 c_2 + b_1 c_1) = 0$$

en $j = m$

$$(2.120) \quad a_m \hat{c}_x + a_{m-1} \hat{c}_{x_{m-1}} + a_{m-2} \hat{c}_{x_{m-2}} - \frac{1}{h} (b_m c_m + b_{m-1} c_{m-1} + b_{m-2} c_{m-2}) = 0 .$$

Les ensembles $(a_3, a_2, a_1, b_3, b_2, b_1)$ et $(a_m, a_{m-1}, a_{m-2}, b_m, b_{m-1}, b_{m-2})$ ne peuvent être l'ensemble $(1, 4, 1, 3, 0, -3)$, sinon (2.119) et (2.120) correspondraient à l'équation (2.109) pris aux points $j = 2$ et $j = m - 1$ et seraient redondantes; on est donc obligé de recourir à des relations (2.119) et (2.120) du troisième ordre de précision, car l'équation (2.109) est la seule relation qui unisse les valeurs d'une fonction et de sa dérivée première en trois points voisins avec une précision $O(h^4)$ [Collatz (1960), Adam (1975)]. Il y aura de ce fait une diminution de la précision près des frontières; cette perte de précision est acceptable dans notre cas, car :

i) Kreiss (1972) a montré, que pour des équations hyperboliques, une condition aux limites $O(h^3)$ est compatible avec une précision $O(h^4)$ avec points intérieurs; ceci est *a fortiori* valide pour des équations advecto-diffusives, où les termes de diffusion amortissent rapidement les erreurs supplémentaires introduites par les conditions aux limites;

ii) dans le problème ici traité, les valeurs aux frontières sont toujours maintenues beaucoup plus faibles que les valeurs aux points intérieurs, par la construction même de l'algorithme de simulation; en conséquence, l'erreur absolue aux frontières est très faible, même si l'erreur relative y est plus grande qu'à l'intérieur du domaine d'intégration.

On a utilisé comme relations effectives

en $j = 1$

$$(2.121) \quad 4 \hat{c}_{x_2} + 2 \hat{c}_{x_1} - \frac{1}{h} (c_3 + 4 c_2 - 5 c_1) = 0$$

en $j = m$

$$(2.121') \quad 4 \hat{c}_{x_{m-1}} + 2 \hat{c}_{x_m} - \frac{1}{h} (-c_{m-2} - 4 c_{m-1} + 5 c_m) = 0 .$$

A l'aide de ces équations, on peut former le système (2.114), car (2.121) et (2.118) permettent de calculer E_1 et F_1 , tandis que (2.121') et (2.118') fournissent

$$u_m = \begin{pmatrix} c_m \\ \hat{c}_{x_m} \end{pmatrix} .$$

20.- Caractéristiques de propagation des schémas compacts

L'augmentation de précision des schémas compacts par rapport aux schémas classiques du deuxième ordre et du quatrième ordre ne suffit pas à justifier leur utilisation pour l'intégration d'équations d'advection-diffusion si leurs caractéristiques de propagation des modes numériques ne sont pas meilleures elles aussi. On va donc calculer ces caractéristiques pour un schéma unidimensionnel similaire aux schémas précédemment étudiés afin de vérifier s'il y a une nette amélioration du comportement des modes numériques.

20.1.- Schéma de comparaison

On va bien entendu étudier un schéma du type prédicteur-correcteur puisque telle était la structure des schémas précédents, et également parce l'amélioration de la précision spatiale ne modifie en rien les raisons qui ont fait choisir une structure prédicteur-correcteur pour l'intégration des équations advecto-diffusives décrivant le comportement de polluants en mer peu profonde.

Le schéma est le suivant, pour une équation telle que (2.108)

$$(2.122) \quad \frac{2}{\Delta t} (c_j^{n+\frac{1}{2}} - c_j^n) + V (\hat{c}_{x_j}^{n+\frac{1}{2}}) - D \left[\frac{2}{h^2} (c_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} - 2 c_j^{n+\frac{1}{2}} + c_{j-1}^{n+\frac{1}{2}}) - \frac{1}{2h} (\hat{c}_{x_{j+1}}^{n+\frac{1}{2}} - \hat{c}_{x_{j-1}}^{n+\frac{1}{2}}) \right] = 0$$

$$(2.122') \quad \frac{1}{\Delta t} (c_j^{n+1} - c_j^n) = - V c_{x_j}^{n+\frac{1}{2}} + D \frac{2}{h^2} (c_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} - 2 c_j^{n+\frac{1}{2}} + c_{j-1}^{n+\frac{1}{2}}) - \frac{1}{2h} (\hat{c}_{x_{j+1}}^{n+\frac{1}{2}} - \hat{c}_{x_{j-1}}^{n+\frac{1}{2}}) = 0 .$$

Le facteur d'amplification vaut

$$(2.123) \quad \frac{\rho^{n+1}}{\rho^n} = \frac{1 - 2p \left[1 - \cos \omega h - \frac{1}{4} \varphi(\omega h) \sin \omega h \right] - iq \varphi(\omega h)}{1 + 2p \left[1 - \cos \omega h - \frac{1}{4} \varphi(\omega h) \sin \omega h \right] + iq \varphi(\omega h)}$$

où $\varphi(\omega h)$ est la transformée de Fourier de \hat{c}_x ; à l'aide de l'équation (2.108), on peut calculer que

$$\varphi(\omega h) = \frac{3 \sin \omega h}{2 + \cos \omega h}$$

Le schéma (2.122) est inconditionnellement stable.

20.2.- Amortissement des modes numériques

Comme les schémas du deuxième ordre sans diffusion numérique, les schémas du quatrième ordre, qu'ils soient classiques ou compacts, n'introduisent pas d'amortissement parasite des modes; ceci est un inconvénient dans une certaine mesure, car le mode de longueur d'onde $2h$, qui ne se propage pas, n'est pas amorti. On verra plus loin, que, contrairement à ce qui se passe dans les schémas du deuxième ordre, l'amortissement dû à la diffusion physique est suffisant pour éviter l'instabilité non-linéaire. Kreiss (1972) a fait la même constatation lors de la résolution d'un problème non-linéaire avec une méthode classique du quatrième ordre, où il suffisait d'ajouter une diffusion numérique du quatrième ordre, très faible, pour empêcher l'instabilité. Il faut noter que les conditions aux limites (2.121) introduisent une diffusion numérique du quatrième ordre qui est négligeable car très localisée.

En comparant les figures 8b et 17b, on constate que, avec ou sans diffusion physique, le schéma compact (2.122) amortit beaucoup moins les modes numériques que le schéma (2.30).

20.3.- Dispersion des modes numériques

La figure 17a montre la variation en fonction du nombre $N = \frac{L}{h}$, du rapport $\frac{V_{\omega}^*}{V_{\omega}}$. On constate une très nette amélioration par rapport au schéma (2.30) (fig. 8a), notamment pour $3 \leq N \leq 12$. Or les solutions de l'équation (2.2) présentent, dans la plupart des cas traités,

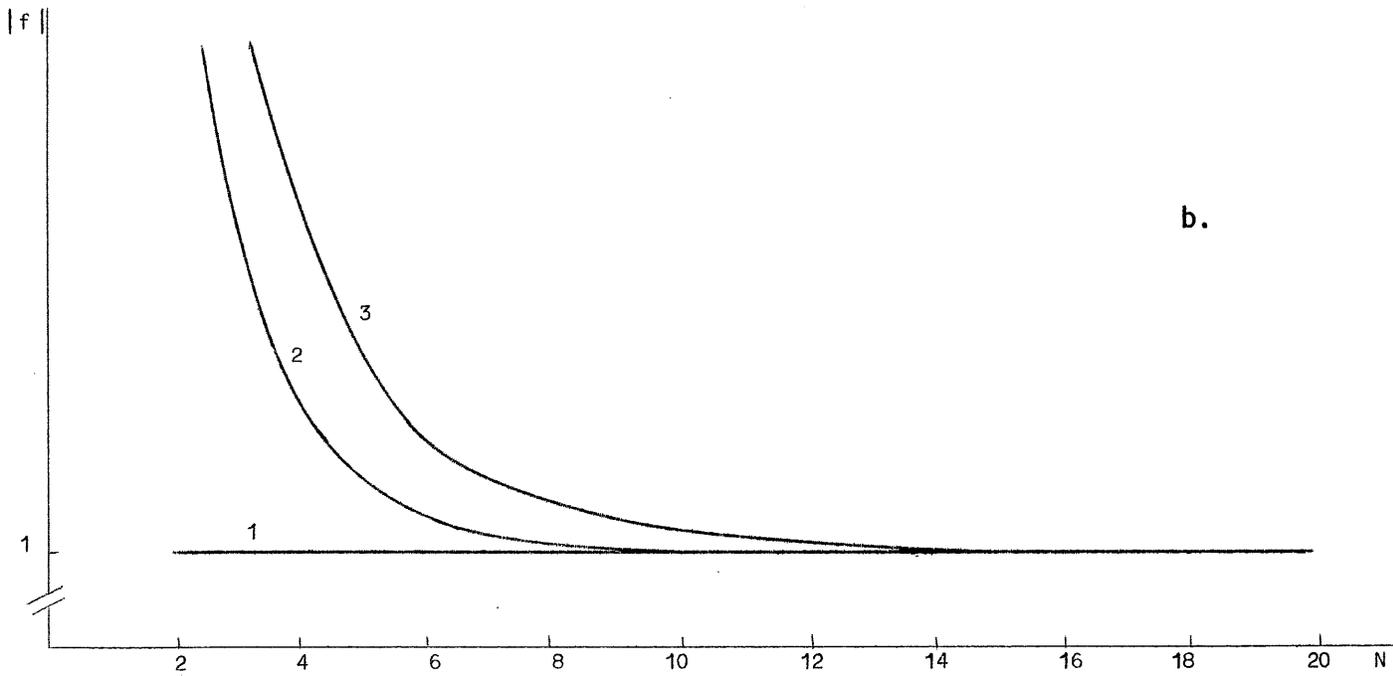
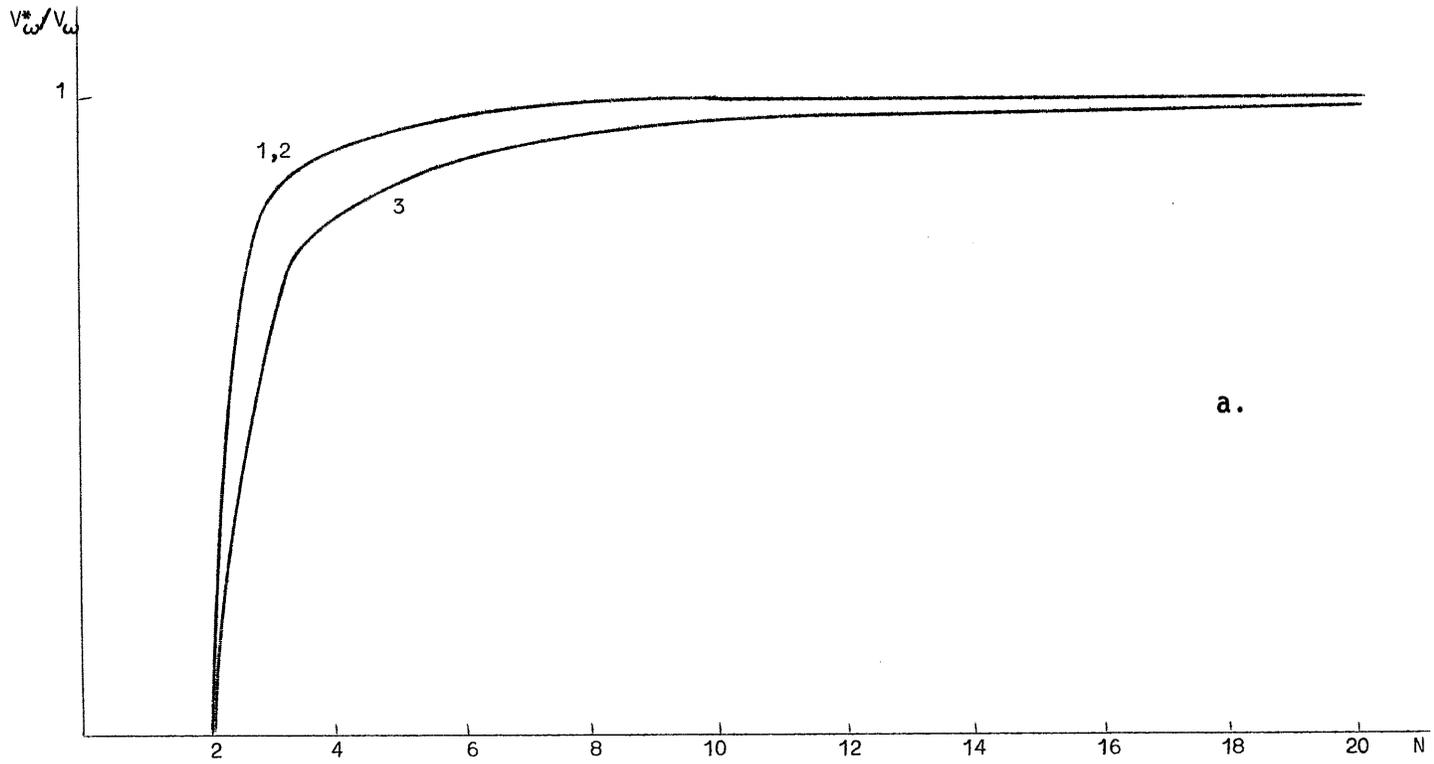


fig. 17.

Caractéristiques de propagation du schéma (2.122)

Courbe 1 : $q = \frac{1}{2}$, $R_m = \infty$

Courbe 2 : $q = \frac{1}{2}$, $R_m = 10$

Courbe 3 : $q = 1$, $R_m = 10$

une forte proportion d'harmoniques dont la longueur d'onde est comprise entre $4h$ et $12h$.

La détérioration des caractéristiques avec l'augmentation du pas temporel (courbe 3 comparée à la courbe 2) est légèrement plus importante avec le schéma compact cependant, celui-ci reste de loin supérieur. Pour le mode $N = 6$ par exemple, le déphasage $1 - \frac{V_{\omega}^*}{V_{\omega}}$ est encore trois fois plus faible que pour le schéma (2.30) dans les meilleures conditions. Pour le mode $N = 10$, il est dix fois plus faible.

Avec (2.122), la simulation peut se poursuivre beaucoup plus longtemps sans provoquer une désintégration de la solution par instabilité non-linéaire; si en outre l'équation intégrée comporte un amortissement physique, les rares modes mal représentés sont rapidement amortis.

20.4.- Influence du nombre de Reynolds de maille

Les méthodes discrètes du deuxième ordre de précision donnent des solutions mal conditionnées lorsque $R_m > 2$; ainsi [Rubin et Graves (1975a)]

- les méthodes explicites sont instables;
- les solutions fournies par les méthodes implicites présentent des oscillations marquées.

L'addition d'une diffusion numérique a essentiellement pour but de réduire R_m ; en effet, la diffusion qui y intervient est la diffusion totale, d'où, si l'on a une diffusion numérique $\tau \frac{|u| h}{2}$

$$R_m = \frac{|u| h}{D + \tau \frac{|u| h}{2}} = 2 \frac{|u| h}{2D + \tau |u| h} .$$

Lorsque

$$\frac{|u| h}{D} \rightarrow \infty , \quad R_m \rightarrow \frac{2}{\tau} .$$

Si $\tau = 1$, $R_m \leq 2$ quel que soient $|u|$ et h . Si $\tau = 0,25$ comme dans le schéma (2.26) par exemple,

$$R_m \sim 6 .$$

Les oscillations présentes dans les solutions restent cependant acceptables aux conditions déjà examinées.

Sur les méthodes du quatrième ordre, notamment les méthodes d'intégration par splines développées par Rubin et Graves (1975b), fort proches des méthodes compactes, l'influence de R_m est moins nette. Ainsi, on a testé ici des cas où R_m est compris entre 10 et 20 avec apparition d'oscillations plus faibles que pour une méthode du deuxième ordre où $R_m \sim 6$. De même, la résolution de l'équation de Burgers [Adam (1975)] est très mauvaise avec le schéma de Crank-Nicholson pour $R_m = \pi$, tandis que dans les mêmes conditions, la solution compacte ne présente pas d'oscillations.

20.5.- Comparaison avec une autre méthode du quatrième ordre

La méthode compacte présente de meilleures caractéristiques que les méthodes du deuxième ordre mais également que les méthodes classiques du quatrième ordre; soit, par exemple l'approximation du quatrième ordre

$$(2.125) \quad \frac{\partial c}{\partial x} \sim \frac{2}{3h} (c_{j+1} - c_{j-1}) - \frac{1}{12h} (c_{j+2} - c_{j-2}) + \frac{1}{30} h^4 \frac{\partial^5 c}{\partial x^5} + \dots$$

La transformation de Fourier de cette expression donne

$$(2.125') \quad \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{i}{3h} \sin \omega h (4 - \cos \omega h) c = \frac{1}{h} \varphi(\omega h) c .$$

Pour une équation sans diffusion, Kreiss (1972) montre que la différence

$$\omega - \frac{\varphi(\omega h)}{h}$$

donne le déphasage, par intervalle d'intégration pour une méthode d'intégration idéalement précise dans le temps; l'expression

$$\left[\frac{\varphi(\omega h)}{\omega h} \right]$$

est une mesure du rapport $\frac{V^* \omega}{V \omega}$ résultant exclusivement de la discrétisation spatiale.

Le tableau 5 donne les valeurs de $\left[\frac{\varphi(\omega h)}{\omega h} \right]$ pour différentes valeurs de N ; la première colonne correspond à l'expression (2.125)

Tableau 5

Variation du rapport V_m^*/V_ω en fonction de $N = L/h$ pour des schémas sans erreur de troncature temporelle. La première colonne correspond à un schéma classique du quatrième ordre, la seconde au schéma compact du quatrième ordre. On constate que ce dernier donne de meilleurs résultats, notamment pour $4 \leq N \leq 10$ ($R_m = \infty$).

N	$O(h^4)$ classique	$O(h^4)$ compacte
2	0	0
4	0,8488	0,9549
6	0,9648	0,9924
8	0,9882	0,9977
10	0,9955	0,9991
12	0,9976	0,9996
14	0,9987	0,9998
16	0,9992	0,9999
18	0,9995	0,9999
20	0,9997	0,9999

de $\phi(\omega h)$ et la deuxième colonne à l'expression (2.124). On constate que cette dernière, qui correspond à l'expression compacte de la dérivée première, donne de meilleurs résultats, notamment pour $4 \leq N \leq 10$.

Ajoutée aux autres avantages des méthodes compactes (précision supérieure, nature tridiagonale des équations de résolution, facilité de l'expression des conditions aux limites), cette meilleure représentation de la propagation des modes numériques confirme la supériorité des méthodes qui viennent d'être examinées.

21.- Possibilité d'une méthode explicite

Les méthodes prédicteur-correcteur complètement explicites du quatrième ordre, qu'elles soient classiques ou compactes, sont inconditionnellement instables.

22.- Construction du schéma d'intégration de haute précision

Puisqu'on adopte un schéma prédicteur-correcteur, il suffit d'adapter le prédicteur (2.76) et le correcteur (2.92) en tenant compte des améliorations apportées par les approximations compactes : les nouvelles expressions de $\frac{\partial \bar{r}}{\partial x_i}$ et de $\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_i^2}$, qui n'introduisent plus d'amortissement numérique et sont plus précises; il convient en outre de mettre l'accent sur la facilité avec laquelle on peut exprimer $\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1 \partial x_2}$.

En effet, si l'on connaît en tout point (i,j), l'approximation \bar{r}_{x_1} de $(\frac{\partial \bar{r}}{\partial x_1})_{i,j}$ et si l'on écrit

$$\left. \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1 \partial x_2} \right|_{i,j} = \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\frac{\partial \bar{r}}{\partial x_1} \right)_{i,j} \sim \frac{\partial}{\partial x_2} \bar{r}_{x_1}$$

on constate qu'on peut également calculer une approximation $O(h^4)$ de $\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1 \partial x_2}$ en appliquant la formule (2.109) à $\bar{r}_{x_1}|_{i,j}$

$$(2.126) \quad \bar{r}_{x_1 x_2}|_{i,j+1} + 4 \bar{r}_{x_1 x_2}|_{i,j} + \bar{r}_{x_1 x_2}|_{i,j-1} - \frac{3}{h} (\bar{r}_{x_1}|_{i,j+1} - \bar{r}_{x_1}|_{i,j-1}) = 0$$

d'où l'on déduit

$$\bar{r}_{x_1 x_2}|_{i,j} = \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{1}{180} h_1^4 \frac{\partial^6 \bar{r}}{\partial x_1^5 \partial x_2} + \frac{1}{180} h_2^4 \frac{\partial^6 \bar{r}}{\partial x_1 \partial x_2^5} + \dots$$

La diffusion numérique introduite par la discrétisation de la dérivée croisée est du sixième ordre de dérivation; elle est donc très faible, et il n'est plus utile de recourir à des artifices tels que ceux utilisés pour l'approximation du deuxième ordre; par le fait même de la petitesse de la diffusion numérique, toute influence que pourrait avoir sur celle-ci l'excentricité de l'ellipse associée au tenseur de diffusion est également négligeable; on n'est donc plus gêné par le fait que

$$\Delta \rightarrow 0$$

et il n'est plus nécessaire d'effectuer une intégration K.B.M. sur les coefficients de diffusion pour éviter cette singularité. On pourra dès lors utiliser la représentation originale de l'opérateur de diffusion. On en verra plus loin les conséquences.

22.1.- Construction du prédicteur

Par analogie avec (2.76), et en tenant compte de (2.117), on a

$$(2.127) \quad \bar{r}^{n+1} + \left[\frac{\Delta t}{2} \bar{u}_1 \frac{\Delta t}{2H} \left(\frac{\gamma H^2 \bar{u}_1^2}{\bar{u}} \right)_{x_1} \right] \bar{r}_{x_1}^{n+1} - \frac{\Delta t}{2H} \frac{\gamma H^2 \bar{u}_1^2}{\bar{u}} \left(\frac{2}{h_1} \delta_1^2 \bar{r}^{n+1} - \frac{1}{2h_1} \delta_1 \bar{r}_{x_1} \right)^{n+1} = \bar{r}^n + \bar{I}^n$$

$$(2.127') \quad \bar{r}^{n+1/2} + \left[\frac{\Delta t}{2} \bar{u}_2 - \frac{\Delta t}{2H} \left(\frac{\gamma H^2 \bar{u}_2^2}{\bar{u}} \right)_{x_2} \right] \bar{r}_{x_2}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{2H} \frac{\gamma H^2 \bar{u}_2^2}{\bar{u}} \left(\frac{2}{h_2} \delta_2^2 \bar{r}^{n+1/2} - \frac{1}{2h_2} \delta_2 \bar{r}_{x_2} \right)^{n+1/2} = \bar{r}^{n+1/2}$$

où

i) $\delta_1 = \delta_1^+ + \delta_1^-$, $\delta_2 = \delta_2^+ + \delta_2^-$;

ii) les $()_{x_1}$, $()_{x_2}$ représentent les dérivées discrètes des coefficients, et les \bar{r}_{x_1} , \bar{r}_{x_2} représentent les dérivées "compactes" de \bar{r} .

Les dérivées des coefficients peuvent être calculées par l'interpolation hermitienne (2.109) mais comme les variations des coefficients sont faibles par rapport aux variations de \bar{r} et qu'en outre, ils sont obtenus par interpolation linéaire, des différences finies habituelles sont suffisantes et plus rapides.

L'introduction de $\frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1 \partial x_2}$ dans le prédicteur est source d'instabilité. Comme dans la méthode précédente, on admettra donc une légère *inconsistance* entre le prédicteur et l'équation différentielle.

22.2.- Construction du correcteur

Le correcteur, comme dans la méthode du deuxième ordre et pour les mêmes raisons, est

- totalement explicite,
- totalement *consistent* avec l'équation différentielle,

- appliqué à la forme divergentielle (ou conservative) de l'équation (2.2).

Les approximations

$$H^{n+1} \sim H^n \quad \text{et} \quad \bar{u}^{n+1} \sim \bar{u}^n$$

sont également introduites; le résultat est tout à fait similaire.

On a donc

$$\begin{aligned}
 & H^{n+1} \bar{r}^{n+1} \\
 &= H^n \bar{r}^n + \Delta t \left\{ - (H \bar{u}_1 \bar{r})_{x_1} - (H \bar{u}_2 \bar{r})_{x_2} + \frac{\gamma H^2 \bar{u}_1^2}{\bar{u}} \left[\frac{2}{h_2} \delta_{1\bar{r}}^2 - \frac{1}{2h_1} \delta_{1\bar{r}x_1} \right] \right. \\
 & \quad + \left(\frac{\gamma H^2 \bar{u}_1^2}{\bar{u}} \right)_{x_1} r_{x_1} + \frac{\gamma H^2 \bar{u}_2^2}{\bar{u}} \left[\frac{2}{h_2} \delta_{2\bar{r}}^2 - \frac{1}{2h_2} \delta_{2\bar{r}x_2} \right] \\
 & \quad + \left(\frac{\gamma H^2 \bar{u}_2^2}{\bar{u}} \right)_{x_2} r_{x_2} + \left(\frac{\gamma H^2 \bar{u}_1 \bar{u}_2}{\bar{u}} r_{x_1} \right)_{x_2} \\
 & \quad \left. + \left(\frac{\gamma h^2 \bar{u}_2 \bar{u}_1}{\bar{u}} r_{x_2} \right)_{x_1} + \bar{I} \right\}^{n+\frac{1}{2}}
 \end{aligned}
 \tag{2.127''}$$

Pour approcher les termes du type

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{H^2 \bar{u}_1^2}{\bar{u}} \frac{\partial \bar{r}}{\partial x_1} \right),$$

on aurait pu appliquer deux fois l'expression (2.109). L'analyse linéaire de la stabilité montre qu'une telle approximation est stable. Cependant, en pratique, on constate l'apparition d'une instabilité, vraisemblablement due à un couplage plus important entre les modes numériques de \bar{r} et les composantes de haute fréquence des coefficients

$$\frac{H^2 \bar{u}_1^2}{\bar{u}}$$

(même si la densité de ces composantes est faible). C'est une instabilité qu'il est impossible de prévoir à l'aide d'une analyse classique où l'on suppose tous les coefficients constants. D'autre part, deux utilisations successives de (2.109) augmenterait le coût des calculs.

23.- Précision de la méthode du quatrième ordre

Le développement en série de Taylor du schéma (2.127) est fort long, car à chaque étape il faut éliminer \bar{r}_{x_1} ou \bar{r}_{x_2} en fonction de \bar{r} par application de la formule hermitienne (2.109). L'erreur de troncature s'écrit finalement

$$(2.128) \quad e = \frac{\Delta t^2}{12} \frac{\partial^3 \bar{r}}{\partial t^3} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{H \bar{u}_1 \bar{u}_2}{\bar{u}} \frac{\partial^2 \bar{r}}{\partial x_1 \partial x_2} \right\} + O(h_1^4, h_2^4) .$$

On constate que le schéma est du premier ordre en Δt , comme on pouvait s'y attendre puisque le prédicteur n'est pas exactement *consis-*
tent. Cependant, le coefficient de ce terme est petit par rapport aux termes d'advection : le schéma complet est donc relativement bien centré dans le temps et le serait parfaitement s'il n'y avait pas de dérivées croisées. Il faut rappeler que, en général, l'erreur temporelle est beaucoup plus petite que l'erreur spatiale.

24.- Stabilité de la méthode du quatrième ordre

En posant

$$\mu_1 = + 2 \frac{\Delta t}{h_1} \frac{H \bar{u}_1^2}{\bar{u}} \left(1 - \cos \omega_1 h_1 - \frac{3 \sin^2 \omega_1 h_1}{4 (2 + \cos \omega_1 h_1)} \right)$$

$$\mu_2 = + 2 \frac{\Delta t}{h_2} \frac{H \bar{u}_2^2}{\bar{u}} \left(1 - \cos \omega_2 h_2 - \frac{3 \sin^2 \omega_2 h_2}{4 (2 + \cos \omega_2 h_2)} \right)$$

$$v_1 = + \frac{3 \Delta t \bar{u}_1}{2 h_1} \frac{\sin \omega_1 h_1}{2 + \cos \omega_1 h_1}$$

$$v_2 = + \frac{3 \Delta t \bar{u}_2}{2 h_2} \frac{\sin \omega_2 h_2}{2 + \cos \omega_2 h_2}$$

$$\mu_3 = + \frac{\Delta t}{h_1 h_2} \frac{H \bar{u}_1 \bar{u}_2}{\bar{u}} \frac{3 \sin \omega_1 h_1}{2 + \cos \omega_1 h_1} \frac{3 \sin \omega_2 h_2}{2 + \cos \omega_2 h_2} ,$$

on trouve le facteur d'amplification

$$(2.129) \quad \frac{\rho^{n+1}}{\rho^n} = \frac{(1 - iv_1 - \mu_1)(1 - iv_2 - \mu_2) - 2 \mu_3}{(1 + iv_1 + \mu_1)(1 + iv_2 + \mu_2)}$$

la condition de stabilité peut se déduire plus aisément en constatant que l'expression (2.129) est symétrique en les indices 1 et 2, et que les *extrema* de l'expression

$$\left\| \frac{\rho^{n+1}}{\rho^n} \right\|$$

sont réalisés pour

$$v_1 = v_2 = v_{\max}, \quad \mu_1 = \mu_2 = \mu_{\max},$$

c'est-à-dire pour les conditions paramétriques les plus défavorables.

Tous calculs effectués, on trouve

i) si $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = 0$ (pas de diffusion physique)

$$\left\| \frac{\rho^{n+1}}{\rho^n} \right\| = 1$$

le schéma n'est donc pas dissipatif;

ii) si $\mu_3 = 0$, $\mu_1, \mu_2 \neq 0$ (pas de dérivée croisée), $v_1, v_2 \neq 0$
le schéma est inconditionnellement stable;

iii) pour $\mu_3 \neq 0$, on trouve que l'inégalité suivante doit être vérifiée :

$$-4 \alpha_1 g(\omega h) + \alpha_3 f^2(\omega h) \leq 0$$

$$\alpha_1 = \alpha_3 = H \bar{u}_{\max}.$$

Or,

$$g(\omega h) = 1 - \cos \omega h - \frac{3}{4} \frac{\sin^2 \omega h}{2 + \cos \omega h}$$

$$f(\omega h) = \frac{3 \sin \omega h}{2 + \cos \omega h}$$

et on calcule aisément que

$$-4 g + f^2 \leq 0.$$

Le schéma est donc inconditionnellement stable dans les hypothèses précédentes.

25.- Comparaison entre les deux schémas proposés

On reviendra dans le chapitre IV, deuxième partie, sur les résultats de simulations pratiques effectuées à l'aide des deux schémas. Cependant, on peut comparer les caractéristiques générales des solutions obtenues à l'aide des équations (2.76), (2.92) et (2.127). Tout d'abord, on peut comparer sur la figure 18 les caractéristiques de propagation des schémas complets, dans les conditions où ils ont été effectivement utilisés, c'est-à-dire

$$\gamma \sim 0,5 \quad , \quad h_1 \sim 132 \text{ m} \quad , \quad \tau \sim 0,25 \quad , \quad h_2 \sim 232 \text{ m}$$

et Δt tel que

$$\frac{u_2 \Delta t}{h_2} \sim 1$$

et pour les valeurs de \bar{u}_1 et \bar{u}_2 les plus défavorables (c'est-à-dire au maximum du courant de marée), soit

$$\bar{u}_1 \sim 0,17 \text{ m/s} \quad , \quad \bar{u}_2 \sim 0,83 \text{ m/s} \quad .$$

La profondeur utilisée était environ $H \sim 45 \text{ m}$.

Dans ces conditions, on a les valeurs maximum du nombre de Reynolds de maille, dans la direction nord-sud :

i) pour la méthode du deuxième ordre, en tenant compte de la diffusion numérique

$$R_m = \frac{|u_2| h_2}{D + \tau \frac{|u_2| h_2}{2}} = \frac{0,83 \times 232}{7,8 + 24,1} \sim 6 \quad ;$$

ii) pour la méthode du quatrième ordre

$$R_m = \frac{|u_2| h_2}{\frac{\gamma H u_2^2}{\bar{u}}} = \frac{193}{18,3} \sim 10,5 \quad .$$

On constatera que, au moment où le courant est le plus violent, la diffusion est trois fois plus grande que la diffusion réelle. Cependant, on calcule facilement que, en moyenne

$$\frac{1}{T} \int_0^T \frac{|u_2| h_2}{2} dt \sim 8 \text{ m}^2/\text{s} \quad ,$$

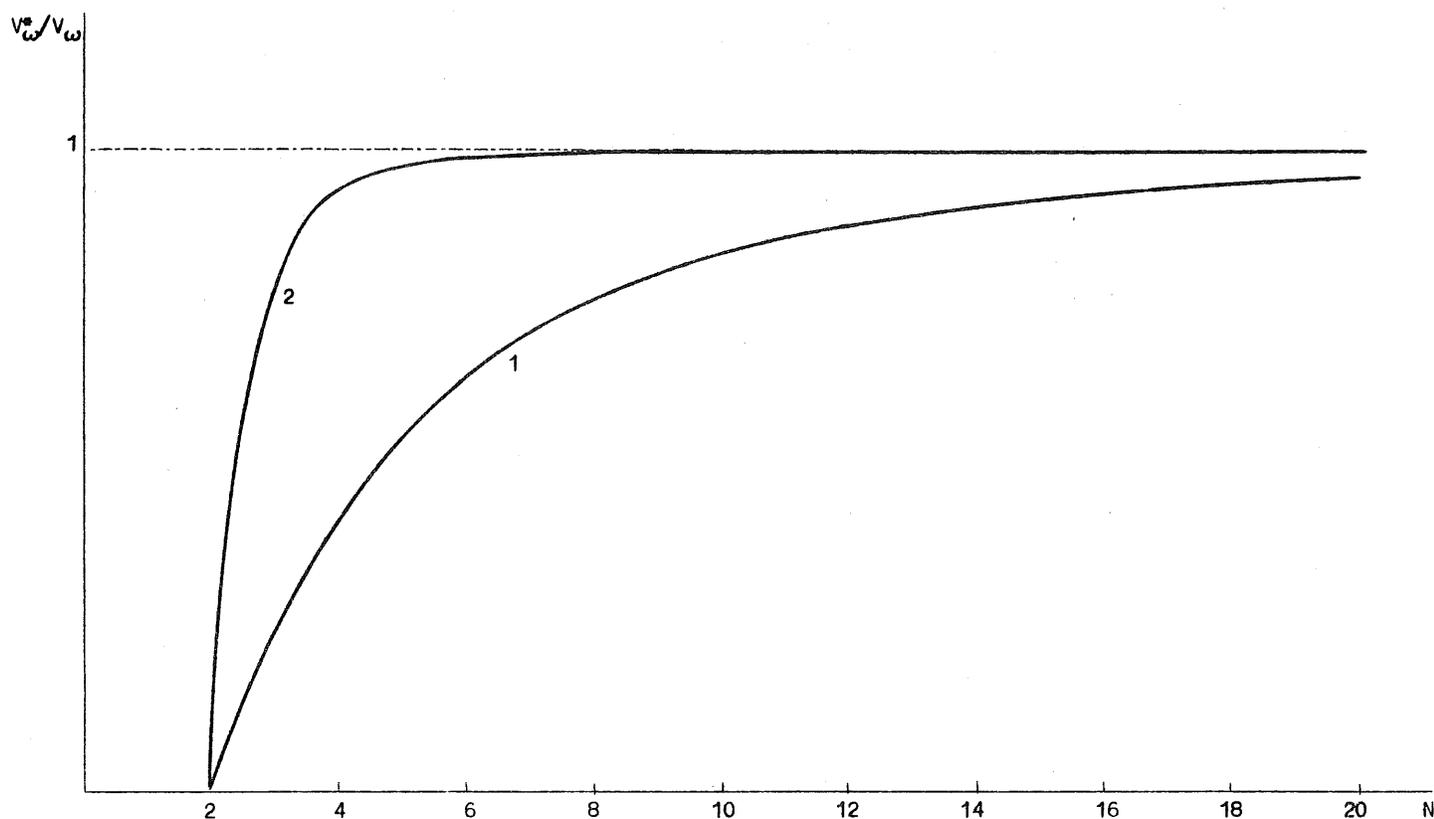


fig. 18.

Comparaison des rapports V_{ω}^*/V_{ω} dans les conditions réelles d'utilisation pour le schéma (2.76 - 2.92) (courbe 1) et le schéma (2.127) (courbe 2). La supériorité du schéma du quatrième ordre est manifeste.

c'est-à-dire que la diffusion numérique est du même ordre de grandeur que la diffusion réelle pour $\tau = 0,25$. Pour des valeurs inférieures de τ , utilisables lorsque la solution ne présente plus de gradients élevés, la diffusion totale est plus proche de la diffusion physique, mais lui est toujours supérieure.

Pour le schéma du deuxième ordre (courbe 1 de $\frac{V_{\omega}^*}{V_{\omega}}$), on remarque un très net déphasage (supérieur à 10 %) pour $N \leq 12$; heureusement, lorsque \bar{u} diminue, le déphasage diminue fort, tandis que l'amortissement ne peut descendre en dessous de sa valeur physique ; les modes mal représentés sont donc amortis et il n'y a pas de génération de modes parasites lorsque $\bar{u} < 0,10$ m/s environ ($R_m \sim 2$) ; le schéma du deuxième ordre ne représente valablement la solution que parce que

l'advection a un caractère périodique, qui évite l'accumulation des oscillations parasites et la dispersion continue des modes numériques; malgré la mauvaise représentation des modes numériques qu'elle engendre, la méthode du deuxième ordre donnera des résultats satisfaisants lors de l'intégration de l'équation de dispersion sous l'effet du courant périodique de marée.

Chapitre III

Description des algorithmes de simulation

1.- Problèmes posés par l'imposition de conditions aux limites

La simulation de la dispersion de polluants issus de déversements est en fait un problème différentiel aux conditions initiales; on voit mal en effet quelles conditions aux limites pourraient être imposées, en pleine mer, aux concentrations de polluants intégrées sur la profondeur : il n'y a pas de côtes pour imposer une annulation du flux de polluants, ni de frontières de quelque type que ce soit absorbant les polluants, de sorte qu'on ne peut nulle part annuler les concentrations. Or, pour des raisons pratiques exposées au chapitre II, deuxième partie, la résolution numérique d'équations aux dérivées partielles du type précédemment décrit exige la connaissance de conditions aux limites de la grille d'intégration.

Les conditions aux limites que l'on peut imposer (sous les réserves faites précédemment) sont de trois types ($\bar{r}_a|_{\Gamma}$ désignant la valeur d'une variable d'état le long de la frontière du domaine d'intégration)

- condition de Dirichlet

$$(3.1) \quad \bar{r}_a|_{\Gamma} = f(\Gamma) \quad (\text{concentration imposée});$$

- condition de Neumann

$$(3.2) \quad \left. \frac{\partial \bar{r}_a}{\partial n} \right|_{\Gamma} = g(\Gamma) \quad (\text{flux imposé});$$

- condition de Fourier

$$(3.3) \quad \mu \left. \frac{\partial \bar{r}_a}{\partial n} \right|_{\Gamma} + \nu \bar{r}_a|_{\Gamma} = h(\Gamma) .$$

La condition de Neumann est une condition typique de phénomènes de parois

(par exemple, côtes dans le cas qui nous concerne) où une valeur du flux d'une variable d'état peut être imposée. Elle n'est pas applicable ici puisque nous excluons explicitement l'étude des rejets côtiers. D'autre part, on ne voit pas, dans ce problème, quel phénomène physique pourrait permettre l'écriture d'une condition de Fourier; cependant, ce peut être une formulation mathématique permettant d'imposer une condition à des endroits de la frontière où, du fait du type de l'équation et de la direction du vecteur vitesse, il n'est pas possible d'imposer la valeur des variables d'état (voir chapitre II, deuxième partie).

Sur la partie de la frontière où la condition de Fourier décrite au chapitre II, deuxième partie, n'est pas applicable, on imposera

$$\bar{r}_a|_{\Gamma} = f(\Gamma) .$$

Le problème est de définir une frontière raisonnable. La frontière 'naturelle' pour ce genre de phénomène est une circonférence de rayon infini; en effet, à une distance très grande du point de déversement, et à un temps fini après celui-ci, les polluants issus du déversement n'exercent pas d'influence : les valeurs des variables d'état représentant les polluants ajoutés par le rejet sont donc nulles et celles des variables d'état représentant des composantes du système naturel (par exemple, la concentration en ions H^+ , la teneur en oxygène dissous) sont les valeurs moyennes à l'endroit considéré en dehors de tout déversement. Il faut convenir dès à présent que les valeurs des variables d'état qui interviennent dans les calculs sont les différences entre les valeurs réelles et les valeurs moyennes en dehors de toute pollution due au rejet lui-même (mais établie en tenant compte de l'état réel de la mer, c'est-à-dire éventuellement pollué pour d'autres raisons).

On écrira les équations pour les concentrations

$$(3.4) \quad \bar{r}'_a = \bar{r}_a - \bar{r}_a^m$$

et on laissera tomber les indices supérieurs. Ainsi l'état 'non pollué par le rejet' sera décrit par un ensemble de variables identiquement nulles. Il n'est évidemment pas possible d'utiliser une grille d'intégration tellement étendue que sa frontière puisse être considérée comme

infinie, comme nous allons le montrer. Les grilles seront donc en pratique restreintes.

2.- Critères de choix des intervalles spatiaux pour l'intégration numérique

Dans les premières heures qui suivent un déversement ponctuel on peut montrer que la forme de la tache de polluant passif (soumis uniquement à l'advection et à la diffusion) est une ellipse (voir chapitre I, première partie) dont les axes ont quelques centaines de mètres de longueur. Soit pour fixer les idées, un instant $t_1 = \frac{1}{2}$ période de marée après la fin du déversement. Définissons la tache de polluant comme la surface englobant les concentrations supérieures à $\frac{1}{100}$ de la concentration maximum. Dans des conditions de diffusivité caractéristiques de la mer du Nord, l'ellipse a un grand axe d'environ 1700 à 1800 m et un petit axe d'environ 200 à 300 m. Si l'on veut approcher les gradients de concentrations avec un minimum de précision, il faut dans ce cas, un pas spatial de l'ordre de 200 m au plus. Sachant que pendant cette période, le déplacement de l'ensemble de la tache a été d'environ 7200 m, et qu'il a pu s'effectuer dans un sens ou dans l'autre et dans à peu près n'importe quelle direction, on calcule que dans chaque direction il faut au minimum 40 intervalles à partir du point central, c'est-à-dire des grilles d'au moins $80 \times 80 = 6400$ points. Si l'on tient compte de l'existence de courants résiduels qui font qu'à l'issue d'une période de marée, la concentration maximum ne revient pas exactement à l'endroit où elle se situait au début de la période, mais est déplacée de manière non négligeable (pour un courant résiduel de 0,05 m/s relativement fréquent dans le Southern Bight, le déplacement est d'environ 2500 m/période de marée), on constate que le nombre de points nécessaires pour effectuer une intégration avec un minimum de précision pendant plusieurs périodes de marée, devient rapidement prohibitif. En effet, non seulement le nombre de points où l'on doit effectuer les calculs est très grand, ce qui impose une occupation considérable de la mémoire centrale surtout si les variables d'état sont nombreuses, mais

encore beaucoup de temps de calcul est perdu à intégrer les équations en des points inutiles qui sont trop éloignés du centre de la tache et où les concentrations sont, la plupart du temps, trop faibles pour jouer un rôle significatif. On en déduit qu'il serait extrêmement intéressant, du point de vue du temps de calcul et de l'occupation mémoire de pouvoir poursuivre la tache de polluant à l'aide d'une grille mobile qui cernerait 'au plus près possible' le contour de la tache. On va s'attacher dans les paragraphes qui suivent à préciser ce concept de grille mobile et à examiner les conditions de réalisation pratique d'un tel algorithme.

Cependant, il faut d'abord montrer brièvement pourquoi les techniques habituelles que sont l'utilisation d'une grille fixe, la transformation de coordonnées, ou l'expression des équations de transport en variables lagrangiennes sont mal adaptées à la résolution pratique du problème en question.

i) On a déjà montré au chapitre II, deuxième partie, section 10, que l'utilisation d'un système de coordonnées en mouvement avec le centre de la tache de polluants était prohibée à cause des variations des profondeurs et des courants, ainsi que des interactions possibles entre les sédiments et la colonne d'eau.

ii) la transformation de coordonnées (*stretching*) est une technique classique pour permettre d'imposer des conditions aux limites à l'infini sur une grille d'intégration finie; il faut cependant que les gradients de la solution deviennent faibles près de cette frontière. Or, le fait que la tache de polluant se meuve au gré des courants de marée a comme conséquence que, au cours d'une période, les gradients de concentration deviennent très élevés, au moins pendant un certain temps, dans un vaste domaine; en utilisant une grille fixe associée à un nouveau système de coordonnées, on retombe sur le problème déjà évoqué d'une occupation mémoire prohibitive. En pratique, la transformation de coordonnées n'est intéressante que pour la résolution d'une équation dont la solution présente des variations importantes dans un domaine limité fixe. De plus, lorsque les coefficients sont variables, les équations se compliquent singulièrement.

iii) l'utilisation de coordonnées lagrangiennes est rendue difficile par le fait que les coefficients des équations de dispersion, variables dans l'espace et dans le temps, sont fournis par un modèle discret en coordonnées eulériennes. Les transformations de coordonnées entraîneraient des calculs fort lourds. D'autre part, à la connaissance de l'auteur, aucun chercheur travaillant dans le domaine de la résolution d'équations advecto-diffusives ne s'est encore aventuré à utiliser des coordonnées lagrangiennes.

En soi, l'idée d'utiliser une grille mobile d'intégration n'est pas nouvelle. Elle a été utilisée par Crank et Gupta [*e.g.* Crank (1975)] pour résoudre des problèmes à *frontière mobile*, tels que la fusion d'un solide ou un phénomène mixte d'absorption-diffusion. Le problème est dans ce cas de suivre une *frontière physique* (interface) où se produit un changement de phase ou une modification importante des propriétés du corps; le déplacement de la grille est alors régi par le déplacement calculé de la frontière; c'est un problème extrêmement complexe qui n'a encore été résolu que pour des équations monodimensionnelles, à coefficients constants, ne comportant pas de terme d'advection.

Le but des algorithmes à grille mobile décrits ci-après est tout autre : c'est de minimiser l'espace mémoire requis pour la description de phénomènes d'évolution, ainsi que le temps de calcul; la limite de la grille n'a rien à voir avec une frontière physique : il ne s'y passe aucune modification dans les propriétés physico-chimiques des masses d'eau; cette limite n'est qu'une commodité mathématique destinée à faciliter l'intégration d'équations paraboliques aux conditions initiales pures à l'aide de méthodes numériques inventées pour des problèmes mixtes aux conditions initiales et à valeurs aux limites.

A la connaissance de l'auteur, c'est la première fois qu'une telle technique est appliquée à l'étude d'équations bidimensionnelles, advecto-diffusives, à coefficients variables.

3.- Conditions du choix d'un algorithme de poursuite

Si l'on admet que les réactions entre les polluants et le milieu marin sont suffisamment lentes pour que l'influence du comportement initial du système soit fort petite sur le comportement ultérieur, on peut négliger l'étude de l'évolution dans les premiers instants qui suivent le déversement. Si, au contraire, l'interaction entre le milieu marin et les produits déversés est très rapide, on peut admettre en pratique que les produits déversés sont les résultats de ces réactions initiales, qui subissent alors une première dilution. Tout se passe alors comme si le seul effet ayant lieu dans ces premiers instants était une simple dilution des produits issus du déversement, sans que ces produits interagissent avec l'écosystème.

L'évolution calculée est ainsi décalée par rapport à l'évolution réelle : la situation après un temps t_1 simulée par le calcul représentera approximativement l'état du système en un temps $t_0 + t_1$, t_0 étant la durée pendant laquelle les polluants ont été dispersés dans la masse d'eau sans réagir avec les constituants de celle-ci, durée telle que la dilution réelle soit égale à la dilution utilisée pour l'initialisation de l'évolution. Or la dilution initiale est proportionnelle à la surface de la maille élémentaire de la grille d'intégration. En effet, une bonne simulation numérique exige au moins que la quantité totale d'un contaminant passif (traceur) soit une grandeur qui reste constante pendant toute la durée de la simulation, et notamment que l'intégration de la distribution initiale soit égale à la quantité déversée. En supposant que le polluant est réparti uniformément avec une concentration c_0 après un déversement instantané et ponctuel, la quantité totale Q vaut

$$(3.5) \quad Q = c_0 V$$

où V est le volume élémentaire

$$(3.5') \quad V = h_1 h_2 H .$$

Le taux de dilution initial est égal au rapport entre V et le volume déversé, par conséquent proportionnel à la surface $h_1 h_2$.

Plus la dilution initiale admise est élevée, plus grands peuvent être h_1 et h_2 , et ceci justifie l'utilisation dans certains cas de grilles grossières.

Par contre, si on ne peut pas négliger l'évolution initiale, ou, de manière moins restrictive, si on veut éviter une trop grande dilution initiale (ce qui revient à ne laisser dans l'ombre qu'une fraction de l'évolution initiale), on doit utiliser une grille plus fine. C'est le cas lorsque les réactions sont particulièrement rapides, ou que la cinétique de celles-ci dépend fortement des concentrations elles-mêmes (il en est ainsi pour nombre d'interactions chimiques et biologiques) puisque l'évolution subséquente dépend alors beaucoup plus de la partie initiale. Dans ces conditions, le recours à une grille mobile s'impose.

Il faut noter que l'hypothèse d'un taux de dilution initial nettement supérieur au taux de dilution physique effective, nécessitée par des raisons pratiques de coût de calcul et d'encombrement de la mémoire de l'ordinateur, est équivalente à la suivante : on suppose que les interactions et migrations de tout ordre sont inhibées pendant une période limitée, donc que les variables d'état sont uniquement soumises à l'advection et à la diffusion. Cette dernière hypothèse est, dans nombre de cas pratiques, relativement bien justifiée; on reviendra sur cette question lors de l'analyse de certains déversements effectifs.

4.- Introduction des paramètres hydrodynamiques dans le modèle

On a déjà précisé dans le chapitre II que les grandeurs hydrodynamiques que sont les vitesses et élévations dues à la marée (et comprenant éventuellement l'influence des tempêtes) ainsi que les diffusivités dues à l'effet de cisaillement qui découlent des premières ne sont pas des variables d'état du modèle parce qu'elles ne sont pas calculées dans le modèle : ce sont des paramètres qui y sont introduits et qui proviennent soit d'un autre modèle, soit de mesures expérimentales. On va montrer pourquoi on choisit comme données à introduire dans le modèle de dispersion, les résultats d'un modèle hydrodynamique plutôt que des mesures *in situ*.

Le but de ce modèle de dispersion est de fournir des simulations de déversements qui peuvent avoir lieu en n'importe quel endroit du Southern Bight, à n'importe quel moment de l'année, que la mer soit dans son état hydrodynamique habituel ou agitée par une tempête.

On dispose de cartes marines indiquant les valeurs (en force et direction) typiques des courants de marée en des endroits précis. Ces cartes étant conçues originellement pour faciliter la navigation et non bien entendu pour permettre l'étude de la dispersion, elles fournissent des renseignements en des endroits réputés peu sûrs ou délicats pour la navigation, qui ne sont absolument pas représentatifs de la région entourant le point de mesure. On peut également se demander dans quelle mesure on peut faire confiance aux valeurs fournies étant donné le peu de fiabilité des méthodes de mesure; en effet, la plupart ont été faites avec des moyens de fortune tels que flotteurs ou bouées dérivantes, dont la trajectoire, même en l'absence de vent est plus représentative du courant de surface que du courant moyen sur la profondeur; d'autre part, l'élévation de marée, très importante par rapport à la hauteur moyenne de la colonne d'eau en mer peu profonde, n'est généralement pas fournie; de plus la distribution des endroits où ces données sont fournies est assez irrégulière : très dense le long des côtes et près des chenaux de navigation, là où justement les déversements sont prohibés, elle devient de plus en plus éparse à mesure qu'on s'éloigne vers le large. Enfin les données sont fournies pour des époques caractéristiques (hautes eaux, basses eaux) et jamais en cas de tempête. Pour toutes ces raisons et en plus à cause de la difficulté de réaliser des interpolations sur un réseau aussi peu régulier, on a préféré les données fournies par un modèle mathématique de circulation due à la marée; ce modèle de marées a été développé par Runday (1976) et a fait l'objet d'un autre travail dans le cadre du même programme de recherches. Le modèle mathématique de circulation de marée en mer du Nord fournit vitesses et élévations de marée, dont certaines servent de conditions aux limites à un modèle plus restreint de circulation dans le Southern Bight. Ce sont les résultats de ce dernier modèle qui sont utilisés ici. Les paramètres sont fournis aux points d'un réseau régulier dont une partie est

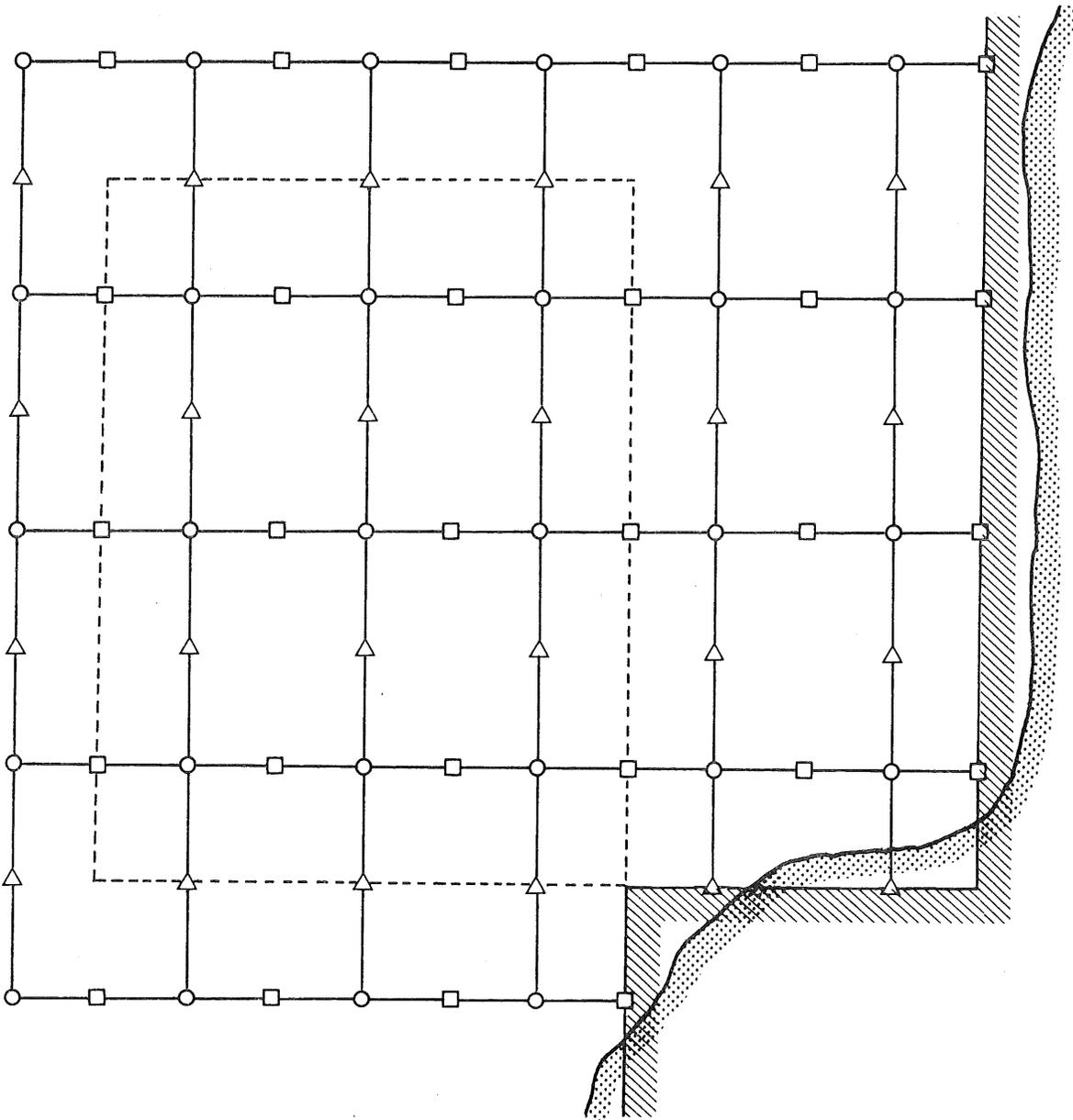
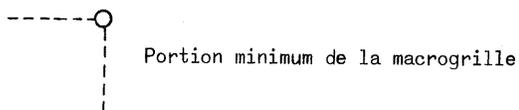
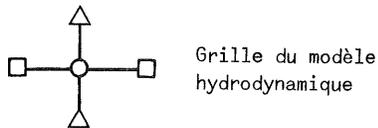


fig. 19.

Schéma de la grille du modèle numérique utilisé pour fournir les paramètres hydrodynamiques

-  Côte physique hypothétique
-  Côte du modèle hydrodynamique

- Point où l'élévation est fournie
- Point où u_1 est fournie
- △ Point où u_2 est fournie



représentée sur la figure 19. On constate que les vitesses et élévations sont calculées en des points différents (c'est une caractéristique de la méthode d'intégration numérique utilisée dans ce modèle hydrodynamique). Contrairement à ce qui est de règle pour les mesures *in situ*, les valeurs des paramètres sont représentatifs de la valeur moyenne sur une surface élémentaire du domaine d'intégration; les valeurs sont connues sur toute l'étendue de la région qui ressort à l'étude, et, à intervalles réguliers, sur toute la durée d'une période de marée.

Potentiellement, le modèle est susceptible de fournir des données représentant la superposition d'une tempête à la marée normale, à condition que soient déterminées les conditions météorologiques nécessaires au calcul de la tension due au vent à l'interface air-mer (surface libre).

La connaissance des paramètres aux points de la grille du modèle de dispersion nécessite également des interpolations, mais celles-ci sont beaucoup plus faciles à effectuer, étant donnée la régularité de la grille de départ. Le seul inconvénient dans l'utilisation des valeurs fournies par le modèle hydrodynamique est l'absence de valeurs dans le voisinage immédiat des côtes : là réside le seul avantage des mesures *in situ* sur le modèle hydrodynamique. Encore est-ce relativement illusoire, car près des côtes, la validité des approximations faites dans le chapitre II, première partie, pour réduire le nombre de dimensions spatiales dans les équations d'évolution peut être mise en question : on soupçonne en effet que la structure des profils de vitesse y est beaucoup moins régulière qu'en pleine mer; d'autre part, la présence de bancs de sable et d'une partie du littoral tantôt découverte, tantôt emoyée par le va et vient de l'eau dû à la marée, imposerait plutôt une étude tridimensionnelle qui sort du cadre de ce travail. Dès lors, il a paru raisonnable de renoncer à simuler les déversements ayant lieu trop près du littoral, puisque l'hydrodynamique de cette zone est mal connue. La dimension des mailles de la grille du modèle de marée étant d'environ 10 km (direction est-ouest) sur 14 km (direction nord-sud) et les paramètres hydrodynamiques étant peu sûrs dans une zone comprise entre la côte physique et la première série de points où ces paramètres sont complètement déterminés (trois valeurs connues en chaque groupe de

trois points, se rapporter à la figure 19), on peut estimer qu'il n'est pas possible d'effectuer des simulations dans une bande littorale s'étendant jusqu'à 5 ou 10 km de la côte physique. En ce qui concerne les déversements programmés, ceci n'est guère un inconvénient car les déversements sont interdits dans les eaux territoriales.

5.- Le concept de grille mobile d'intégration

On a vu que pour simuler un déversement effectué dans des conditions hydrodynamiques normales, il fallait étudier une région d'environ 20 km sur 40 km ; (comme généralement dans le Southern Bight, le courant résiduel a une direction générale nord-est-nord, il est raisonnable que le rectangle soit plus étendu dans la direction nord-sud que dans la direction est-ouest). En cas de tempête, ou même de vent régulier et unidirectionnel pendant plusieurs jours, le courant résiduel peut être encore plus important et il faut prévoir que la tache de polluant se déplacera dans une région plus grande encore. Supposons que l'on utilise une grille dont les mailles sont des rectangles de 500 m sur 750 m (les gradients de concentration sont en général moins élevés dans la direction nord-sud que dans la direction est-ouest, à cause de l'anisotropie marquée des coefficients de diffusion dont l'influence a été décrite dans le chapitre I, deuxième partie); pour couvrir la région la plus petite qu'on puisse imaginer pour effectuer une simulation, une telle grille comportera 1600 points; la concentration des polluants dans les premières heures de la simulation ne sera significative que sur la vingtaine de points entourant le point central où la concentration est maximum, c'est-à-dire que des calculs parfaitement inutiles sont effectués sur plus de 95 % des points de la grille; à mesure que la masse d'eau se déplace, certains points deviennent à leur tour "actifs" c'est-à-dire que la concentration des variables d'état y devient significative; la plupart des points de la grille demeurent inutiles, sans qu'on puisse *a priori* prévoir lesquels. C'est pour pallier cette mauvaise utilisation de l'espace d'intégration et donc pour diminuer

le coût de calcul, ainsi que pour permettre l'utilisation de grilles plus fines, numériquement plus précises, qu'a été développée la technique des grilles mobiles.

Définition

Une grille mobile est un *rectangle maillé* sur lequel est effectuée l'intégration numérique et dont les contours entourent 'aussi près que possible' la tache de polluant.

La notion 'aussi près que possible' doit être précisée : il faut que le nombre de points inutiles de la grille soit aussi réduit que possible, ce qui implique que les contours soient suffisamment proches du point où la concentration est maximum, tandis qu'ils doivent être suffisamment éloignés pour que la frontière de la grille puisse être considérée comme infinie.

En pratique on adoptera comme critère que la valeur maximum de la concentration d'une quelconque des variables d'état sur un contour appelé frontière intérieure, et décrit plus loin, divisée par la valeur maximum de cette variable à l'instant initial, doit être comprise entre une borne supérieure et une borne inférieure, elles-mêmes inférieures en norme à l'erreur numérique relative prévue pour la méthode d'intégration. Dès que le rapport défini n'est plus compris entre les bornes, le contour est déplacé vers l'extérieur; par contre, si le rapport, calculé sur la frontière intérieure, est compris entre ces bornes, le contour peut être déplacé vers l'intérieur du domaine (du moins si la condition est remplie pour toutes les variables); enfin, si ni l'un ni l'autre cas ne se produit, le contour reste à la même place. La situation pouvant être différente sur les quatre parties du contour, on constate que les frontières nord, sud, est et ouest du domaine d'intégration, en se déplaçant de manière différentielle pour suivre la tache de polluants, engendrent un domaine d'intégration mouvant (voir un exemple de déplacement sur la figure A.2).

Seul le cas d'une grille *rectangulaire* entourant au plus près une tache a été examiné, car le calcul de la déformation d'un domaine plus complexe, enveloppant presque exactement la tache nécessite des algorithmes

de poursuite encore plus compliqués que ceux qui ont été développés, et il est douteux que le gain de calcul complémentaire, si gain il y a, vaille la peine d'une telle sophistication. D'autre part, on comprendra plus loin, en analysant de plus près la structure des grilles mobiles, qu'une telle généralisation est extrêmement difficile.

6.- Spécification des paramètres hydrodynamiques sur une grille unique

Comme les paramètres hydrodynamiques sont fournis aux points d'une grille décalée dont la maille élémentaire vaut $10 \text{ km} \times 14 \text{ km}$ environ, que l'intégration des équations d'évolution exige des mailles dont les côtés ont au plus quelques centaines de mètres, et que les paramètres hydrodynamiques doivent être connus aux points de la grille d'intégration, il faut nécessairement interpoler.

Les concentrations variant très fort sur quelques centaines de mètres alors que les courants et élévations varient peu sur quelques kilomètres, on conçoit que l'interpolation de ces derniers paramètres n'introduit qu'une erreur faible par rapport à l'erreur de troncature inhérente à l'intégration numérique, surtout si celle-ci est effectuée sur des distributions à gradients spatiaux très élevés. De même, on pourra interpoler les valeurs des profondeurs, utilisées dans le modèle hydrodynamique, des variations subites de celles-ci, provoquées par exemple par des bancs de sable, n'étant pas prises en compte non plus dans le modèle hydrodynamique, de sorte qu'il serait illusoire d'introduire une bathygraphie plus détaillée.

Les paramètres sont donnés sur une grille dont les points sont décalés (voir figure 19).

Avant toute interpolation pour obtenir leurs valeurs sur une grille plus fine, il convient de les calculer tous sur une grille unique, dite *macro-grille*, qu'on choisit comme la grille des points-élévation du modèle hydrodynamique. La zone d'étendue minimum pour l'étude d'un déversement est une portion de la macrogrille comportant au moins trois points dans chaque direction. Or, à l'intérieur de la portion précédemment définie, il n'y a que six points où u_1 , courant

de direction ouest-est est connu, et six autres points où u_2 , courant de direction sud-nord est également connu; la portion définie est donc insuffisante pour interpoler des valeurs de u_1 et u_2 aux points-élévation, de sorte que la portion minimum utilisable de la grille du modèle hydrodynamique est la partie encadrée en pointillé sur la figure 19.

On constate également que la partie de la grille hydrodynamique comprise entre les deux cadres doit être intérieure au domaine d'investigation, c'est-à-dire la mer, ce qui justifie l'impossibilité de simulation trop près des côtes comme précisé plus haut.

En pratique, à l'aide de $k + 1$ valeurs de u_1 aux points $-u_1$, on calcule k valeurs de u_1 aux points-élévation sur la même ligne; on fait de même avec $k + 1$ points $-u_2$ sur une même colonne; on utilise une interpolation cubique pour perdre le moins de précision possible tout en gardant des formulations simples. A l'aide des formules (1.31) de u_1 , u_2 , ζ , h aux points de la macrogrille, on calcule les coefficients de diffusion en ces points. Si la méthode numérique employée l'exige, on intègre par sommation ces coefficients sur la durée d'une marée pour répondre aux exigences définies dans les chapitres et, on dispose dès lors, en chaque point de la portion de macrogrille recouvrant la zone où on étudie un déversement, de tous les paramètres hydrodynamiques nécessaires. On peut alors procéder aux interpolations nécessaires sur toute l'étendue de la zone pour obtenir une distribution fine de tous ces paramètres.

7.- Structure de la grille mobile

La grille mobile doit être définie sur une grille fixe afin qu'à tout instant, sa position et ses dimensions soient univoquement déterminées. Les frontières de la grille mobile doivent correspondre à des lignes et colonnes d'une grille fixe et celles-ci ne doivent être ni trop éloignées les unes des autres pour que les variations de configuration ne soient pas trop brutales, ni trop proches pour que ces mêmes variations ne soient pas trop fréquentes. On superpose donc à la

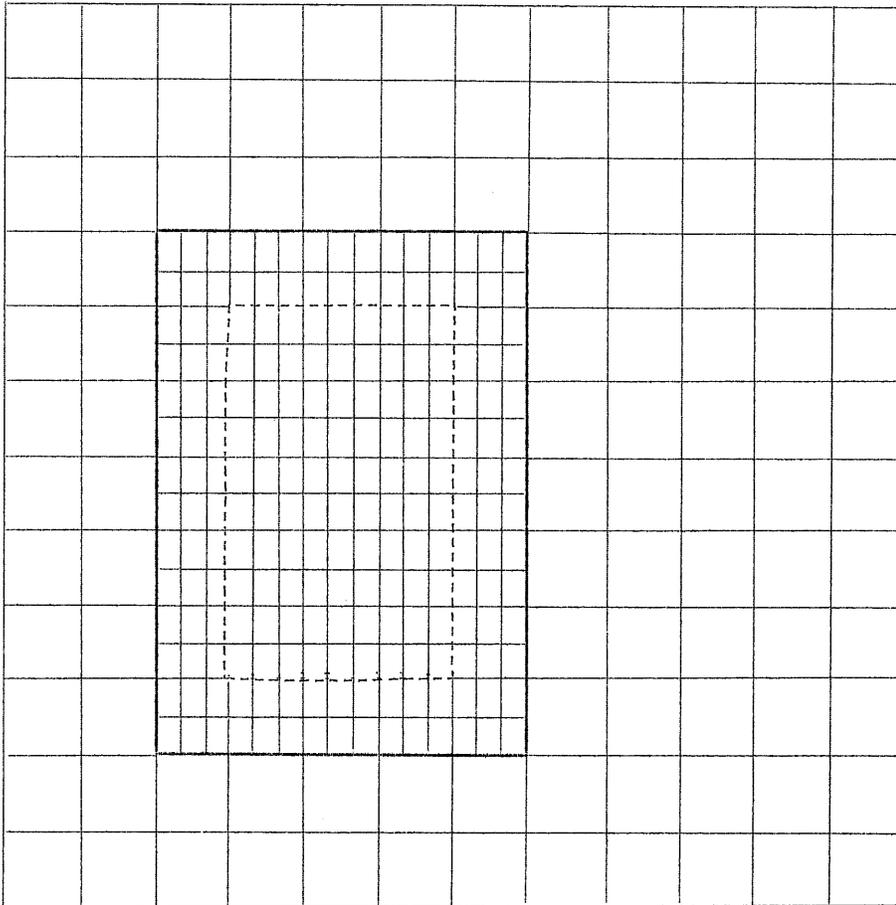


fig. 20.

Schéma de la mésogrille et d'une microgrille d'intégration

————— frontière de la microgrille

- - - - - frontière intérieure de la microgrille

portion de macrogrille définie plus haut, une *mésogrille* dont le maillage est plus fin et dont les contours coïncident avec ceux de la macrogrille. Une portion de cette *mésogrille* sert à son tour de support *mobile* à une *microgrille* qui est la grille d'intégration proprement dite et dont le contour est aussi le contour de la portion mobile de la *mésogrille*; la *microgrille* est généralement plus fine que la *mésogrille*, mais la dimension de ses mailles peut être éventuellement la même que celles des mailles de la *mésogrille*. La figure 20 montre un exemple de *microgrille*

et la mésogrille qui lui sert de support. La mésogrille ne peut être trop fine; par contre, la microgrille peut être aussi précise que l'on veut, c'est-à-dire comporter autant de points que l'on veut pour représenter la variation des variables d'état dans la tache qu'elle est sensée entourée, dans les limites imposées par la capacité mémoire de l'ordinateur.

Il faut insister dès à présent sur le fait que la microgrille est la grille d'intégration et que les algorithmes d'intégration proprement dits (algorithme de prédiction, de correction, de calcul des interactions) ne connaissent que cette grille-là, c'est-à-dire ne se préoccupent ni de sa position, ni de sa faculté de se déplacer; les servitudes inhérentes à la mobilité, comme le transfert de variables d'une position à l'autre, sont effectuées par un autre groupe d'algorithmes, indépendants de la méthode d'intégration.

8.- Mode de déplacement de la grille mobile

La microgrille se déplace simultanément à la portion de la mésogrille qui lui est associée, c'est-à-dire que son contour coïncide toujours après chaque déplacement exactement avec une portion de la mésogrille, sans débordement; un tel mode de déplacement facilite grandement la conception et l'écriture des algorithmes. On a dit également plus haut que le modèle hydrodynamique fournit les ensembles de paramètres à intervalles réguliers, en l'occurrence tous les $\frac{1}{30}$ de la période de la marée en mer du Nord (environ toutes les 1500 s). Comme la technique de grille mobile a été essentiellement conçue pour suivre les taches dans leurs déplacements provoqués par la marée, l'intervalle de temps séparant deux ensembles de paramètres de marée est également l'intervalle de temps naturel entre deux calculs successifs de déplacements élémentaires, puisque ces déplacements qui sont calculés à la suite d'une intégration discrète, ne peuvent être continus. Donc, chaque fois que le temps a augmenté d'un incrément ΔT égal à $\frac{1}{30}$ de période (intervalle de base), on calcule le déplacement possible de la microgrille. Ce déplacement peut être nul, mais on peut connaître sa valeur maximum.

En effet, durant un intervalle de temps ΔT , la diffusion joue peu et le déplacement du contour d'une tache est à peu près identique au déplacement du point où la concentration est maximum; ce dernier se déplace par advection essentiellement car les réactions chimiques ou biologiques ont rarement pour effet de déplacer les extrema de concentration de manière sensible; le déplacement par advection vaut au maximum

$$(3.6) \quad \Delta S = u_{\max} \Delta T ; \quad \Delta s_1 = u_{1\max} \Delta T ; \quad \Delta s_2 = u_{2\max} \Delta T .$$

On détermine ainsi la grandeur optimum des dimensions des mailles de la mésogrille. En effet, si les mailles sont plus petites, il se peut que le centre de la tache et son contour se déplacent d'une longueur supérieure au pas de la mésogrille et dans ce cas la microgrille doit "sauter" au moins de deux intervalles; comme la programmation d'un tel saut est beaucoup plus compliquée que celle d'un saut simple (puisque on ne sait pas *a priori* quelle sera la longueur du saut), il faut l'éviter.

Si au contraire les mailles sont beaucoup plus grandes que les dimensions optimales alors le saut ne se produira que tous les deux ou trois intervalles de temps, mais il sera plus brutal, en ce sens que le déplacement sera, en une fois, beaucoup plus grand; la vitesse de déplacement de la microgrille est alors différente de celle de la tache car la grille reste en place pendant que la tache bouge, tandis qu'elle se déplace par sauts plus longs; dans ces conditions, il est facile de concevoir qu'on ne peut serrer la tache "au plus près" et que les dimensions (le nombre de points) de la microgrille doivent être plus grandes que dans le cas optimum. Les paramètres aux points de la grille sont calculés par interpolation bilinéaire à partir de leur valeur aux points de la mésogrille.

9.- Schéma des algorithmes de poursuite

La logique des algorithmes de poursuite est décrite en appendice, de même que la structure des programmes de simulation.

Chapitre IV

Analyse de déversements

1.- But du programme de simulation

Le but du programme de simulation est de fournir des résultats quantitatifs permettant de déterminer si le déversement en un point fixé d'une quantité connue de polluants de nature à peu près quelconque mais déterminée, peut être effectué sans risquer à court terme de perturber l'équilibre local de l'écosystème.

Il faut ici rappeler les limitations qui empêchent à l'heure actuelle, de simuler avec une relative précision, le comportement spatio-temporel à long terme d'écosystèmes de grande étendue spatiale, du moins en ce qui concerne les réactions de ces écosystèmes à des perturbations localisées; ces limitations sont dues essentiellement à une connaissance encore imparfaite de l'impact physique et biochimique des polluants sur les systèmes naturels, et secondairement à des problèmes liés à l'intégration numérique des équations d'évolution régissant les variables d'état.

Même à court terme et dans une zone d'étendue limitée, les équations, écrites au chapitre I, première partie, intégrées à l'aide des techniques numériques exposées au chapitre II, deuxième partie, ces dernières étant simulées par les algorithmes développés au chapitre III, deuxième partie, ne peuvent rendre compte de la dispersion de n'importe quels polluants, dans n'importe quelles conditions.

1) On se rappelle qu'au chapitre I, première partie, dans le but de simplifier les équations, on a supposé que, par suite de l'intense dispersion due à la turbulence, la concentration d'une variable d'état

était suffisamment homogène sur toute la hauteur de la colonne d'eau pour qu'on puisse l'approcher sans grande erreur par une concentration moyenne, et de la sorte réduire le nombre de dimensions spatiales. Cette simplification qui supprime les problèmes considérables posés par la résolution numérique d'équations tridimensionnelles, empêche évidemment de rendre compte de phénomènes où la variation des propriétés et des concentrations avec la troisième dimension (la profondeur) est importante.

2) Une autre contrainte doit être prise en considération : le temps nécessaire à la réalisation d'une simulation. En effet, l'analyse des comportements possibles des produits déversés ainsi que l'interprétation des résultats fournis par l'ordinateur prend trop de temps pour que des déversements 'accidentels' puissent être étudiés.

Par contre, les déversements de déchets industriels sont programmés à long-terme et répétitifs. Leur étude ne doit pas respecter des contraintes temporelles aussi draconiennes que la simulation d'accidents; on peut se contenter d'étudier des comportements habituels, régis par les phénomènes hydrodynamiques représentatifs d'un état moyen de la mer, quitte à simuler si besoin en est occasionnellement, l'un ou l'autre comportement extrême pour déterminer les limites de validité des prévisions; les déversements industriels ne provoquent que rarement des phénomènes de surface qui exigent une étude tridimensionnelle.

Par conséquent, les équations et leurs méthodes d'intégration présentées dans ce travail sont parfaitement adaptées et peuvent servir de base à des programmes de simulation adéquats pour décrire, et prédire, le comportement des pollutions qui résultent de tels déversements.

2.- Procédure générale d'une simulation

Avant d'exposer la façon dont est analysé et simulé un déversement, il est bon de décrire la procédure suivant laquelle les demandes d'analyse sont introduites et examinées.

Les déversements en mer sont composés de résidus, de déchets, issus de la fabrication de produits variés et nous en donnerons quelques

exemples plus loin. Il appartient à l'entreprise qui désire se défaire de tels sous-produits d'introduire une demande d'autorisation de déversement en mer. Ces demandes sont introduites auprès du Département des Communications, Administration de la Marine et de la Navigation intérieure qui est l'autorité chargée de l'application des conventions internationales touchant les eaux de mer et qui à ce titre examine les demandes et délivre les permis assortis des conditions dans lesquelles celui-ci peut être octroyé.

Dans l'exécution de cette tâche, cette administration consulte les départements concernés par la matière (agriculture, santé publique, affaires économiques, etc.).

Au cours de l'exécution du premier programme national R-D sur l'environnement (eau) et pendant l'exécution des mesures conservatoires relatives au modèle mathématique de la mer du Nord, les Services de Programmation de la Politique scientifique recevaient cette demande d'avis. La direction opérationnelle interrogeait les responsables du modèle et en particulier son coordonnateur scientifique général. Au sein des équipes ayant oeuvré et oeuvrant au modèle mathématique de la mer du Nord, c'est une équipe chargée de l'analyse qui est, en fait, un sous-groupe constitué au sein des équipes du programme de recherche du projet mer qui était plus spécifiquement chargé de ce travail en accord avec les coordonnateurs de branche, chimie, biologie, etc.

L'équipe se compose essentiellement d'un analyste qui étudie le dossier, analyse le comportement possible du rejet, le simule et remet ses conclusions, aidé à chacun de ses stades par différents chercheurs dont l'avis est requis selon la spécialisation ou la compétence particulière.

Les conclusions sont alors remises à la direction opérationnelle, services de Programmation de la Politique scientifique qui présente le point de vue ainsi élaboré lors de la confrontation des avis des divers départements.

Cette procédure d'emploi du modèle mathématique de la mer dans ce cadre était valable jusqu'au 30 septembre 1976.

Le gouvernement a, à cette époque, évalué le rapport final du projet mer du premier programme national de recherche et développement sur l'environnement (eau) et a pris ses dispositions suivant les conclusions qu'il a tirées à propos du modèle mer, en l'occurrence la création de l'Unité de gestion des modèles mathématiques de la mer et de l'estuaire.

3.- Principes de l'analyse d'un déversement

Le dossier qui sert à l'étude consiste généralement en un formulaire envoyé par le ministère des communications à l'entreprise et rempli avec plus ou moins de détails par cette dernière. Un exemple de ce formulaire est donné à l'appendice II.

La première étape consiste à étudier soigneusement ce dossier et notamment à faire préciser par l'entreprise lorsque cela s'avère nécessaire, tout ce que recouvrent des vocables très généraux tels que "boues, huiles, matières organiques, etc." En effet, même si pour les besoins de la simulation et à cause de la connaissance imparfaite de la forme et de la valeur des taux d'interaction des polluants avec le milieu marin il faut se contenter d'étudier le comportement des variables d'état représentant des classes assez étendues de composés chimiques ou d'organismes biologiques, il convient néanmoins de connaître la composition de ces classes (ou compartiments) afin d'en déterminer les éléments les plus représentatifs, les plus réactifs, et éventuellement, les plus toxiques; des détails complémentaires sur la définition des variables d'état et des termes d'interaction peuvent être trouvés dans l'article de Nihoul (1972b); la connaissance de la nature des éléments principaux servira à préciser la signification des variables d'état, et à chiffrer dans la mesure du possible la vitesse des interactions de ces variables d'état avec l'écosystème. Par exemple, il est important de savoir si des matières organiques sont biodégradables ou non, si elles sont rapidement oxydées ou non, car cela influence le choix des variables d'état et indique quelles seront les réactions chimiques dominantes (ainsi l'oxygène dissous sera ou non une variable d'état selon la facilité d'oxydation des composés déversés). Il se peut également que sous un

vocabulaire général se cachent des matières toxiques ou susceptibles de le devenir, eu égard aux conditions déjà existantes (c'est-à-dire l'état initial de pollution de la zone proposée pour le déversement).

Certains produits, non toxiques en soi, comme l'urée, ou des superphosphates, peuvent être dangereux pour l'écosystème : ils contiennent en effet des nutriments (des éléments indispensables au développement du phytoplancton) qui, s'ils sont déversés en grandes quantités dans certaines zones déjà écologiquement perturbées, peuvent en aggraver la dégénérescence (la situation dans la zone 1 S serait à cet égard déjà alarmante). Bien souvent donc, il faut faire préciser par l'entreprise la nature exacte des composés. Une fois en possession de tous ces éléments, il faut s'assurer que le déversement ne perturbera pas gravement l'écosystème à court terme.

Sont évidemment interdits d'office sans qu'il soit nécessaire de procéder à une simulation, tous les déversements contenant des produits réputés toxiques, repris dans les listes adéquates de la convention d'Oslo.

Quant aux déversements ne contenant que des produits non toxiques, mais qui, du seul fait que ce sont des matières étrangères ajoutées à une zone marine qui est un système complexe, sont susceptibles de perturber le comportement de ce système, ils sont analysés plus profondément et soumis à la simulation numérique à l'aide des programmes qui ont été décrits.

4.- Choix des variables d'état du modèle de simulation

Le choix des variables dont l'évolution va décrire le comportement du système polluants-milieu récepteur est extrêmement important : de lui dépend la validité de la simulation, c'est-à-dire la capacité de cette dernière à représenter la façon dont évolue le système naturel. Les variables d'état peuvent être des polluants, des groupes de polluants (compartiments, voir chapitre II, première partie), des éléments constituant le milieu marin; il n'est en effet pas possible de simuler le

comportement de la plupart des polluants sans simuler simultanément l'évolution du milieu marin qui réagit avec ceux-ci.

Comme le nombre de variables d'état est limité à la fois par le coût des calculs et par une connaissance imparfaite du détail de toutes les interactions qui peuvent se produire dans le milieu marin, il faut donc en choisir le minimum qui puisse représenter l'évolution du système avec la validité requise par le but assigné, c'est-à-dire la détermination de l'influence perturbatrice à court terme d'un déversement de polluants; c'est d'ailleurs le principe même de toute modélisation que de limiter le nombre de variables que l'on étudie pour représenter un système complexe [Nihoul (1972b)]. Seuls donc les composants du milieu marin et du rejet dont les réactions sont rapides seront considérés comme variables d'état.

D'autre part, lorsque les réactions sont extrêmement rapides, on doit considérer comme variables d'état les produits résultants et non les produits initiaux eux-mêmes, à condition que les réactifs nécessaires aux réactions complètes soient fournis en quantité suffisante par le milieu marin local (et ne doivent être apportés dans la zone de réaction par des phénomènes de diffusion).

Ceci étant explicité, il faut mettre l'accent sur la difficulté de donner des critères généraux pour le choix des variables d'état, chaque déversement étant un cas d'espèce. On donnera plus loin quelques exemples d'analyse de déversements et on justifiera chaque fois le choix des variables d'état.

5.- Détermination des termes d'interaction

L'étape suivante de l'analyse est la détermination des termes d'interactions qui apparaissent dans les équations d'évolution (1.1). Ces termes sont des fonctions des variables d'état, et de paramètres (comme la température, la luminosité); ils dépendent de coefficients numériques que l'on peut éventuellement considérer comme des paramètres. Ainsi le terme d'interaction d'une variable d'état $\bar{\rho}_\mu$ représentant

un ensemble de composés chimiquement inertes, mais radioactifs, est un terme représentant la disparition des éléments radioactifs, de forme

$$(4.1) \quad - k_{\mu} \bar{\rho}_{\mu}$$

où k_{μ} représente un taux moyen; cette loi est approchée s'il y a plusieurs éléments radioactifs de périodes différentes, et la valeur numérique de k_{μ} dépend des périodes des éléments et de leurs proportions dans les matières déversées. Tous les cas sont loin d'être aussi simples, et, la plupart du temps, les interactions ont une formulation analytique mal connue; parfois même la valeur des taux instantanés de réaction n'est connue qu'en ordre de grandeur, quand elle est définie. L'insuffisance des connaissances au sujet de la cinétique des réactions chimiques, biochimiques ou de la dynamique de phénomènes physiques tels que la sédimentation est un handicap important dans la modélisation des déversements; cette insuffisance se marque à la fois pour les réactions entre les variables d'état qui sont des composés bien définis, et pour les variables d'état qui représentent des groupes de composés ou des populations planctoniques complètes; on sait cependant [Math. Modelsea (1976), vol. 1] que les interactions entre compartiments ont généralement une forme plus simple que les interactions entre composés ou espèces isolées.

A la connaissance de l'auteur, aucune simulation de déversements de polluants actifs et variés n'a été réalisée avant l'élaboration du travail ici décrit. Seules des simulations concernant des émissaires d'eaux usées en pleine mer ou dans des baies confinées ont été effectuées mais les seuls phénomènes pris en considération étaient l'advection et la dispersion des polluants [e.g. Leendertse (1975)]. Quelques modèles existent pour les rivières, mais le plus souvent ont pour but de simuler exclusivement l'état stationnaire de l'une ou l'autre propriété (la consommation d'oxygène par les déchets organiques, par exemple).

Le problème abordé ici est donc encore relativement neuf et peu étudié.

Cependant, il faut bien "modéliser" ces interactions, leur assigner une forme analytique définie, ainsi que préciser la valeur numérique des

coefficients qui y interviennent, car ces termes sont essentiels pour la simulation du comportement de polluants actifs. On choisit alors des formes analytiques simples, similaires à des termes apparaissant dans des réactions connues et analogues, et tenant compte des dépendances supposées des variables d'état entre elles de l'existence de seuils de réactivité, de phénomènes de saturation, etc. Encore une fois, il est difficile de définir des techniques générales pour l'écriture de termes aussi spécifiques; des exemples précis seront donnés dans les quelques analyses détaillées en fin de ce chapitre.

6.- Détermination de la position du déversement

Deux possibilités peuvent se présenter lors de l'analyse : ou bien la firme propose un point de déversement, ou bien elle demande qu'on lui en désigne un.

La notion de 'point de déversement' est par ailleurs trop restreinte; en effet, comme on le verra plus loin, un déversement est rarement ponctuel car le bateau qui l'effectue se déplace en déversant sa cargaison à la mer; il est plus correct de parler de 'zone de déversement'.

Dans le premier cas, on examine si la zone proposée est satisfaisante du point de vue de l'état hydrodynamique et écologique du système marin à cet endroit.

L'examen se fait avant et après la simulation, ainsi on sait *a priori* que dans certaines zones la dispersion par effet de cisaillement est faible [Nihoul et Runfola (1973)] et qu'il faut y éviter les pollutions concentrées; si la zone proposée n'est pas satisfaisante, on retombe sur la deuxième possibilité et le rapport d'analyse conseille une zone propice.

Théoriquement, pour déterminer une zone adéquate pour un déversement, il faudrait effectuer des simulations en une série de zones et déterminer laquelle donne les meilleurs résultats en ce qui concerne la perturbation apportée au système. Outre le fait qu'il est difficile de définir un meilleur résultat (la disparition de la perturbation peut être rapide pour une variable d'état, lente pour une autre, dans une

zone donnée, et exactement le contraire dans une zone de caractéristiques écologiques et hydrodynamiques différentes), cette méthode d'"optimisation" coûte cher. On choisit plutôt la solution suivante :

- 1) sachant que les déversements perturbent moins les zones où la capacité de dispersion est élevée, choisir une telle zone;
- 2) éviter que deux déversements de même nature ou susceptibles de réagir entre eux ne soient trop proches, ou grouper des déversements se neutralisant mutuellement;
- 3) simuler le déversement au point choisi et vérifier son comportement. Si celui-ci ne convient pas, répéter l'opération dans une autre zone.

Le critère de la capacité maximum de dispersion est généralement admis pour le choix des sites de déversement [rapport FAO (1972)] : en effet, plus grande est la diffusivité, plus rapidement les échanges se font et plus vite le système marin "neutralise" la perturbation qu'on lui impose, car les concentrations de polluants deviennent plus rapidement faibles et donc proches de ce qu'elles étaient avant le déversement, lorsque la zone était dans un état "non pollué" (au sens défini dans le chapitre III, deuxième partie).

7.- Mode de déversement

Lorsqu'on examine comment un déversement est effectivement réalisé, on constate qu'il est loin d'être ponctuel : en effet, au cours de tous les déversements qui ont été simulés par le modèle, le bateau se déplace (à vitesse maximum) tout en larguant sa cargaison. Pour augmenter le taux de dilution initial (c'est-à-dire le rapport initial entre le volume d'eau contaminée par le déversement et le volume de ce déversement), la solution (ou suspension) est injectée à l'aide de pompes dans le sillage du navire, où la diffusion due à l'agitation turbulente est très grande; le liquide déversé est quasi instantanément brassé à l'eau remuée intensément par le mouvement du bateau et la rotation de l'hélice.

Accessoirement, on peut préciser que l'éjection des pompes se fait à proximité immédiate de l'hélice.

D'autres méthodes de déversement existent :

- largage par fonds mobiles,
- pompage en abord (en dessous ou au-dessus de la ligne de flottaison).

Cependant, ces techniques entraînent une dilution initiale plus faible que la technique précédemment décrite et aident moins efficacement à la dispersion des rejets : elles sont moins recommandables.

Le taux initial de dilution annoncé par le constructeur de la barge (spécialement étudiée pour ce type de transport) est de plusieurs milliers. Une dilution initiale importante est recommandable car elle augmente le volume du réacteur dans lequel se passent les premières interactions entre l'écosystème et les polluants : plus ceux-ci sont dilués, moins ceux-ci ont d'effet brutal. Voici des exemples de taux de dilution (qui dépendent de la distance entre l'hélice et l'endroit où ils sont mesurés) estimés par le *Waterloepkundig Laboratorium* de Delft pour les barges utilisées couramment.

Distance	Taux de dilution
20 m	175
65 m	900 - 1800
110 m	1600 - 3200
200 m	2900 - 5800
290 m	4150 - 8300
380 m	5100 - 10200
560 m	6750 - 13500

Par conséquent, dans le sillage immédiat (quelques dizaines de milliers de m^3) les concentrations en polluants sont assez fortes; elles diffusent dans la zone environnante par mélange turbulent.

Il n'est pas question ici de simuler ce qui se passe dans le sillage; on admettra donc les taux fournis par les constructeurs du bateau, d'autant plus qu'en pratique, pour la simulation numérique, on

est obligé de supposer que la dilution est encore plus grande. En effet, des équations différentielles telles que (1.1) représentent l'évolution d'une concentration $\bar{r}_a(s,t)$. Lors de la discrétisation, on suppose que les valeurs discrètes représentent des valeurs moyennes de ces concentrations autour des points de la grille d'intégration. Soit donc une quantité Q de matière déversée; en supposant qu'il y a une dilution initiale telle que la concentration de la matière déversée soit homogène sur une surface élémentaire de la grille, cette concentration autour du point de déversement est

$$(4.2) \quad \frac{Q}{h_1 h_2 (h + \zeta)}$$

c'est-à-dire la matière totale divisée par le volume où l'homogénéisation est supposée complète; si la quantité Q est contenue dans un volume V d'environ 300 m^3 (contenance approximative d'une barge), et si on suppose qu'elle est entièrement et instantanément déversée au point et aussitôt homogénéisée, le taux de dilution

$$(4.3) \quad \frac{h_1 h_2 (h + \zeta)}{V} ;$$

vaut environ 7500 pour une maille de $300 \times 300 \text{ m}^2$ à un endroit où $h + \zeta \sim 25 \text{ m}$; or, une maille élémentaire aussi petite est une limite inférieure à la taille des grilles d'intégration et les déversements ont lieu sur des distances de plusieurs dizaines de km; en avançant, le bateau parcourt plusieurs dizaines de points de la grille; comme le taux de dilution augmente proportionnellement au nombre de points auxquels on effectue des rejets partiels, on conçoit que ce taux de dilution (numérique) peut être beaucoup plus élevé que le taux de dilution effectif si l'on veut simuler un tant soit peu le mode réel de déversement. A cause du coût des calculs, il n'est pas possible de raffiner les grilles au-delà de certaines limites, donc de rapprocher le taux de dilution nécessaire aux besoins de l'intégration numérique du taux de dilution effectif.

On simule donc toujours, et inexorablement dans l'état actuel des techniques, des déversements à taux de dilution initiale très élevé, qui perturbent moins la représentation du système marin que la réalité : la

perturbation simulée est toujours moins brutale que la perturbation réelle, et il faut tenir compte de ceci dans l'interprétation des résultats, car ceux-ci peuvent donner une image trop optimiste de l'impact possible du déversement.

8.- Préparation de la simulation proprement dite

Après avoir examiné le dossier, et sur cette base, déterminé :

- les variables d'état;
- les interactions;
- la position possible du déversement;
- la façon dont ce dernier est effectuée,

il faut introduire ces données dans le programme de simulation. Ce dernier comporte notamment deux sous-programmes qu'il faut modifier pour chaque simulation : l'initialisation et l'expression des interactions. Le sous-programme d'initialisation impose aux variables d'état leur valeur moyenne, c'est-à-dire zéro comme précisé au début du chapitre III, sauf si un déversement non encore dispersé a été effectué dans la même zone. Le sous-programme d'interactions est simplement l'expression en termes d'un langage de programmation des formulations des interactions découvertes lors de l'analyse du dossier. On introduit également dans ce sous-programme la manière dont le bateau se déplace et rejette son contenu, c'est-à-dire l'expression simulée du déversement lui-même, en divisant le déversement réel en rejets partiels, et en considérant ces rejets partiels comme des termes-sources instantanés.

Il faut enfin définir :

- la portion de la macrogrille qui couvre la zone à simuler (position et étendue);
- les pas 'optima' de la mésogrille;
- les pas 'optima' de la microgrille;
- la position initiale de la microgrille qui couvre la zone du déversement lui-même;
- le pas d'intégration temporelle, compte tenu des facteurs explicités au chapitre III;

- la durée totale de la simulation.

Tout au long du déversement, il faut en plus exprimer la trajectoire du bateau en termes de position instantanée dans la microgrille, ainsi que la quantité de polluants rejetés en chacun des points de la trajectoire.

9.- Présentation et analyse des résultats

Le programme de simulation fournit des résultats sous deux formes :

- des tableaux imprimés donnant à intervalles réguliers la distribution des concentrations des variables d'état;
- des tableaux stockés sur disque ou bande magnétique contenant également les valeurs des variables d'état ainsi que des données auxiliaires telles que la position et les dimensions des grilles d'intégration.

Les résultats imprimés servent surtout au contrôle du bon fonctionnement du programme. Les fichiers sur mémoire externes peuvent être exploités de diverses façons et sont notamment utilisés pour l'obtention des tracés d'isocourbes qui sont l'outil d'analyse des résultats le plus commode. A l'aide de ces tracés, on peut facilement suivre la déformation, le déplacement et les variations d'intensité des taches de polluants; on peut déterminer si les polluants sont rapidement neutralisés, si l'impact du déversement demeure localisé ou a tendance à affecter des zones de plus en plus étendues.

On précisera dans chaque exemple ce qu'on a pu déduire de la forme et de la variation des isocourbes. On peut également tirer des renseignements intéressants des courbes de variation des concentrations maximum.

10.- Avertissement

Avant de passer aux exemples d'application, il convient de faire une dernière remarque. Les demandes de simulation sont venues au fur et à mesure des demandes de déversement introduites par des firmes concernées avant même que toutes les méthodes d'intégration, que tous

les algorithmes de simulation décrits dans ce travail soient parfaitement au point; ces derniers ont été développés simultanément, à la réalisation des simulations demandées; les améliorations successives ont été apportées et même de nouveaux concepts (notamment celui des grilles mobiles) ont été développés pour contourner les difficultés rencontrées dans la pratique. Il n'y a rien d'étonnant dès lors que les programmes se soient compliqués et que les résultats soient devenus plus significatifs; les premières simulations ont été calculées sur des grilles fixes, puisque le concept de grille mobile a justement été inventé en analysant les problèmes rencontrés dans ces simulations. Tous les algorithmes décrits au chapitre III n'ont donc pas toujours été utilisés, pas plus que ne furent appliquées certaines des techniques décrites dans le présent chapitre. Ceci est simplement dû au fait que l'application pratique a toujours suivi de près les développements théoriques et les a, dans bien des cas, suscités.

L'organigramme de la figure 21 schématise toutes les opérations qui sont effectuées pour émettre un avis concernant une demande de déversement et rappelle que deux éléments de base sont indispensables à l'examen, en l'occurrence le modèle mathématique et la méthode numérique d'intégration des équations d'évolution.

11.- Déversement X1

Le tout premier déversement qui ait été soumis à l'étude par simulation est une demande de la firme X1 désirant se débarrasser de sous-produits d'une de ses usines. Ce n'était bien entendu pas le premier déversement de détritrus chimiques qui était effectué en mer : en effet certaines usines se défont de leurs déchets par cette technique depuis de nombreuses années. C'était par contre la première fois qu'une demande de déversement était introduite pour examen par les chercheurs du premier Programme national R-D sur l'Environnement (Projet Mer). A l'époque, l'organisation d'une simulation était loin d'être rodée; les modalités pratiques d'examen étaient inexistantes et le programme de simulation n'était pas encore opérationnel.

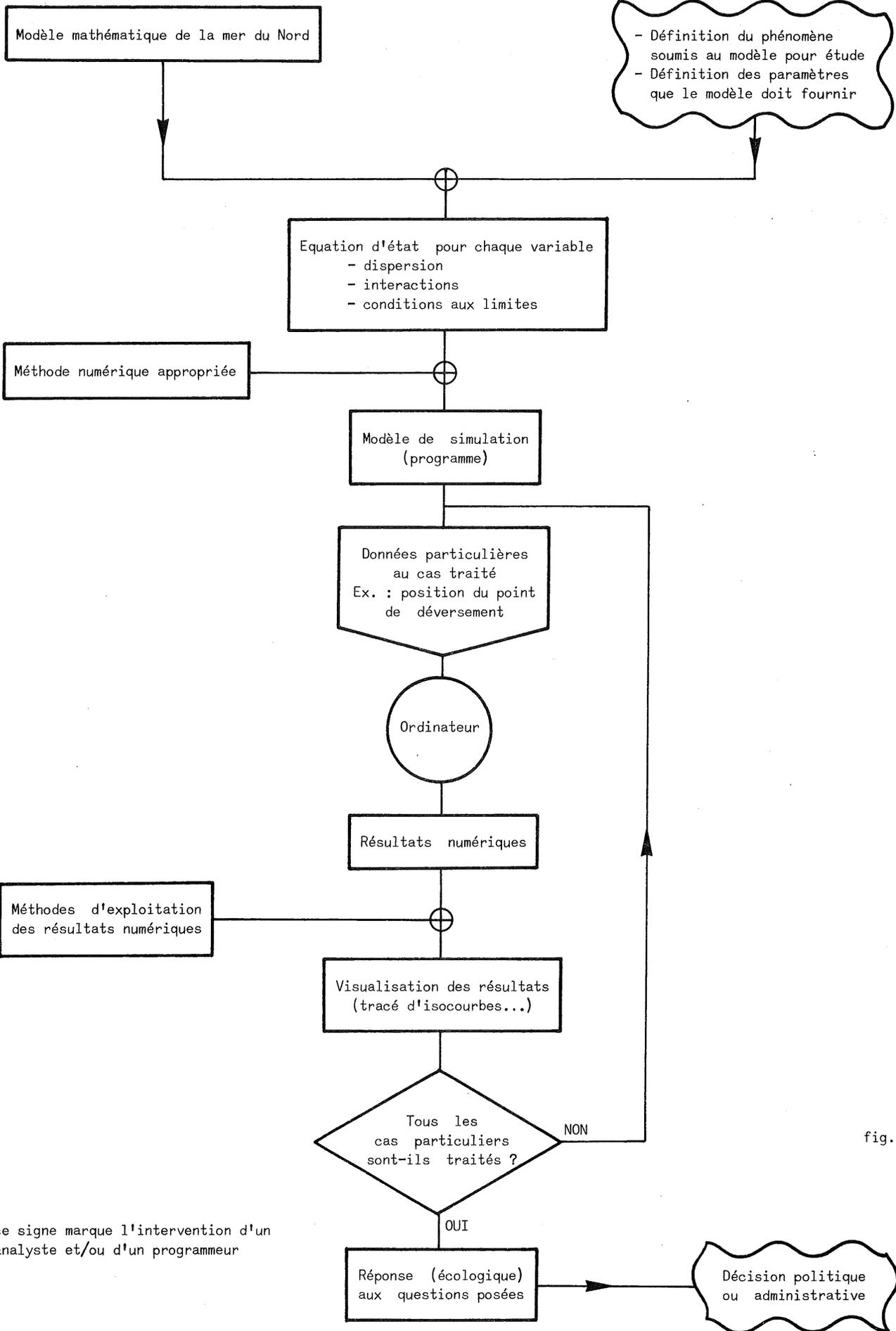


fig. 21.

Le déversement consiste en une solution de FeCl_2 (250 g/kg de solution), HCl (5 g/kg de solution); sa position envisagée est celle où est effectué déjà un déversement consistant essentiellement en acide sulfurique.

Ceci est peut-être important car le pH de l'eau de mer dans la zone peut être affecté. Celui-ci était en moyenne en 1972 dans cette zone de

$$(4.4) \quad 7,9 \pm 0,1$$

selon des mesures effectuées par Elskens (1972). La teneur en fer sous forme dissoute était à l'époque de

$$(4.5) \quad 0,92 \pm 0,39 \text{ mg/l}$$

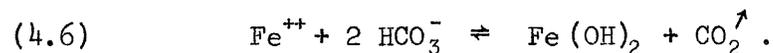
due vraisemblablement aux déversements déjà en cours (qui contiennent également des sels métalliques).

La quantité de solution à déverser est d'environ 1500 t/mois . Le mode de déversement choisi est une barge décrivant à vitesse maximum (8 noeuds) des cercles de 3 milles de diamètre, tout en rejetant les résidus par pompage dans le sillage. Le taux de dilution initial n'est pas précisé par la société. De toute façon comme on l'a déjà expliqué, le programme d'intégration numérique est obligé de démarrer avec un taux de dilution supérieur à la réalité, surtout à cette époque où les algorithmes de grille mobile n'existaient pas encore.

On va maintenant examiner le comportement possible des composés qui forment la solution déversée, et en déduire quelles variables d'état sont suffisantes pour décrire le système.

11.1.- Comportement du FeCl

La première réaction possible est



Le bicarbonate de calcium existe en abondance dans l'eau de mer ($2,7 \times 10^{-3}$ moles/l) . Comme il en faut deux moles pour 'précipiter' un atome-gramme de fer, et que la réaction est quasi instantanée, tout

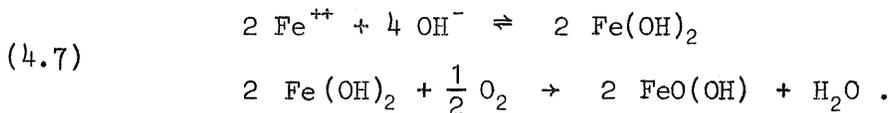
le fer déversé sera précipité si la concentration initiale est inférieure à

$$7,52 \times 10^{-2} \text{ g/l} .$$

Si le taux de dilution initiale est de 1000 (en général, dans la pratique, il est plus élevé), la concentration initiale est d'environ

$$2,5 \times 10^{-2} \text{ g/l}$$

ce qui signifie que le FeCl_2 dans l'eau de mer n'aura qu'une existence fort brève puisque dans chaque litre d'eau qui le recoit, il y a trois fois plus de HCO_3^- que nécessaire pour la réaction d'hydrolyse soit complète, c'est-à-dire que la vitesse de celle-ci n'est pas limitée par la diffusion (ce qui serait le cas si la concentration initiale était supérieure à $7,52 \times 10^{-2} \text{ g/l}$). Il semble cependant que l'hydroxyde de fer soit instable dans l'eau de mer. En principe, il devrait précipiter, mais comme la solution est initialement acide, il reste en phase dissoute et peut continuer à réagir avec les constituants du milieu marin. Un des constituants importants est l' O_2 dissous, qui, dans le Southern Bight et presque tout au long de l'année, existe en concentration proche de la saturation (et souvent la dépasse). Le milieu marin peut donc être très oxydant. La réaction d'oxydation la plus probable est



Il y a donc consommation d'oxygène et risque de déplétion dans les alentours immédiats du sillage du bateau et éventuellement dans toute la zone, suivant la quantité de FeCl_2 déversée. En admettant que tout le chlorure est transformé en hydroxyde et tout l'hydroxyde en oxyhydroxyde et que cette deuxième réaction est très rapide (plus rapide que la vitesse à laquelle la réaération et la diffusion peuvent suppléer de l'oxygène à un volume d'eau), on peut calculer que chaque déversement consomme entièrement l'oxygène d'un volume d'eau de 3 millions de m^3 ; si la concentration moyenne de l' O_2 est d'environ 8 mg/l, soit l'équivalent d'un volume correspondant à un carré de mer de 350 m de côté. Il va sans dire que toute vie animale est impossible (asphyxie) dans

une eau complètement désoxygénée. Si l'on admet une dilution initiale de 1000, le volume total du mélange polluant-eau de mer initial vaut environ 1,25 million de m³ (car la solution est de densité supérieure à 1,2) c'est-à-dire que initialement, la déplétion du volume pollué en oxygène est totale. En pratique, suivant le mode de déversement, le taux de dilution initiale est déjà de 5000 à 10000 à 400 m du bateau dans son sillage, de sorte que la déplétion en oxygène n'est jamais aussi brutale. Cependant, on constate qu'elle peut atteindre localement 25 à 50 %, et persister tant que la diffusion n'a pas rétabli la concentration habituelle. Ajouté à des effets toxiques de la variation d'acidité, ce manque d'oxygène peut avoir des conséquences sur certaines formes de vie marine. Il peut également ensuite se produire une formation de Fe₂O₃, Fe₃O₄, mais ces réactions ne consomment pas davantage d'oxygène et semblent plus lentes que celles décrites ci-dessus. L'effet de l'addition de FeCl₂ au milieu marin se marque donc d'abord par une forte consommation d'oxygène.

Le fer a en outre un effet sur la croissance des plantes et des animaux. En ce qui concerne les premières, l'effet semblerait plutôt bénéfique, surtout si le fer est rendu assimilable par complexation avec certains composés organiques; d'autre part, le taux de croissance est limité par la quantité de nutriments disponibles, ce qui atténue ou annule l'action favorable du fer ajouté, sauf si ces nutriments sont également augmentés par suite du même déversement. La croissance des animaux est plutôt inhibée par la présence d'hydroxyde de fer (boues rouges) ou d'ions ferreux et ferriques. Ainsi, avec les concentrations susceptibles d'apparaître lors du déversement, on a constaté pour une espèce de crustacé et une espèce de ver, que la moitié des individus mourraient après quelques jours au lieu de survivre plusieurs semaines. La conséquence globale de l'influence du Fe est une perturbation des chaînes trophiques.

11.2.- Comportement de HCl

L'effet de l'addition d' HCl à l'eau de mer est de faire varier localement le pH. L'effet tampon de l'eau de mer, dû à la présence d'ions

HCO_3^- , fait que cette variation est rarement brutale. La concentration en ions HCO_3^- est susceptible de neutraliser $2,94 \times 10^{-3}$ moles H^+ soit 0,107 g HCl . En tenant compte d'une dilution initiale de 1000, la concentration en HCl vaut environ 0,005 g/l nettement inférieure à la capacité tampon. Le pH variera donc peu, sauf dans la partie du sillage à proximité immédiate de l'orifice de la pompe; il est préférable qu'il en soit ainsi car les effets d'une variation de pH sur les organismes marins sont généralement extrêmement graves.

11.3.- Choix des variables d'état

Il faut évidemment choisir des variables d'état dont l'évolution donne une description cohérente du comportement du système lors du déversement, et dont l'équation d'évolution peut être écrite avec une approximation raisonnable et intégrée par l'algorithme de simulation numérique disponible.

Les variables d'état qu'on pourrait choisir pour une description complète sont :

- la concentration en O_2 dans la masse d'eau;
- la concentration en $\text{Fe}(\text{OH})_2$;
- la concentration en $\text{FeO}(\text{OH})$ car celle-ci est le stade ultime de l'évolution du Fe déversé (c'est un précipité qui sédimente);
- la concentration en $\text{FeO}(\text{OH})$ de sédiments ajoutés par le déversement;
- la concentration en ions H^+ , davantage parce qu'elle influence fortement la vitesse d'oxydation du Fe^{++} en Fe^{+++} que pour son influence directe sur le milieu marin (variation du pH).

On aurait donc cinq variables d'état possibles. Malheureusement, il faut tenir compte de deux limitations dues à l'algorithme d'intégration existant à l'époque :

- l'algorithme était fort lent à cause de l'utilisation intensive de transferts sur des mémoires externes, ce qui rendait le coût d'une simulation rapidement prohibitif;

- on ne disposait pas encore des techniques de grilles mobiles, ce qui, à cause de la taille évidemment limitée de la mémoire centrale,

empêchait de diminuer les dimensions des mailles élémentaires au-delà d'environ $1000 \times 1000 \text{ m}^2$. Dans ces conditions, et en tenant compte que le rejet n'est pas instantané, le taux de dilution initial est environ 160000 (rapport du volume déversé au volume de la masse d'eau réceptrice), ce qui est bien supérieur au taux de dilution réel; en pratique donc, tout se passe comme si la dispersion initiale était très forte; la variation initiale de pH dans le sillage ne peut pas du tout être simulée; comme elle influence fortement la vitesse de la transformation de $\text{Fe}(\text{OH})_2$ en $\text{FeO}(\text{OH})$, celle-ci ne peut non plus être simulée; par ailleurs, avec une telle dilution, c'est le $\text{FeO}(\text{OH})$ qui se forme et précipite, tout ceci revient à dire qu'on *ne simule pas* les premiers instants du déversement.

Comme il n'est pas possible dans ces conditions de distinguer les deux variables $\text{Fe}(\text{OH})_2$ et $\text{FeO}(\text{OH})$, ni de suivre l'évolution de H^+ et de O_2 , on réduit le nombre de variables d'état à deux :

- concentration du Fe sous forme particulaire dans la masse d'eau (suspension);

- concentration du Fe sous forme particulaire dans la couche limite de fonds (sédiments mobiles); cette dernière concentration est exprimée en kg/m^2 .

11.4.- Interactions entre les variables d'état

Les seules interactions possibles entre une suspension et un sédiment de même nature chimique sont la sédimentation et la remise en suspension. On tient compte de celles-ci par les formules :

$$(4.8) \quad \bar{I}_{12} = - v_{\text{séd}} \left(1 - \frac{\bar{u}^2}{u_{\text{cr}}^2}\right) \bar{\rho}_1 \quad (\text{kg/m}^3 \cdot \text{s}) ,$$

$$(4.9) \quad \bar{I}_{21} = - (h + \zeta) I_{12} \quad (\text{kg/m}^3 \cdot \text{s}) ,$$

où \bar{I}_{12} et \bar{I}_{21} représentent respectivement le taux de sédimentation de la suspension (concentration moyenne sur la hauteur de la colonne d'eau) et le taux de remise en suspension de la couche limite de fond (on suppose ici que le flux de migration vertical peut être exprimé

comme une interaction). La formulation adoptée ne prétend pas rendre compte de tous les mécanismes de ces phénomènes complexes, mais est celle qui est couramment adoptée pour les modéliser. Pour une justification plus approfondie de ces formules, on se référera au chapitre I.

Rappelons que

- \bar{u} est la norme de la vitesse moyenne dans la colonne d'eau;
- u_{cr} est une valeur critique telle que si $\bar{u} < u_{cr}$, il y a déposition, si $\bar{u} \geq u_{cr}$, il y a érosion de la couche limite;
- $v_{séd}$ est une 'vitesse de sédimentation'. Cette vitesse dépend de la taille des particules, qui elle même est fonction de la façon dont se sont déroulées la dilution des résidus et l'oxydation de l'hydroxyde. Ces phénomènes n'étant pas simulables, ni connus expérimentalement, on est obligé d'adopter une valeur moyenne déterminée en laboratoire pour la taille des particules et d'en déduire de manière plus ou moins heuristique la vitesse $v_{séd}$ [Garrels et MacKenzie (1972)]. Néanmoins, on a montré [Nihoul et Adam (1975)] lors de la simulation d'un déversement similaire que le comportement des sédiments de la couche-limite était ainsi décrit de manière satisfaisante.

11.5.- Résultats de la simulation

Les figures 22 à 29 montrent l'évolution d'une tache de turbidité (traits pleins) et d'une tache de sédiments qui lui est associée (traits pointillés). Les figures représentent l'état du système respectivement 3, 6, 9, 12, 15, 18, 21, 24 h après le début d'un déversement. La courbe étiquetée 1 est l'isocourbe "0,4 mg/m³ de turbidité additionnelle due au rejet"; la courbe étiquetée 5 est l'isocourbe "2 mg/m³". Les courbes 100 et 200 sont respectivement les isocourbes "40 et 80 mg/m² de sédiments ajoutés". On constate une diminution rapide de la quantité de matière en suspension; le dépôt de sédiments récents contenant beaucoup de Fe se produit surtout autour du point de déversement et dans une région située au nord-est de celui-ci, par suite du transport vigoureux par le courant de marée qui au moment du déversement s'écoulait dans cette direction. Il y a peu de sédimentation dans les six premières heures mais elle augmente ensuite (disparition de

fig. 2. à 8.

Simulation du déversement X_1 de matière particulaire susceptible de sédimenter et d'être remise en suspension. Les courbes en traits pleins sont les isocourbes de matière en suspension dans la colonne d'eau (respectivement $0,4 \text{ mg/m}^3$ pour la courbe 1 et 2 mg/m^3 pour la courbe 5) tandis que les courbes en traits pointillés sont les isocourbes de sédiment ajouté (respectivement 40 mg/m^2 pour la courbe 100 et 80 mg/m^2 pour la courbe 200) par le déversement.

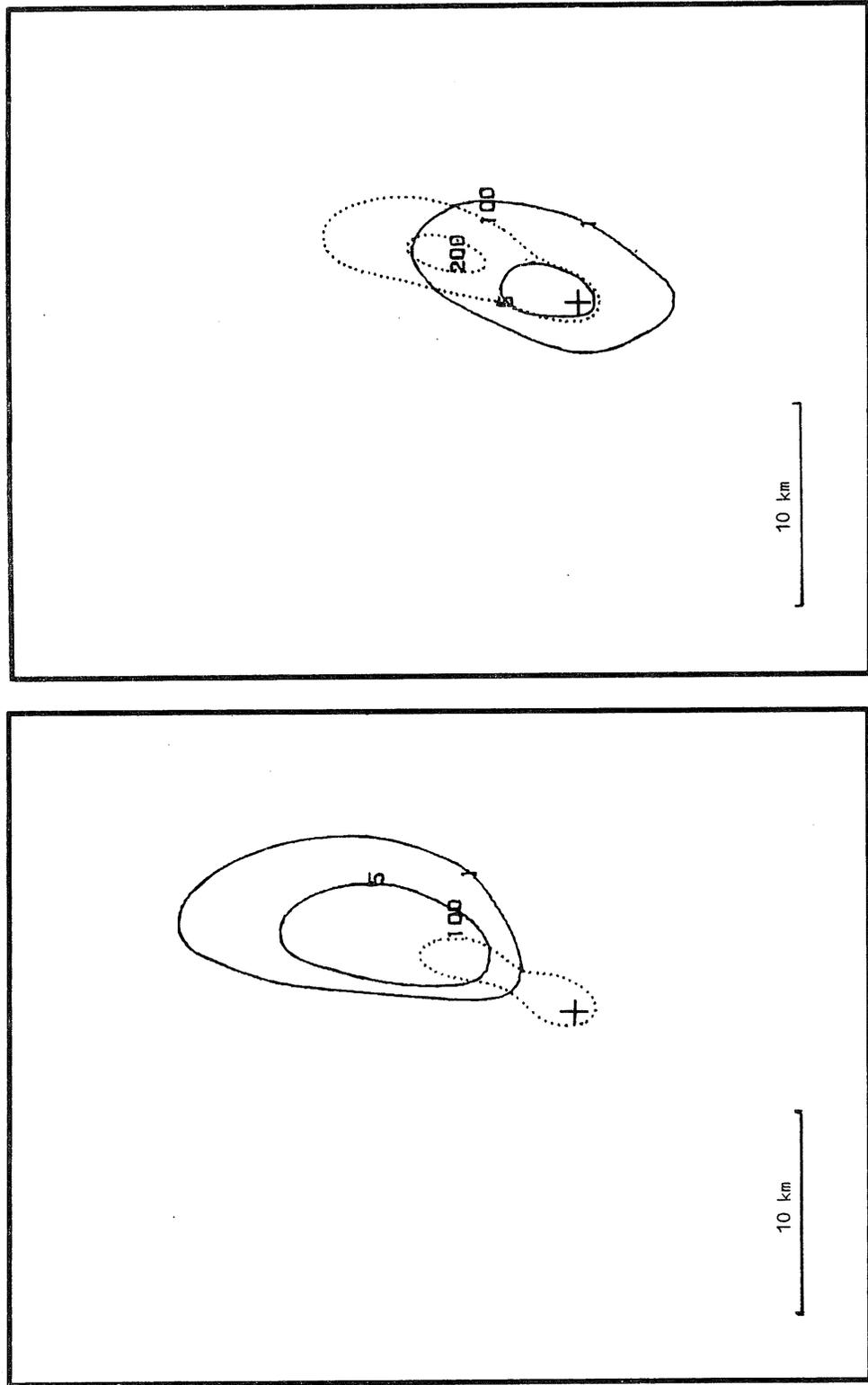


fig. 22.

Isocourbes 3 heures après le déversement

fig. 23.

Isocourbes 6 heures après le déversement

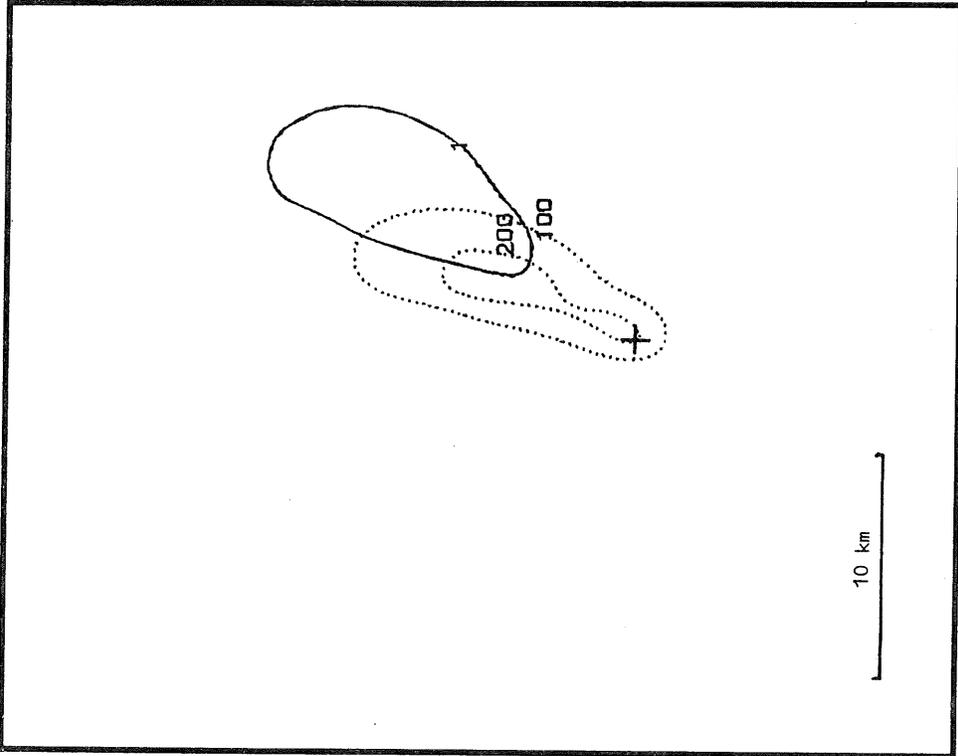


fig. 24.

Isocourbes 9 heures après le déversement

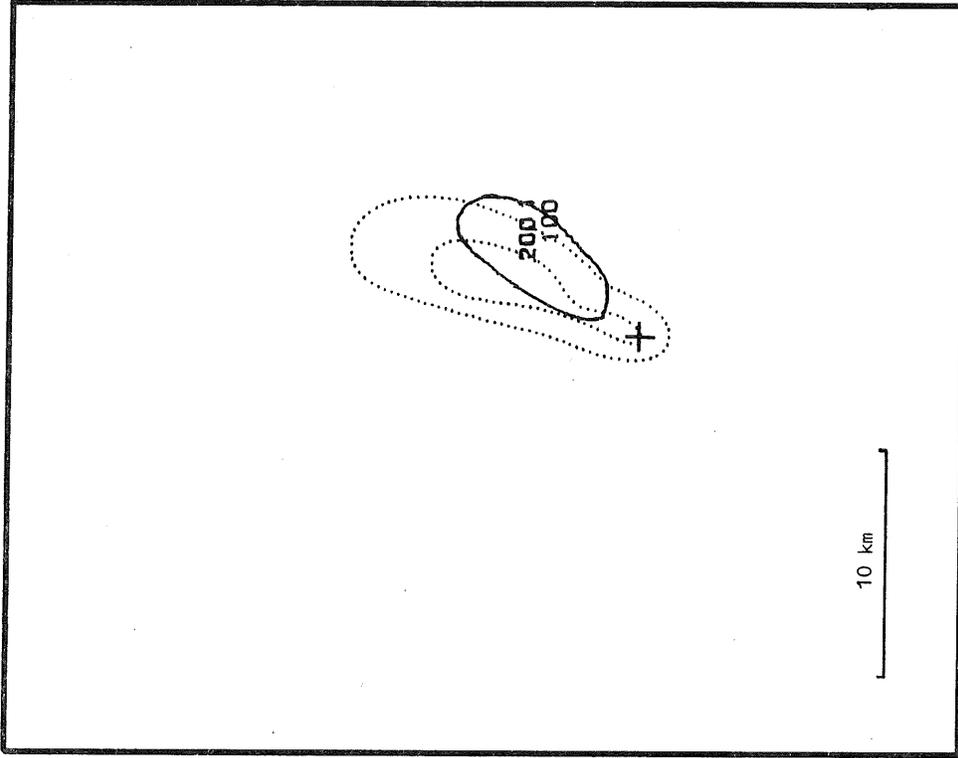


fig. 25.

Isocourbes 12 heures après le déversement

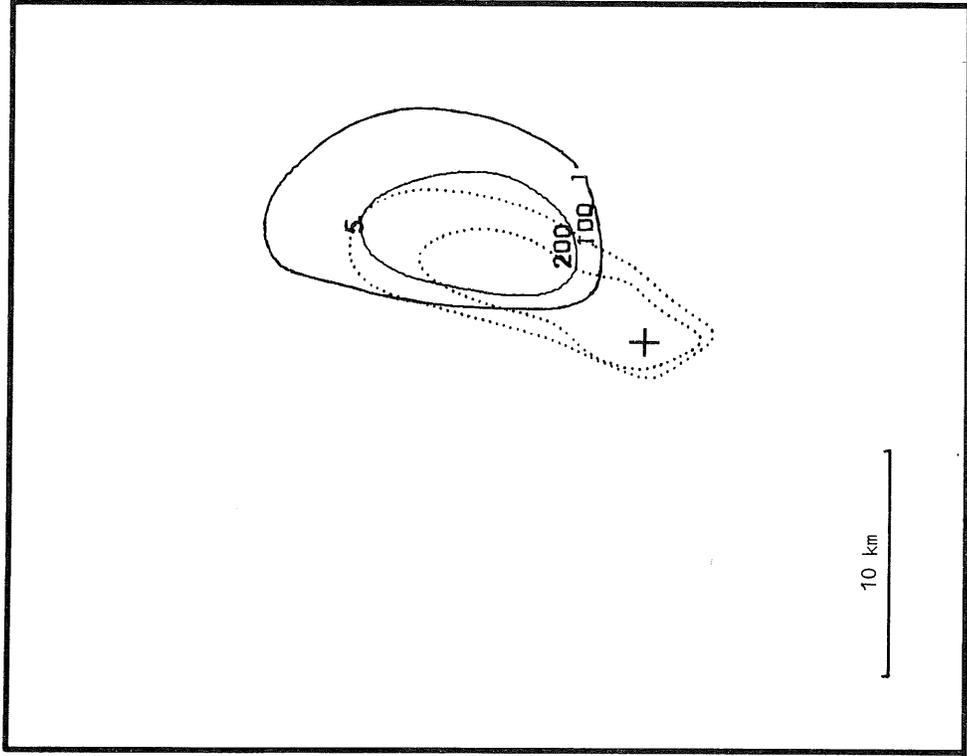


fig. 26.

Isocourbes 15 heures après le déversement

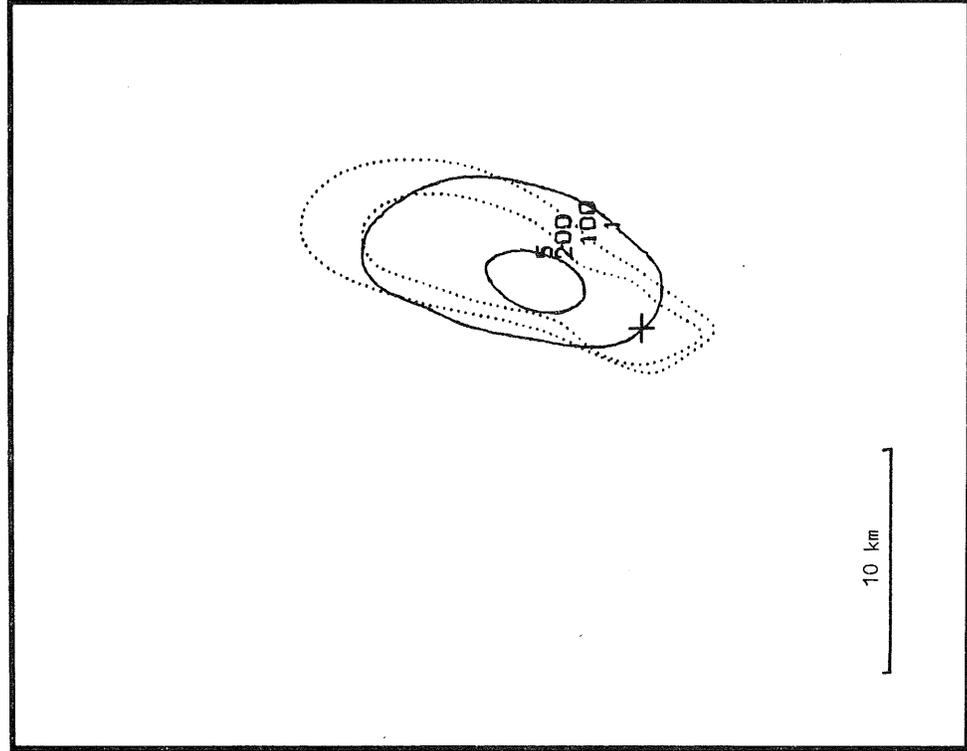


fig. 27.

Isocourbes 18 heures après le déversement

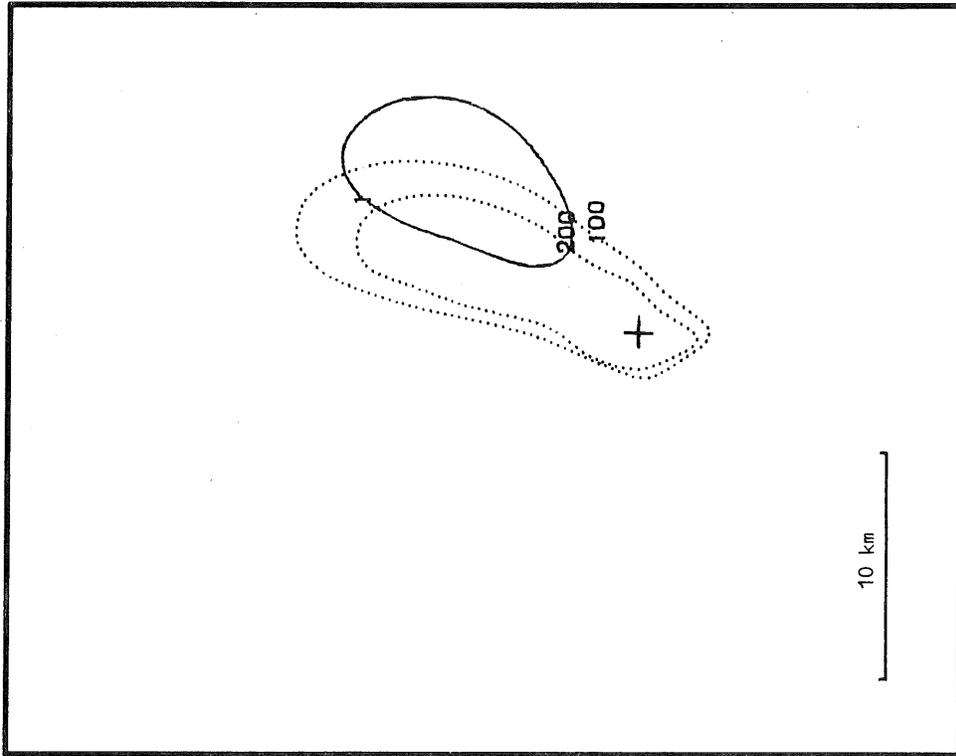


fig. 28.
Isocourbes 21 heures après le déversement

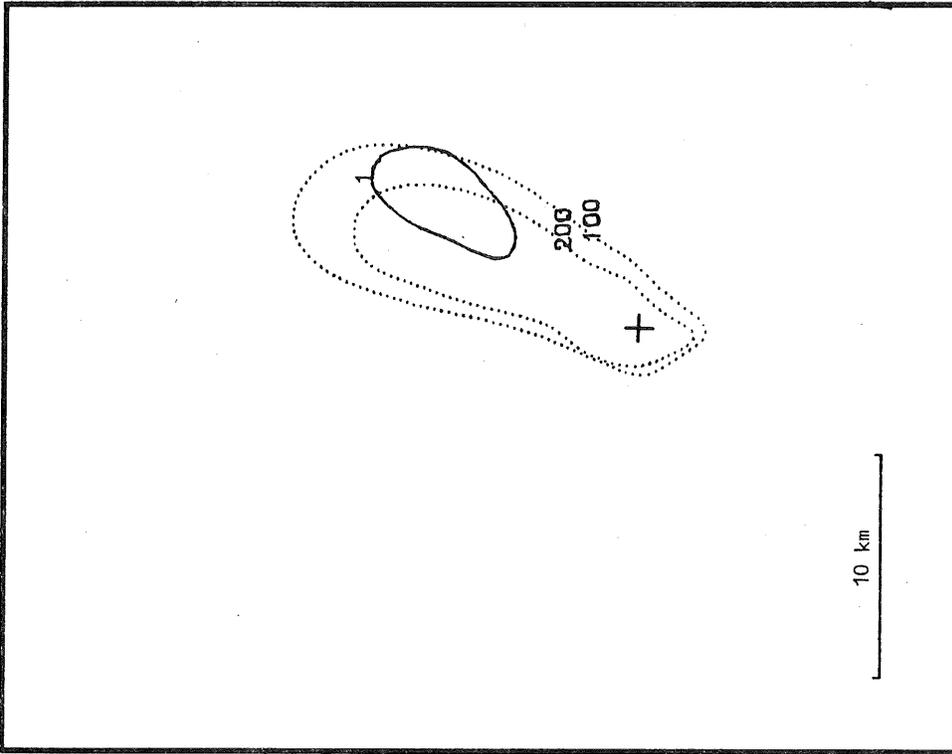


fig. 29.
Isocourbes 24 heures après le déversement

l'isocourbe 5 et rétrécissement de l'isocourbe 1). Sur la figure 26 (un peu plus d'une période de marée après le déversement, on remarque une augmentation de la teneur en matières en suspension (réapparition de l'isocourbe 5) due à une remise en suspension intense par le courant de marée qui a atteint sa vitesse maximum.

Par suite de dépôts et remises en suspension successifs, on a constaté en poussant plus loin la simulation un net étalement de la distribution de sédiments ajoutés, qui couvrent une région de plus en plus étendue d'une couche de moins en moins riche en fer.

11.6.- Conclusions du rapport

Bien que, dans l'état existant des programmes d'intégration, lors de la simulation, la dispersion de la déplétion en O_2 et du pH n'ait pu être simulée, on sait que la zone dangereuse est relativement peu étendue (calculée à partir du besoin total en O_2 et de la quantité d'acide déversée, eu égard au pouvoir tampon de l'eau de mer). La dispersion des suspensions a par contre été simulée et a montré une rapide décroissance de leur concentration dans la phase liquide ainsi qu'une *évasion* des sédiments nouveaux hors de la zone de déversement. Dans la mesure où les déversements projetés n'ont lieu qu'une fois par mois, les sédiments de fond sont presque totalement dispersés et seule une élévation minime de la teneur en fer de l'ensemble des sédiments doit être attendue aux environs du point de rejet et sur une ligne qui part de ce point dans une direction générale nord-nord-est. Le fer reste relativement peu de temps dans la phase liquide; de plus, il y est sous forme dissoute encore moins longtemps, ses interactions à court terme avec le plancton seront donc très faibles. Par contre, le problème peut être différent dans la couche limite de fond où le Fe, bien que précipité, réside longuement, bien qu'à des concentrations faibles; une lente solubilisation peut avoir lieu, qui aura des effets à long terme sur le benthos; les conséquences ne sont pas simulables par ce modèle, bien qu'elles puissent être graves. Cependant, comme la firme s'est engagée à n'effectuer les déversements que durant une période limitée (le temps de trouver un moyen d'utiliser le $FeCl_2$ comme moyen

d'épuration d'autres résidus industriels), le déversement ne semble pas dangereux *per se*. Il faut enfin préciser que les autorisations de déversements ne sont délivrées que pour des périodes fixées et peuvent ne pas être renouvelées.

12.- Déversement X2

Ce déversement est formé par des eaux usées de l'industrie photographique dont la composition est la suivante (il y a deux types d'eaux usées).

Composés	Eaux-mères (g/l)	Eaux de lavage (g/l)
NH ₄ ⁺ lié	38	19,5
N lié	18,5	3,6
Nitrate NO ₃ ⁻	33,3	6,3
Sulfate SO ₄ ⁻	76,7	55,5
Argent Ag ⁺	4,5 10 ⁻³	0,3 10 ⁻³
Fer Fe ⁺⁺	62 10 ⁻³	0,3 10 ⁻³

La firme X2 se propose de déverser mensuellement environ 250 m³ de chacune de ces solutions, simultanément avec un déversement déjà en cours réalisé par une autre firme et qui contient essentiellement de l'acide sulfurique et des sels métalliques, dont des sels de chrome et de titane. Les principales caractéristiques du déversement X2 sont d'une part une importante concentration en ammoniacque et en nitrate, donc en azote (nutrient important), d'autre part la présence d'argent sous forme soluble, semble-t-il.

12.1.- Comportement des composés chimiques présents dans les eaux usées

La société, dans son formulaire de demande d'autorisation, précise qu'elle n'a pu mettre en évidence aucune interaction d'une telle solution avec le milieu biologique, ce qui est pour le moins surprenant

lorsqu'on sait que l'azote est un nutriment absolument indispensable à la croissance du phytoplancton; de plus, ce nutriment est soupçonné être limitant dans le Southern Bight, c'est-à-dire qu'en pratique, et schématiquement, toute augmentation de la quantité de ce nutriment mise à la disposition du phytoplancton entraîne une augmentation de la croissance de celui-ci : il y a donc nécessairement une importante interaction entre une telle solution et un écosystème marin.

Selon le groupe PODAMO (1975a), la quantité totale d'azote déversée annuellement, soit environ $2,5 \times 10^5$ kg, ne serait pas négligeable par rapport à la production primaire dans l'ensemble de la zone 1S (estimée à l'équivalent de 10^8 kg/an).

Si l'azote absorbé par le phytoplancton l'est dans une zone relativement restreinte (ce qui arrive si l'absorption est rapide et si la diffusion n'a pas le temps d'agir), on peut concevoir que dans la masse d'eau qui reçoit les déversements, se produira à la suite de chacun de ceux-ci un léger *bloom* de phytoplancton, au moins pendant les périodes climatiques favorables à l'éclosion de tel phénomène. En dehors de ces périodes, le déversement contribuera à augmenter la quantité d'azote disponible, alors que celle-ci est déjà fort élevée.

Lors de sa croissance, le phytoplancton risque d'absorber également les ions Ag^+ et autres ions métalliques présents dans les eaux usées de l'autre société; des populations planctoniques contaminées se développeront donc après chaque déversement, perturbant encore un peu plus l'équilibre écologique déjà menacé de cette partie de la mer du Nord. Il faut noter que l'influence des ions Ag^+ sur les organismes vivants est fort mal connue.

12.2.- Choix des variables d'état

Il est clair qu'une variable d'état qui doit absolument être étudiée est l'azote. On pourrait éventuellement distinguer deux formes de nutriment (composés ammoniacaux, nitrates) dont l'absorption par le phytoplancton semble être sélective, mais comme on ne dispose que d'un taux d'absorption global, estimé d'après une productivité primaire moyenne, on ne peut ici différencier le comportement du plancton et on

doit se limiter à étudier l'évolution d'une variable d'état qui représente tout le compartiment *azote*. On ne connaît pas de manière détaillée le comportement des populations planctoniques (phyto- et zooplancton) dans la zone de déversement. De plus, si l'assimilation est rapide, le zooplancton n'a guère le temps de limiter la croissance du phytoplancton et celle-ci dépend uniquement de l'absorption des nutriments disponibles. Au moment où il est capable d'assimiler des nutriments, le phytoplancton est déjà fort abondant et on peut estimer qu'une augmentation de concentration d'azote de quelques mg/m^3 dans une eau qui en contient environ 50 mg/m^3 en moyenne n'entraîne pas une variation de l'ordre de grandeur de la vitesse d'absorption. On n'utilisera donc pas, pour simplifier, de variable *plancton* ou *phytoplancton*.

12.3.- Interactions entre les variables d'état

En pratique, on n'a choisi qu'une variable d'état dont l'interaction avec le milieu se limite à un terme de disparition, qu'on écrit

$$(4.10) \quad \bar{I}_N = - A_{\max} \frac{\bar{\rho}_N}{\kappa_m + \bar{\rho}_N}$$

où $\bar{\rho}_N$ représente la concentration de l'azote dans la colonne d'eau; A_{\max} est un taux maximum d'assimilation, qui théoriquement dépend de la lumière incidente et de la biomasse planctonique, mais qu'on supposera constant à défaut d'une connaissance précise de ses variations; κ_m est une constante de saturation; l'allure de I_N en fonction de $\bar{\rho}_N$ est montrée à la figure 30. Cette formulation, dite de Michaelis-

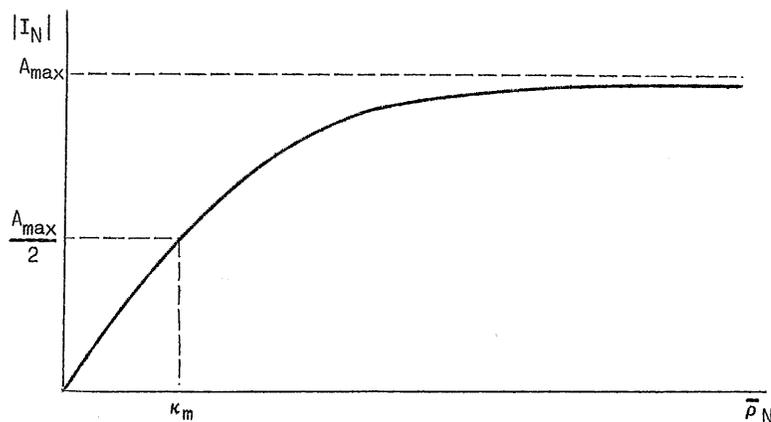


fig. 30.

Menten, est classique pour l'expression du taux d'assimilation d'un nutriment par le phytoplancton [e.g. Nihoul (1975)]. Pour la simulation, on supposera qu'il y a équilibre entre l'apport d'azote par des sources extérieures et la productivité primaire *normale* dans la zone de déversement, de sorte que, en dehors de la tache de nutriment créée par le déversement, la concentration d'azote reste constante et égale à la concentration moyenne de 50 mg/m^3 ; d'autre part, on supposera que l'absorption de l'azote excédentaire s'effectue suivant la loi (4.10). Comme signalé au début du chapitre III, la variable utilisée dans les calculs numériques sera

$$\bar{\rho}'_N = \bar{\rho}_N - 50 \quad (\text{mg/m}^3)$$

et l'interaction s'écrira

$$\bar{I}_N = - A_{\max} \frac{\bar{\rho}'_N + 50}{K_m + 50 + \bar{\rho}'_N} .$$

12.4.- Résultats de la simulation

Les figures 31 et 32 montrent l'allure des taches d'azote ajouté par le déversement 6 h et 12 h après le début du déversement. Comme on n'avait pas de détails précis sur la mode de déversement, on a supposé que celui-ci s'effectuait quotidiennement (12 m^3 d'eaux mères + 12 m^3 d'eaux de lavage). On constate une très rapide disparition de l'azote dissous due à l'assimilation par le phytoplancton.

12.5.- Conclusions du rapport

L'assimilation rapide du nutriment entraîne une productivité primaire accrue et, par conséquent l'introduction plus rapide dans l'écosystème des ions métalliques déversés en même temps que l'azote. On a donc émis un avis défavorable à l'autorisation de ce déversement.

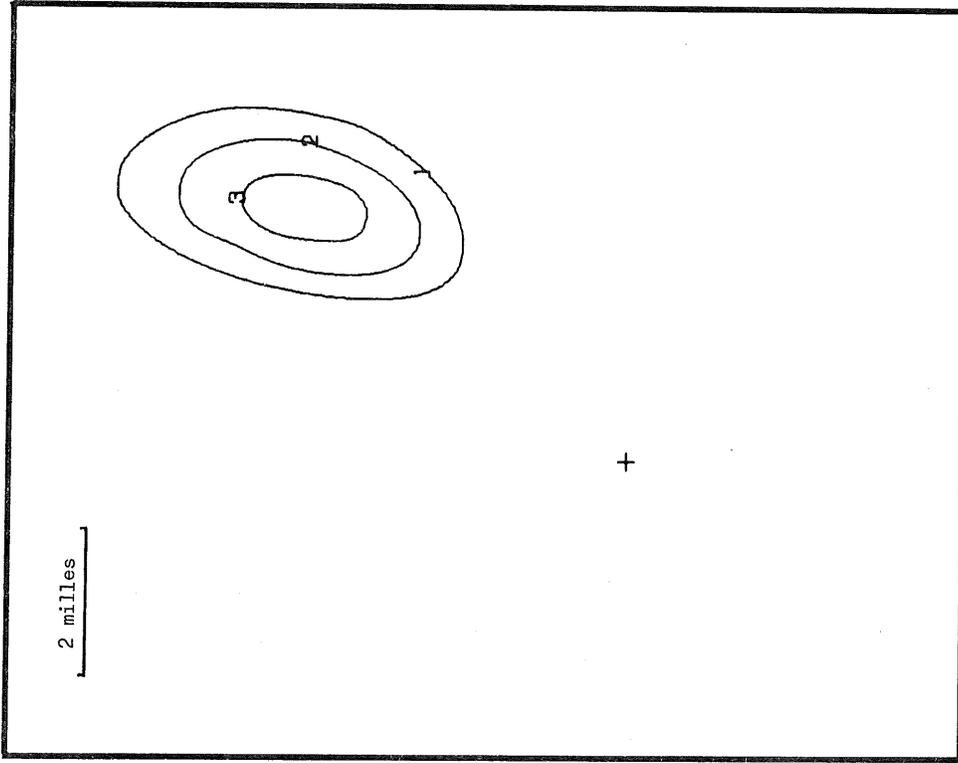


fig. 31.

Evolution des taches de concentration d'azote ajouté par le déversement X_2 . Situation 6 heures après le début du déversement. La courbe 1 est la courbe 51 mg/m^3 , la courbe 2 est la courbe 52 mg/m^3 , la courbe 3 est la courbe 53 mg/m^3 , la croix indique le point de déversement.

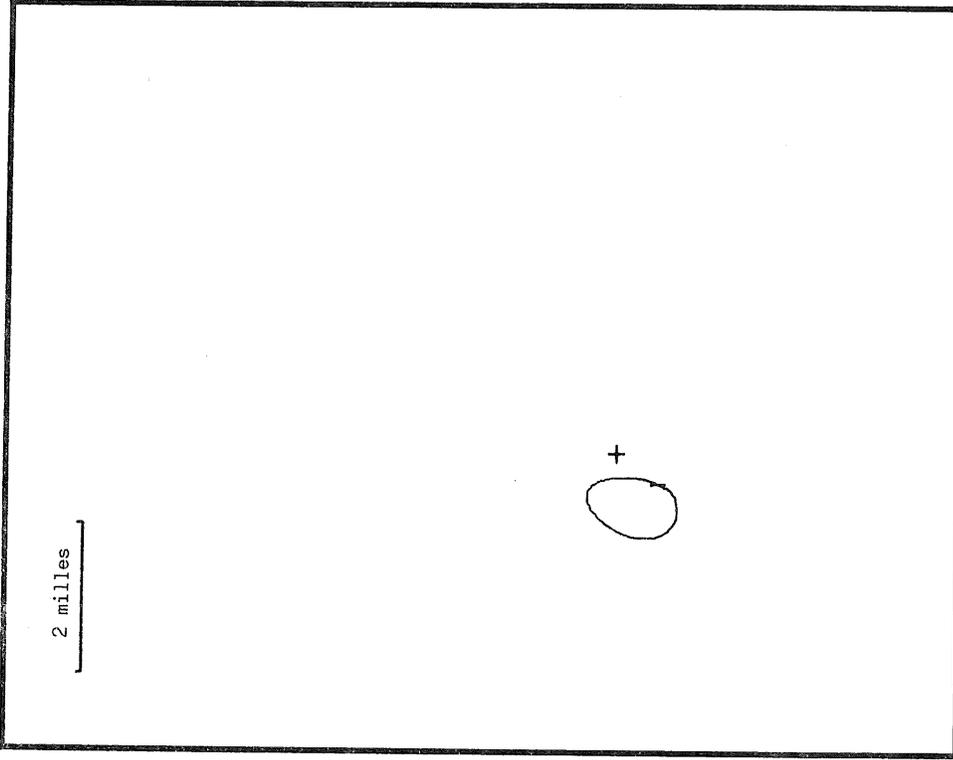


fig. 32.

Evolution des taches de concentration d'azote ajouté par le déversement X_2 . Situation 12 heures après le début du déversement. La courbe 1 est la courbe 51 mg/m^3 , la croix indique le point de déversement.

13.- Déversement X3

La firme X3 se propose de déverser quotidiennement 625 t d'une suspension de gypse, sous-produit d'une usine synthétisant des engrais chimiques. La composition pondérale de la suspension est la suivante

H_2O : 25 à 30 % ,

$CaSO_4 \cdot 2H_2O$: 65 à 70 % ,

H_3PO_4 : 0,5 à 0,6 % ,

$(Ca)(HPO_4)$: 1,8 % ,

$Ca_3(PO_4)_2$: 0,07 % .

La composition des résidus varie suivant la durée durant laquelle ils ont été entreposés. On distingue deux types de composés qui pourraient avoir une influence sur le milieu marin :

- le sulfate de calcium,
- les composés phosphorés.

La firme prétend que les résidus sont biologiquement inactifs, mais se contredit plus loin dans le dossier qu'elle présente en affirmant que, dans des zones voisines de la côte anglaise où des déversements similaires sont effectués, on constate une augmentation de la productivité des pêcheries.

13.1.- Comportement des résidus

Le sulfate de calcium (sous forme de gypse) forme 70 % au maximum du poids de la suspension. Chaque déversement en rejette donc $4,38 \times 10^5$ kg . Compte tenu d'un taux de dilution initial supérieur à 1000 , la concentration initiale est d'environ $0,876 \text{ kg/m}^3$ ou $0,876 \text{ g/l}$. Le $CaSO_4 \cdot 2H_2O$ est soluble à raison de $2,8 \text{ g/l}$, donc aussitôt dans l'eau, la suspension sera immédiatement dissoute. Au bout de quelques heures, on peut atteindre un taux de dilution (effectif) d'environ 100000 . La concentration moyenne du gypse est alors d'environ 9 mg/l , ce qui est équivalent à une teneur en ions sulfate de 6×10^{-5} moles/l sur une surface d'environ $2 \times 10^6 \text{ m}^2$ (2 km^2) .

La teneur moyenne dans le Southern Bight étant d'environ $2,8 \times 10^{-2}$ mole/l , on constate que l'apport est négligeable à court terme, d'autant plus que l'ion sulfate est biologiquement peu actif.

La quantité de phosphore déversée quotidiennement est de $2,4 \times 10^3$ kg . En estimant une dilution de 100000 , la concentration moyenne ajoutée est d'environ 0,05 mg/l , comparée à une concentration moyenne de l'ordre de 0,1 mg/l . Pendant un laps de temps non négligeable, la concentration sera donc supérieure de 50 % à la normale, déjà fort élevée. Dans le Southern Bight aux eaux déjà riches en nutriments, le phosphore est déjà assimilé à une vitesse maximum : toute addition ne sera donc assimilée que fort lentement sauf dans des zones plus pauvres.

13.2.- Choix de la variable d'état

Seul le phosphore a été retenu comme variable d'état, le gypse ne semblant pas dangereux, dans les conditions de dilution envisagées.

13.3.- Interaction de la variable d'état

On a supposé que le phosphore était assimilé par le phytoplancton de manière similaire à l'azote, mais avec une vitesse et une constante de saturation différentes. Comme ces coefficients ne sont pas connus, on les a déduit de la loi de Michaelis-Menten pour l'azote, en les multipliant par le rapport $\frac{P}{N}$ existant dans le phytoplancton ($\frac{1}{20}$ environ) .

13.4.- Résultats de la simulation

Les résultats sont données sur les figures 33 et 34 espacées de 24 h . On constate une lente dispersion de la tache (isocourbe de $0,01 \text{ g/m}^3$ en plus de la moyenne), due à la diffusion et à l'absorption par le phytoplancton, avec les mêmes hypothèses que pour la dispersion de l'azote dans le déversement étudié précédemment, faute de mieux. L'augmentation de la concentration en phosphore n'est pas annulée avant le début d'un deuxième déversement. Après 48 h (deuxième figure), on

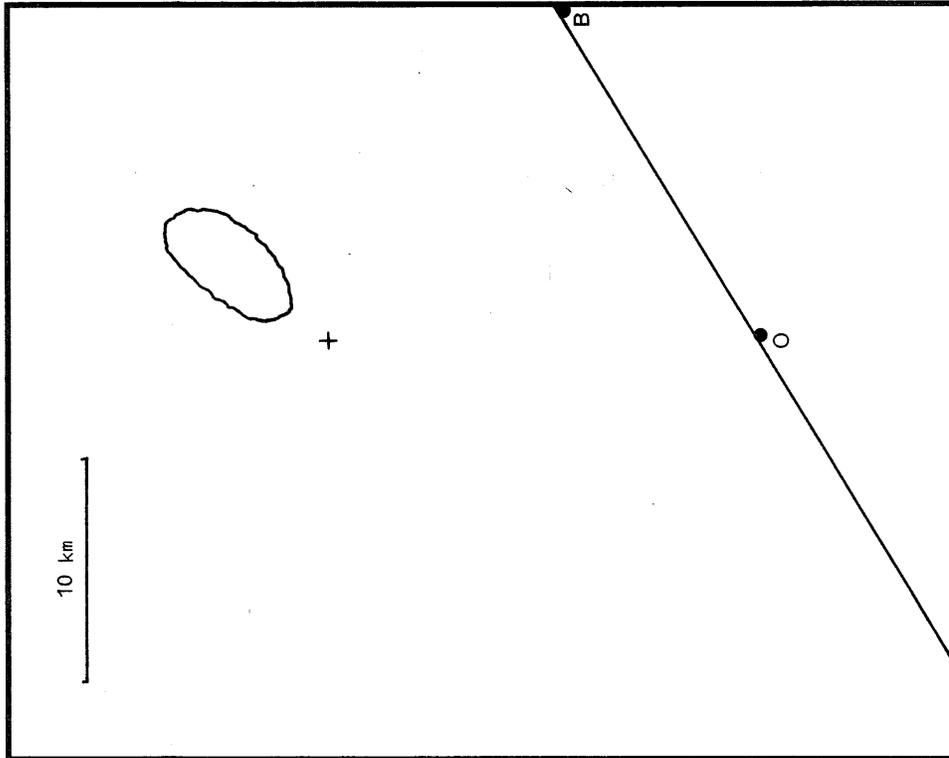


fig. 33.

Evolution des taches de concentration en phosphore ajouté par le déversement X_3 ($0,01 \text{ mg/m}^3$ ajoutés). La croix représente le point de déversement. La ligne OB représente la côte belge avec les villes d'Oostende et de Blankenberge. La fréquence des déversements est supposée être journalière.

La figure 33 représente la tache 24 heures après le déversement.

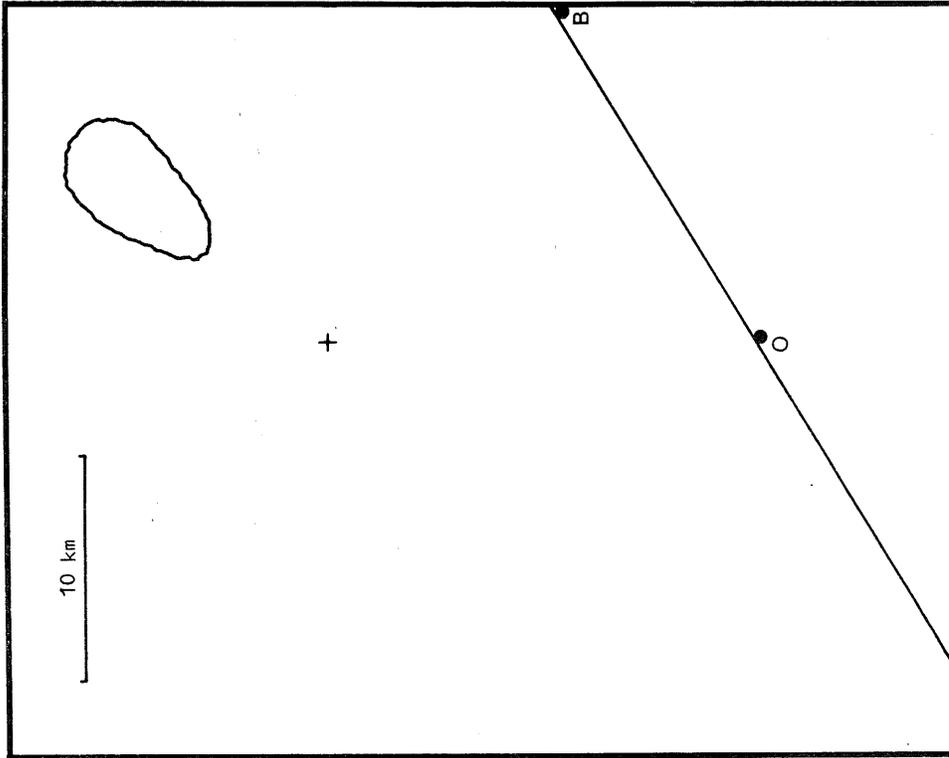


fig. 34.

La figure 34 représente la tache 48 heures après le déversement.

constate que la tache est plus étendue qu'après 24 h (première figure). On constate donc que la fréquence et l'importance des déversements contribuent à la formation d'une zone où la concentration en phosphore est supérieure à la moyenne, ce qui confirme le calcul élémentaire repris dans le point 13.1 de cette section.

13.5.- Conclusions du rapport

Les écologistes craignent que les excès de nutriments conduisent à l'eutrophisation. La seule justification que l'on puisse présenter à des déversements de phosphore est que la concentration en phosphore des eaux côtières est déjà tellement grande que le phytoplancton l'absorbe déjà à sa vitesse maximum, la croissance paraissant être limitée par l'azote. Ceci ne serait pourtant pas vrai au large et dans les zones côtières, pourrait n'être vrai *qu'en moyenne* pour le phytoplancton, certaines espèces étant susceptibles d'avoir une constante de saturation plus basse et de proliférer (avec un risque de marées rouges) grâce à un appoint important de phosphore dissous.

Les deux zones de déversements proposées par la firme X3 ne conviennent pas. L'une est dans le chenal d'accès à l'Escaut, l'autre est à la fois trop au large et trop près des zones écologiquement préservées du sud.

Si le déversement s'avérait nécessaire pour certaines raisons, une alternative aurait été de faire effectuer le déversement dans la zone côtière où l'écologie est déjà extrêmement perturbée. Seulement, le déversement dans les eaux territoriales est interdit par la convention d'Oslo. Une autre alternative est de déverser les résidus incriminés dans la zone où débouchent le Rhin et la Meuse, au nord de l'embouchure de l'Escaut. Cette zone (1N) est déjà eutrophiée par une teneur très élevée en nutriments et est plus ou moins sacrifiée elle aussi. Une augmentation de la teneur en phosphore ne s'y marquera sans doute pas comme au large, et d'autre part, la diffusion par effet cisailant y est plus élevée que dans la zone 1S [Nihoul et Runfola (1973)]. Il faut noter que la simulation a été effectuée en supposant que le phosphore était, malgré le fait qu'il soit généralement excédentaire, assimilé

lentement par le phytoplancton local. Si l'assimilation n'a pas lieu, on a un phénomène de dispersion pure et la disparition de concentrations de phosphore supérieures à la moyenne est encore plus lente que celle qui est simulée : les résultats de la simulation peuvent donc être trop optimistes.

14.- Déversement X4

La firme X4 a introduit deux demandes de déversement pour des sous-produits dont on ignore l'origine.

Le premier déversement consiste en une quantité mensuelle de 200 m³ (en trois voyages) du mélange suivant :

H₂SO₄ : 65 % ,
acides sulfoniques : 15 % ,
matières organiques : 20 % .

Ce mélange contient en plus des matières en suspension groupées sous le vocable *sludge*. La densité vaut 1,6 et son pH est compris entre 0 et 1 . Le deuxième est le déversement mensuel de 750 m³ de la solution suivante :

H₂SO₄ : 69 % ,
eau : 18 % ,
matières organiques : 11,5 % ,
matières grasses et huiles : < 1 % .

La densité est de 1,64 et le pH compris entre 0 et 1 .

On remarquera que la composition exacte de la matière organique et du *sludge* n'est pas indiquée. Celle-ci a été demandée à la firme, car il se peut que des produits toxiques soient cachés, volontairement ou non, derrière ces appellations par trop nébuleuses.

Dans les deux cas, la firme signale que la BOD (*biological oxygen demand*) et la COD (*chemical oxygen demand*) sont nulles, ce qui est manifestement faux lorsqu'on connaît la quantité de matières

organiques dont une partie au moins doit être oxydable, mais qui se conçoit si ces deux grandeurs ont été mesurées dans les conditions d'acidité de la solution : il ne peut y avoir alors d'activité biochimique; bien entendu, dès que la neutralisation par l'eau de mer a commencé à faire son effet, l'oxydation peut avoir lieu.

La firme propose deux points possibles de déversement, l'un en mer du Nord (52° 30 N , 3° 00 E), l'autre dans l'Atlantique. Comme on ne connaît pas les caractéristiques hydrodynamiques et écologiques de ce dernier, on n'émettra pas d'avis sur la possibilité et les avantages d'y effectuer un déversement.

14.1.- Choix des variables d'état

Cette demande de déversement est la première qui ait pu être étudiée à l'aide d'une simulation réalisée grâce aux algorithmes de poursuite. On a donc pu simuler un peu mieux le mode de déversement.

La nature des détritits montre que deux phénomènes importants doivent être pris en compte : la variation de pH consécutive à l'addition d'une solution concentrée d' H_2SO_4 , et la consommation d'oxygène dissous nécessaire à l'oxydation d'une partie au moins des matières organiques rejetées.

Clairement, on pourrait donc utiliser comme variables d'état, \bar{p}_C , \bar{p}_{O_2} , \bar{p}_{H^+} et $\bar{p}_{HCO_3^-}$. Cependant, ces deux dernières sont superflues car on ne peut suivre leurs variations spatiotemporelles, qui sont surtout importantes dans le sillage du navire. En effet, si on se place dans celui-ci à une distance d'environ 500 m, on s'aperçoit que le taux de dilution est d'environ 10000. Or la concentration de H^+ dans le mélange (premier déversement proposé) est d'environ 8,29 iong/l, et devient après une première dilution $8,3 \times 10^{-4}$ iong/l. Or un litre d'eau de mer est capable de neutraliser $2,94 \times 10^{-3}$ iongramme de H^+ c'est-à-dire 3,5 fois plus. La variation du pH sera donc faible même dans le sillage, et *a fortiori* en dehors de celui-ci; plus la dilution sera importante, plus la valeur du pH sera stable. Or on verra plus loin que dans ce cas, le taux initial de dilution, dû aux limitations de la représentation numérique, ne peut être inférieur

à 50000 si on veut suivre approximativement le trajet du navire. (Comme le sillage proprement dit n'est pas simulable, le trajet exact du navire n'a guère d'importance.)

En ce qui concerne les variables $\bar{\rho}_{O_2}$ et $\bar{\rho}_C$, on doit noter que la quantité de matière organique oxydable dans l'eau de mer n'est pas connue puisque la composition des "matières organiques" n'est pas spécifiée dans le dossier. On verra plus loin le sort qui a été réservé à une demande de renseignements complémentaires concernant cette composition. Dans les premiers stades de la simulation, on a supposé que la quantité de carbone contenue dans la partie oxydable de la matière organique est égale à la moitié du poids de celle-ci. On peut réajuster sans difficultés les paramètres de la simulation si cette hypothèse s'avère fautive, étant donné que les termes d'interaction auront toujours la même forme.

14.2.- Interactions entre les variables d'état

Les seules variables d'état seront donc $\bar{\rho}_{O_2}$ et $\bar{\rho}_C$. On n'étudiera leur comportement qu'en dehors du sillage, là où les taux de dilution sont beaucoup plus élevés et où l'on peut s'attendre à ce que la dilution élevée imposée par l'approximation numérique soit représentative de la réalité physique. On peut justifier le fait qu'on néglige ce qui se passe dans le sillage, c'est-à-dire en fait ce qui se passe dans les quelques minutes qui suivent le commencement du déversement; en effet, on peut s'attendre à ce que la plus grande partie des matières organiques dégradables soient oxydées par des microorganismes (bactéries), parfaitement adaptés aux conditions habituelles du milieu marin; il est très courant que les microorganismes soient fort sensibles aux variations des conditions de leur milieu de vie et que leur métabolisme soit inhibé par de telles variations; or, dans le sillage le milieu est relativement modifié (notamment par l'intermédiaire des variations de pH) et l'activité bactérienne a de fortes chances d'être très réduite; par conséquent, la dégradation des matières organiques et la consommation d'oxygène qui l'accompagne se feront essentiellement en dehors du sillage. D'autre part la dégradation est relativement lente. Schématiquement, la réaction de

dégradation est :



en pratique, bien entendu, cela ne se passe pas du tout ainsi; on connaît assez mal les mécanismes de la biodégradation et on ne peut en tout cas pas, à l'heure actuelle, chiffrer les taux de réaction. Cependant, le modèle représenté par la réaction (4.12) est stoechiométriquement exact, et d'autre part, on dispose, à la suite de diverses estimations, du taux de dégradation de la matière organique dans le Southern Bight [PODAMO (1975b)] en supposant que la quantité de carbone oxydée par unité de temps est proportionnelle à la quantité totale de C présente, on a

$$(4.13) \quad \frac{d\bar{\rho}_C}{dt} = -k_1 \bar{\rho}_C$$

avec $k_1 \sim 7 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ soit $0,6 \text{ j}^{-1}$. Bien entendu, ceci est estimé pour la matière organique habituellement présente dans le milieu marin; les matières ajoutées par le déversement peuvent être dégradées plus ou moins vite; mais d'une part, on n'en connaît pas la composition exacte, et d'autre part, même si cette composition était connue, cela ne signifie pas qu'on puisse mieux chiffrer les taux de réaction. Faute d'un meilleur modèle de la biodégradation, on adoptera la valeur ci-dessus de l'interaction, en espérant qu'il n'y a pas de différence importante dans le comportement des bactéries vis-à-vis des matières organiques d'origine diverse. (Il faut cependant noter qu'une bonne partie de la matière organique "normalement" présente dans le milieu marin du Southern Bight provient, par l'intermédiaire des estuaires et des égouts, de l'activité industrielle : détergents, pesticides, hydrocarbures, ...)

Si on exprime $\bar{\rho}_{O_2}$ et $\bar{\rho}_C$ en moles, on a

$$(4.14) \quad \bar{I}_{C,O_2} = -k_1 \bar{\rho}_C,$$

$$(4.15) \quad \bar{I}_{O_2,C} = -k_1 \bar{\rho}_C.$$

14.3.- Résultats de la simulation

Comme il s'agit de la première simulation réalisée à l'aide des algorithmes à grille mobile, on va un peu détailler la mise en route du

programme avant d'analyser les résultats. Il faut d'abord définir les dimensions des mailles de la mésogrille. On a précisé au chapitre III, § 7, les critères permettant de choisir des dimensions optimales pour ces mailles. En les appliquant ici, sachant que

$$\Delta T \sim 1500 \text{ s} ,$$

$$u_{\text{max}} \sim 1 \text{ m/s} ,$$

et que la vitesse maximum du courant de marée a une direction générale nord-nord-est ou sud-sud-ouest, on peut estimer que les valeurs suivantes sont optimales :

$$\Delta x_1 \sim 400 \text{ m} ,$$

$$\Delta x_2 \sim 1400 \text{ m} .$$

En utilisant ces valeurs pour couvrir une zone de 20 km × 40 km environ (6 mailles de la macrogrille), il faut une mésogrille de plus de 2000 points. La macrogrille sur laquelle seront effectuées les intégrations numériques doit avoir des dimensions qui sont un compromis entre une plus grande précision possible et la mémoire disponible; si les mailles de la microgrille sont trop petites, il faudra trop de points pour couvrir la tache de polluant, qui au début de la simulation a au moins l'extension de la zone parcourue par le bateau au cours du déversement, et qui en général a tendance à s'étendre (à cause de la diffusion). Dans ce cas, le déversement se produit sur une circonférence de 3,6 km de diamètre qui doit entièrement être comprise dans la microgrille initiale. En estimant que la tache peut atteindre des dimensions trois ou quatre fois plus grandes au cours de la simulation, on arrive aux dimensions admissibles pour la microgrille, compte tenu de la place disponible en mémoire centrale pour les variables d'état et les paramètres calculés aux points de la microgrille :

$$h_1 \sim 132 \text{ m} ,$$

$$h_2 \sim 232 \text{ m} .$$

Le bateau parcourt la circonférence à une vitesse maximum de 11 noeuds. Le déversement s'effectue à raison de $0,111 \text{ m}^3/\text{s}$, c'est-à-dire

qu'il faut environ 115 minutes pour l'effectuer (deuxième demande) soit environ $5 \Delta T$. Pour essayer de simuler le mieux possible la trajectoire du bateau, tout en évitant une dilution initiale trop importante, on supposera que le déversement s'effectue en 27 rejets instantanés séparés de $\frac{\Delta T}{6}$ en 27 endroits situés aux sommets d'un losange de diagonales ($12 h_1$, $6 h_2$). Chaque rejet partiel est de $28 m^3$ et le taux de dilution initial est de

$$\frac{132 \times 232 \times 45}{28} \approx 50000 .$$

C'est le taux de dilution qui est atteint, physiquement à environ 3 km derrière le bateau dans le sillage. Tout se passe donc comme si la simulation de la dispersion était une quinzaine de minutes en avance sur l'évolution réelle. L'hypothèse d'un déversement continu aurait entraîné un taux de dilution initial nettement plus élevé. Cependant, en raison de la diffusion relativement rapide qui a lieu pendant le déversement lui-même, les variations de concentrations dans la zone du déversement sont vite estompées et une tache de polluants régulière apparaît à la fin des rejets.

Des résultats sont montrés sur les figures 35 et 36, donnant respectivement des isocourbes de concentration en carbone et de déplétion en oxygène dans la zone de rejet.

La dégradation est assez lente et les résultats justifient le fait qu'on ne simule pas les premiers instants de l'évolution car les quantités de matières organiques dégradées et d'oxygène consommé sont très faibles pendant ces quelques minutes. La déplétion en oxygène reste très faible (au maximum 12 % et 5 % en moyenne dans une masse d'eau de $20 km^2$). Comme les eaux du Southern Bight sont généralement sursaturées en oxygène, cette déplétion ne porte guère à conséquence. La dégradation des matières organiques contenues dans le déversement ne consomme pas l'oxygène suffisamment vite pour provoquer une situation anoxique, dans l'hypothèse où l'oxydation s'effectue à la vitesse habituelle.

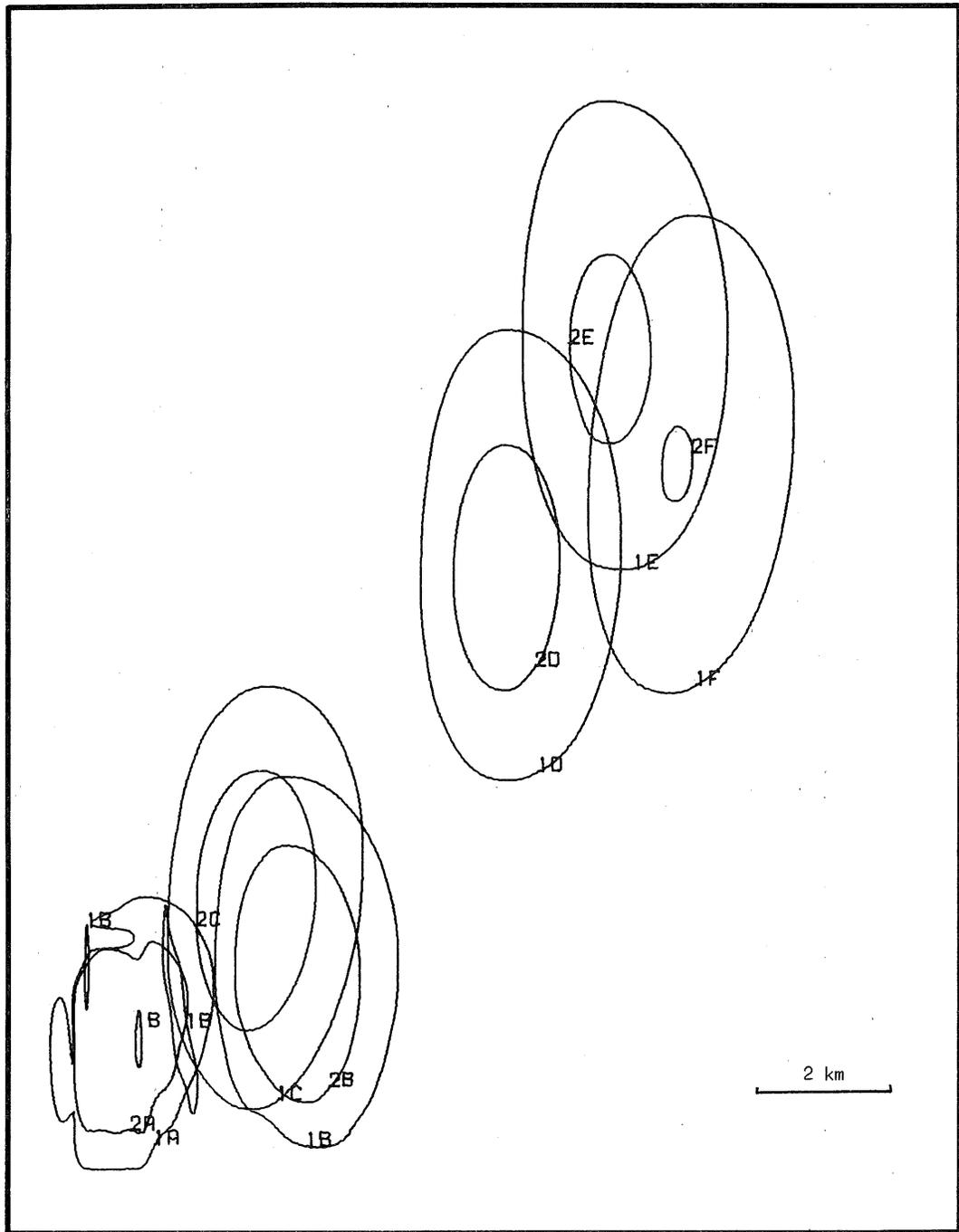


fig. 35.

Evolution de la tache de matière organique produite par le déversement X_4 . Les isocourbes notées 1 correspondent à la valeur $2 \cdot 10^{-3}$ atgr C/m^3 ; celles notées 2 à la valeur 10^{-2} atgr C/m^3 . Les lettres donnent l'ordre chronologique (A = 1/3 de période de marée après le début du déversement, B = 2/3 ..., etc.).

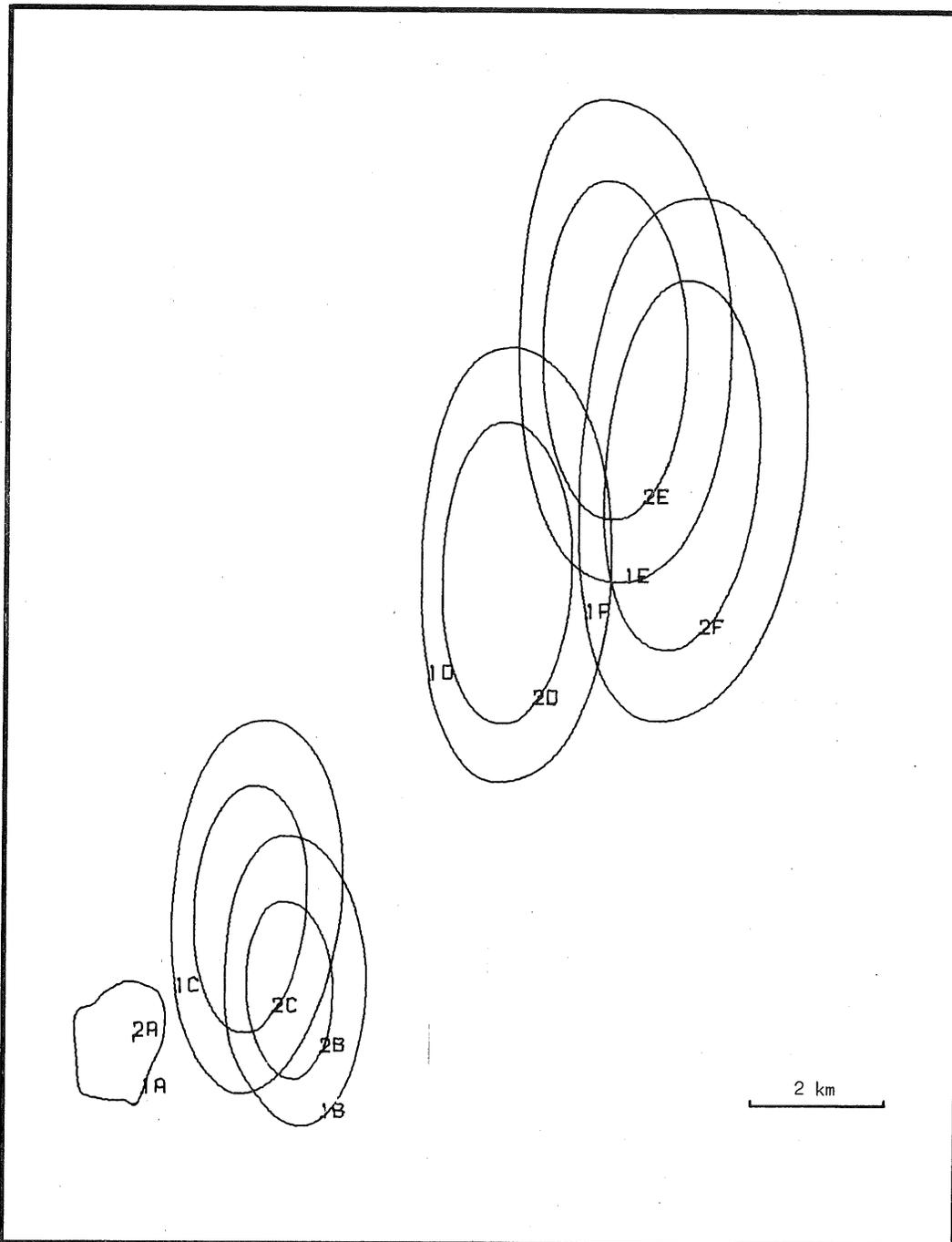


fig. 36.

Evolution de la tache de déplétion en oxygène dissous produite par le déversement X_4 . Les isocourbes notées 1 correspondent à la valeur 10^{-3} molegr O_2/m^3 ; celles notées 2 à la valeur $3 \cdot 10^{-3}$ molegr O_2/m^3 . La signification des lettres est la même que sur la figure précédente.

14.4.- Conclusions du rapport

Ces conclusions sont (provisoirement) académiques : la société n'a pas répondu aux demandes de renseignements complémentaires qui lui ont été adressées, de sorte que le dossier est bloqué.

Outre les remarques qui ont été faites sur les résultats de la simulation, on peut ajouter que le deuxième déversement proposé contenait en proportion non négligeable des huiles, susceptibles, aux dires même du rédacteur du dossier, de former un film à la surface de l'eau; un tel film extrêmement mince (quelques couches moléculaires) peut s'étendre sur de très grandes surfaces, perturber les processus de réaération et en général les interactions entre l'atmosphère et la mer; il faut donc dans la mesure du possible, en éviter la formation. D'autre part, on ne sait pas si le vocable "matières organiques" ne cache pas des composés toxiques. Jusqu'à preuve du contraire, et tenant compte des conclusions précédentes, l'avis du groupe de simulation sur ces déversements (et surtout le second) est nettement défavorable.

15.- Considérations générales sur les résultats des simulations

On a plusieurs fois déjà mis l'accent sur le fait que l'initialisation de l'intégration numérique imposait un taux de dilution bien supérieur au taux de dilution physique initial. Un 'taux de dilution numérique' élevé est une conséquence de l'impossibilité d'utiliser une maille élémentaire d'intégration suffisamment petite. En effet, pour couvrir la tache de polluant avec des mailles telles que le taux de dilution numérique soit compatible avec la dilution effective, il faudrait plus de points que la mémoire de l'ordinateur ne peut en accepter. D'autre part, on se rappellera que les hypothèses qui ont permis d'écrire l'équation de dispersion par effet de cisaillement ne sont fondées que si la grandeur caractéristique des variations horizontales de concentration est au moins d'un ordre de grandeur supérieur à la profondeur; le modèle ici utilisé n'est pas valide pour l'étude du sillage; le temps caractéristique au-delà duquel l'effet du cisaillement commence à devenir important est d'ailleurs de l'ordre de l'heure, ce qui justifie

le décalage mentionné plus loin entre le début du déversement et l'initialisation pratique de la simulation.

La conséquence de l'impossibilité de rendre compatible dilution numérique et dilution physique initiale est la suivante : on ne peut simuler ce qui se passe dans les environs immédiats de l'orifice de déversement; or la dilution numérique est de l'ordre de grandeur de la dilution physique à une distance de quelques kilomètres (dans le sillage) de l'hélice ; ces quelques kilomètres sont parcourus par le bateau en environ $\frac{1}{2}$ heure. Par conséquent, pour la dispersion d'un polluant passif, tout se passe comme si la première heure de la dispersion n'était pas simulée et que la condition initiale pour la simulation numérique était l'état de la tache de polluant environ 1 heure (en ordre de grandeur) après le déversement, et non au début même du déversement.

Si les polluants réagissent avec le milieu, il faut imposer comme conditions initiales les concentrations qui existent après ce laps de temps. Dans le cas où les réactions sont rapides et complètes, on peut facilement prendre les produits résultants comme produits initiaux, avec un taux de dilution initial déterminé par la taille de la maille élémentaire. Par contre, si les réactions sont relativement lentes (et notamment si leur vitesse est conditionnée par la rapidité avec laquelle les réactifs manquants sont apportés par les phénomènes de diffusion dans la zone de réaction), il faut bien faire des hypothèses sur les proportions relatives des produits initiaux et finaux, puisque les quantités exactes ne seraient connues que si l'on pouvait simuler les tout premiers instants du déversement. On peut supposer que les erreurs d'estimation s'atténueront au cours du temps et que la simulation n'en sera perturbée que pendant les premières heures. Autrement dit, on peut s'attendre à ce que la simulation devienne correcte après les incohérences initiales; c'est suffisant pour les objectifs visés, puisque, généralement, l'évolution devient plus douce et plus lente. En ce qui concerne l'impact du déversement sur l'écosystème, il faut remarquer qu'il est atténué dans la simulation par rapport à la réalité, par l'hypothèse d'un taux de dilution initiale élevé, puisque les concentrations de polluants ajoutés

par le déversement sont plus faibles et mieux réparties que dans la réalité et de la sorte, la perturbation imposée est moins brutale. Ainsi, la plupart du temps, les simulations ignorent les effets de la variation du pH, qui pourtant sont sensibles dans le proche sillage (mais sans doute exclusivement dans cette petite région). Dès lors, les simulations sont, dans un sens, trop optimistes.

16.- Considérations sur les performances et l'occupation mémoire du programme

La majeure partie de la mémoire est occupée par les tableaux contenant les variables et les paramètres. On a joué au maximum sur la possibilité d'utiliser une même zone mémoire pour ranger des tableaux qui n'étaient pas utilisés simultanément. De même, on a limité le nombre de zones-mémoire auxiliaires et évité le recours à des transferts (sauvetages) sur des mémoires externes. Comme la plus grande partie du temps d'exécution dans l'unité de traitement est due à des calculs (intégrations, interpolations) et non à l'exécution des séquences logiques bien que celles-ci soient complexes, on a également pu gagner de la place en ayant recours aux techniques de recouvrement (*overlay*), sans que la rapidité d'exécution du programme en soit affectée.

On estime que la simulation complète demande de 0,5 à 1 s par variable d'état et par pas d'intégration Δt , ce qui est un net progrès (3 ou 4 fois plus rapide) par rapport au programme initial à grille fixe qui utilisait des techniques d'accès direct pour la simulation de systèmes à plusieurs variables d'état. Le programme actuel offre en outre l'avantage de permettre l'utilisation de grilles plus fines et de poursuivre l'évolution beaucoup plus longuement. La méthode du quatrième ordre demande un temps de calcul d'environ 65 % supérieur à celui de la méthode du deuxième ordre. L'exploitation des résultats pour la fourniture de tracés de courbes d'isoconcentration, plus expressives que des tableaux de chiffres, se fait par un programme indépendant développé spécialement par Monsieur Pol Closset.

Appendice I

Description des algorithmes de grille mobile

1.- Schéma des algorithmes de poursuite

On va expliquer ici le mécanisme qui permet de suivre la tache dans son évolution. La grille mobile est donc un rectangle qui s'agrandit, se rétrécit, en général se déplace par suite de la variation de la position de ses côtés. C'est la façon dont sont déterminées ces positions successives du contour qui doit être explicitée.

On suppose que chacun des côtés peut se déplacer indépendamment des autres et on affecte à chacun des côtés une variable qui contrôle son déplacement et qui peut prendre les trois valeurs $+ 1$, 0 , $- 1$; il n'y a en effet que trois possibilités à chaque instant où le déplacement est calculé :

i) le côté se déplace vers l'extérieur parce que la tache s'étend dans une direction au moins; dans ce cas, on donne la valeur $+ 1$ à la variable de contrôle associée à cette direction;

ii) le côté se déplace vers l'intérieur de la grille mobile parce que la tache se rétracte dans cette région : la valeur $- 1$ est imposée à la variable de contrôle;

iii) le côté reste immobile parce que la tache ne varie pas de façon importante dans la région proche : on met la variable de contrôle à 0 .

Le côté situé au nord de la tache se voit affecter la variable de contrôle **NORD**, celui au sud la variable **SUD**, celui à l'est la variable **EST**, celui à l'ouest la variable **OUEST**. Quelques exemples bien choisis fixeront les idées. L'ensemble de valeurs $(0, 0, 0, 0)$ respectivement pour **NORD**, **SUD**, **EST**, **OUEST** correspond à une grille qui ne change ni de forme,

ni de position; l'ensemble $(1, 1, 1, 1)$ correspond à une grille entourant une tache dont le déplacement général n'est pas sensible sur le contour, mais qui s'étend dans toutes les directions, soit à la suite d'une diffusion particulièrement efficace, soit parce qu'elle provient de l'augmentation rapide de la concentration d'une variable d'état par suite d'une réaction chimique au détriment d'une autre variable; l'ensemble $(-1, -1, -1, -1)$ correspond à une tache se déplaçant peu et qui disparaît peu à peu, par exemple une suspension qui sédimente sans remise en suspension; l'ensemble $(0, 0, 1, -1)$ correspond à une tache se déplaçant globalement vers l'est sans augmentation significative de son étendue; l'ensemble $(1, -1, +1, -1)$ correspondant au même phénomène, mais avec déplacement général vers le nord-est.

Toutes les combinaisons d'extension et de déplacement sont bien entendu possibles (12 en tout). Il suffit donc à chaque pas temporel où on désire calculer le déplacement de connaître un ensemble de quatre valeurs **NORD**, **SUD**, **EST** et **OUEST** pour déterminer le mouvement de la grille à cet instant. Le déplacement au cours du temps est calculé automatiquement en opérant successivement la même opération à chaque nouvelle position de la microgrille.

On a vu plus haut que chaque nouvelle conformation de la microgrille devait être superposée à une portion de la mésogrille. Chaque déplacement élémentaire est donc univoquement déterminé par les règles suivantes : une nouvelle position de la frontière nord ou sud de la microgrille doit être confondue avec une ligne de points appartenant à la mésogrille; une nouvelle position de la frontière est ou ouest doit être confondue avec une colonne de points appartenant à la mésogrille. Or on a vu précédemment que le nombre de points de la grille mobile pouvait être supérieur au nombre de points de la portion de mésogrille qui la supporte : par exemple, l'intervalle nord-sud de la microgrille peut être le tiers de l'intervalle de la mésogrille dans cette direction et l'intervalle est-ouest, la moitié de son homologue dans la mésogrille. Dans ce cas précis, cela revient à dire que l'extension vers l'est de la microgrille est obtenu en lui ajoutant deux colonnes dans cette direction, tandis que l'extension vers le nord s'obtient en lui ajoutant

trois rangées dans cette autre direction. De la sorte, le nombre de points d'intégration peut augmenter ou diminuer au cours de l'évolution (c'est le plus souvent le premier cas qui se présente). Des tests seront donc nécessaires pour détecter les éventuels dépassements de l'occupation mémoire qui provoqueraient l'arrêt des programmes. On reviendra plus loin sur ces éventualités.

2.- Détermination des variables contrôlant les déplacements

Le rôle des variables de contrôle venant d'être défini, il importe de montrer comment on leur assigne une valeur; soit à calculer la variable NORD.

On dispose sur la microgrille des valeurs de toutes les variables calculées à l'aide des algorithmes d'intégration, à l'instant $t = n \Delta T$ après le déversement.

- Première étape : On examine tout d'abord les valeurs d'une variable d'état sur la frontière intérieure de la microgrille, définie comme suit : c'est l'ensemble des points de la microgrille situé sur les lignes et colonnes de la mésogrille immédiatement intérieures au contour de la microgrille (voir fig. 20); on détermine la valeur maximum de cette variable sur ce contour, et on la divise par la valeur maximum de la même variable; si ce rapport est compris entre les bornes dont on a parlé au chapitre III, on donne la valeur 0 à NORD et on examine les autres variables; sinon, on donne la valeur 1 et on recommence l'algorithme sur une autre frontière. Si $NORD = 0$ après l'examen de toutes les variables, on passe à la

- Deuxième étape : Si on constate que sur le côté nord de la frontière intérieure, le vecteur-vitesse pointe vers l'intérieur de la grille, c'est-à-dire vers le sud, alors on pose $NORD = -1$ et on passe à l'examen d'une autre frontière; sinon on garde $NORD = 0$. La direction du vecteur-vitesse est examinée pour éviter de rétrécir la grille alors qu'il y a toutes les chances pour qu'on doive de nouveau l'élargir à l'instant suivant, à cause de la direction du courant

pendant le pas d'intégration considéré. Il est en effet préférable d'éviter des calculs d'interpolation qui doivent être exécutés lorsque la grille s'élargit (chaque fois qu'une variable de contrôle vaut + 1), comme on le verra plus loin.

Une fois que tous les côtés de l'ancien contour ont été examinés, on dispose de l'ensemble (NORD, SUD, EST, OUEST) nécessaire à la détermination du déplacement de la microgrille. L'organigramme de la figure A.1 résume l'algorithme qui vient d'être exposé.

Lorsque, à la suite de déplacements successifs, une partie du contour de la microgrille vient à se confondre avec le contour extérieur de la mésogrille confondu avec la frontière initiale de la zone à étudier, il n'est plus possible de continuer à déformer la microgrille dans cette direction, car les paramètres de la mésogrille ne sont plus définis. Il faut alors déplacer la portion de macrogrille, c'est-à-dire changer de zone à étudier. Lors de ce changement, il est nécessaire de refaire des interpolations pour calculer les paramètres aux points d'une nouvelle mésogrille. Ces calculs étant coûteux, on évite de les effectuer s'ils ne sont pas absolument nécessaires.

Par conséquent, ce n'est que lorsqu'on est bien certain que la grille se déplace de manière irréversible dans telle direction que l'on recalcule les paramètres aux points de la mésogrille : on attend donc que la variable de contrôle associée à cette direction ait été deux fois positive au moment où le contour de la microgrille est sur le contour de la mésogrille. Lors du changement de mésogrille, il faut bien entendu redéfinir la position de la microgrille; au moment de ce changement, il n'y a pas de modification de la microgrille elle-même; toute modification est postérieure et est effectuée par les algorithmes précédents.

On essaie cependant d'éviter ces calculs supplémentaires fort coûteux et on choisit la zone initiale de la macrogrille de telle manière qu'elle contienne la grille mobile pendant toute la durée souhaitée de la simulation numérique. La possibilité de déplacer la portion de macrogrille n'est introduite que pour des raisons de sécurité.

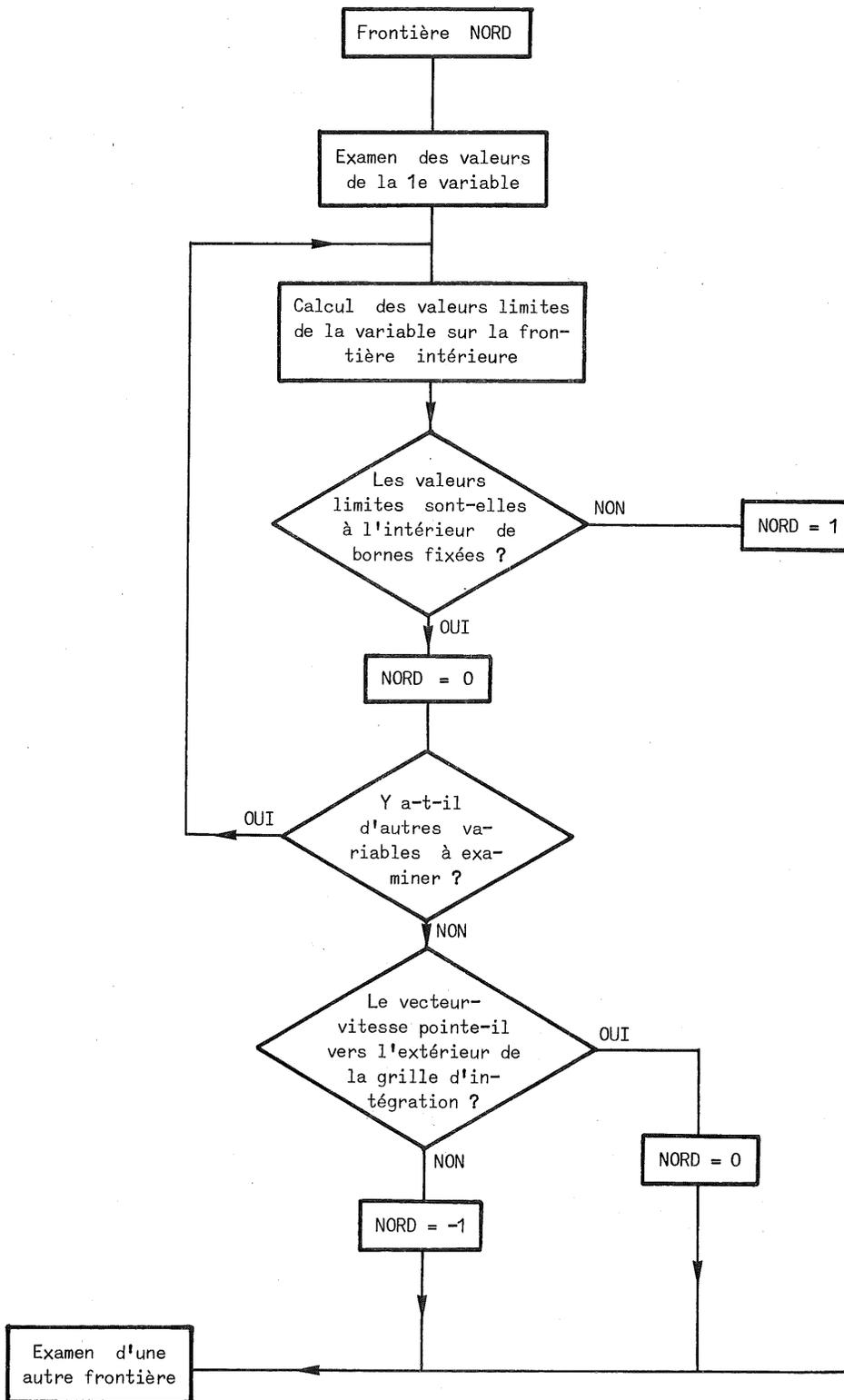


fig. A.1.

Schéma logique des tests déterminant les paramètres qui guident le déplacement des frontières de la microgrille.

3.- Transfert des variables d'état et des paramètres de grille à grille

La figure A.2 montre une succession possible de grilles mobiles. Les chiffres aux sommets de chaque grille définissent l'ordre chronologique des déplacements. Ainsi la grille dont les sommets sont indicés 1 est la grille originale, à laquelle succède la grille indicée 2. Il peut arriver que des sommets soient confondus (ex.: 1-2 au coin nord-est de la grille originale).

On peut vérifier que

- pour passer de 1 à 2, on a engendré un ensemble de variables de contrôle

$$(0, -1, 0, -1),$$

- pour passer de 2 à 3

$$(1, -1, 1, -1),$$

- pour passer de 3 à 4

$$(-1, 1, 1, -1).$$

Cependant, il ne faut pas oublier que ces grilles sont des supports de valeurs numériques des variables d'état et des paramètres décrivant un phénomène de dispersion au cours de son évolution et que ces valeurs sont utilisées pour l'intégration numérique des équations d'évolution.

Lorsqu'une grille succède à une autre comme support de ces valeurs, elle doit donc conserver la partie significative (au sens défini paragraphe 5, chapitre III, deuxième partie) de l'évolution antérieure. Les variables et paramètres se trouvant dans la partie commune aux deux grilles doivent donc être transférés d'une grille à la suivante. Quant aux variables situées dans les parties non communes, elles ont des valeurs non significatives; en effet, si on reprend l'exemple de la figure A.3 et plus particulièrement le passage de la grille 2 à la grille 3, on se rappelle que si OUEST = -1 et SUD = -1, c'est que les valeurs des variables situées dans la frange sud-ouest étaient comprises entre les bornes définies, car les valeurs situées sur les côtés sud et ouest du contour et de la frontière intérieure l'étaient; d'autre part, le fait que NORD = 1 et EST = 1 signifie que les valeurs viennent de devenir significatives sur les contours nord et est. Au-delà, elles

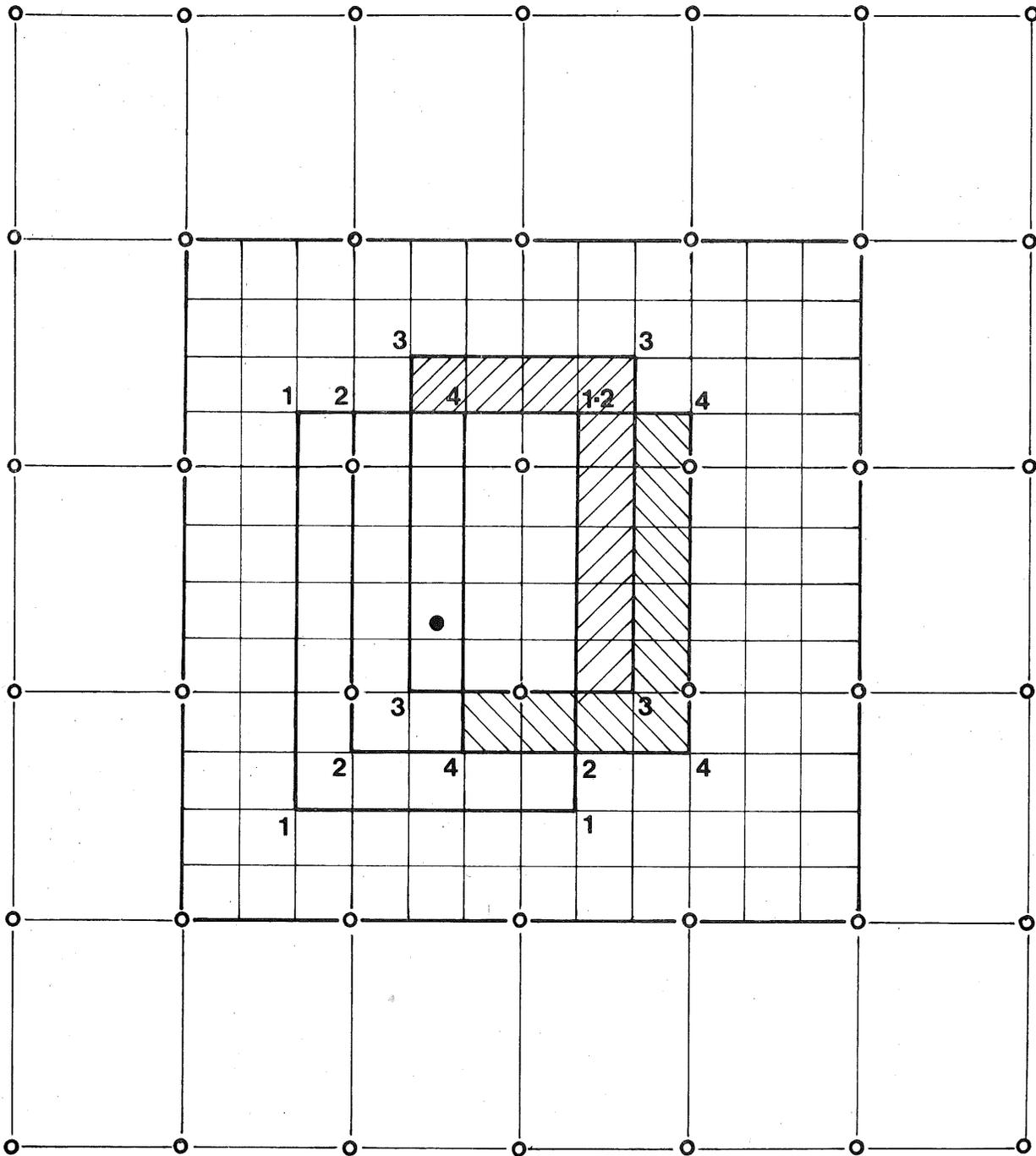


fig. A.2.

Macrogrille, mésogrille et succession hypothétique des microgrilles. Les chiffres aux coins des microgrilles définissent l'ordre chronologique de celles-ci. Le point noir représente un point de déversement hypothétique.

ne le sont pas encore et on peut supposer qu'elles sont identiquement nulles dans la partie non commune hachurée.

La grille sur laquelle seront effectuées les intégrations pour connaître l'état du système en $t = (n + 1) \Delta T$ est bien entendu la nouvelle microgrille, 3 dans l'exemple. Comme des calculs seront effectués également dans la partie hachurée, il faut connaître les paramètres dans cette partie. Ici il faut distinguer deux types de paramètres : les paramètres qui restent constants durant toute la durée de la simulation comme la profondeur et éventuellement les coefficients de diffusion, et ceux qui varient de pas en pas au cours du temps. Les premiers sont transférés comme les variables en ce qui concerne la partie commune, et sont interpolés à partir des données de la mésogrille dans la partie ajoutée (hachurée sur la figure); l'extension de la grille nécessite donc des calculs complémentaires pour la détermination des paramètres constants dans le temps, ce qui justifie qu'on évite de rétrécir les grilles mobiles quand on risque de devoir les agrandir à l'instant suivant. Les paramètres variables dans le temps doivent de toute façon être réinterpolés à partir de leurs valeurs instantanées aux points de la mésogrille. Ces dernières sont calculées une fois pour toutes à partir des données du modèle hydrodynamique (à l'aide d'interpolations également), au début du programme général de simulation et stockées dans une mémoire auxiliaire jusqu'au moment où on les utilise.

La figure A.3 montre un exemple de simulation théorique qui a été effectuée pour tester le bon fonctionnement des algorithmes de poursuite. On peut voir cinq microgrilles successives (distantes dans le temps de $12 \Delta T$ les unes des autres) à l'intérieur desquelles sont tracées les courbes d'isoconcentration de deux variables d'état, étiquetées de la même façon que les contours; les deux courbes en trait plein se rapportent à la première variable d'état, la courbe en tirets à la deuxième; la courbe extérieure est une courbe de valeur constante légèrement supérieure à la valeur significative (dans ce cas ci, la concentration maximum, bien que variable au cours du temps, reste toujours du même ordre de grandeur); les grilles 3, 4 et 5 ont leur frontière sud proche de la courbe extérieure d'isoconcentration : cela est dû au fait que le contour

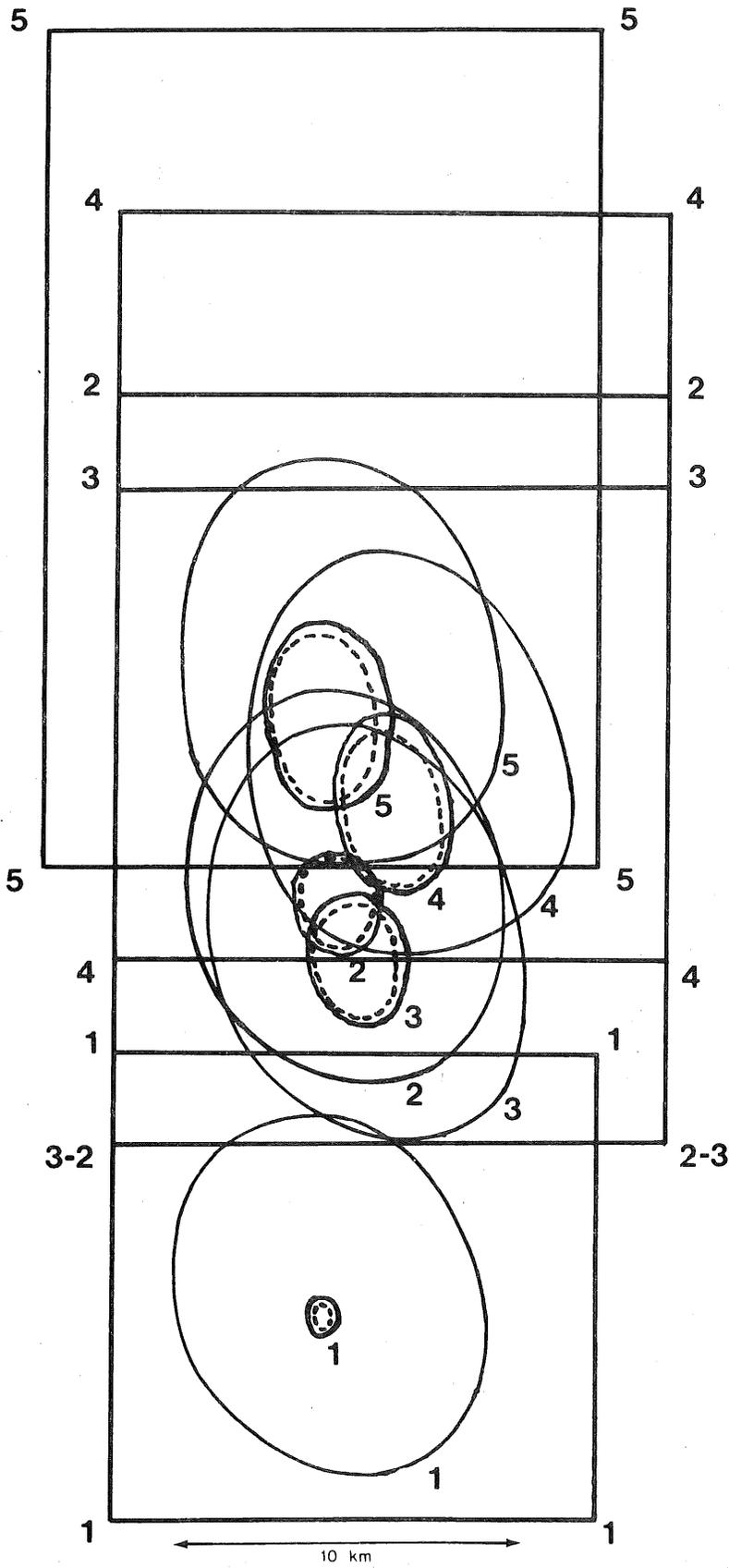


fig. A.3.

Exemple de simulation théorique d'un problème à deux variables d'état exécutée à l'aide de l'algorithme à grille mobile. Les cinq microgrilles sont séparées par des intervalles de $1/5$ de la période de marée. Les isocourbes sont étiquetées de la même façon que les contours des microgrilles correspondantes. Les courbes en trait plein sont relatives à la première variable d'état, les courbes en trait interrompu à la seconde.

a été ramené vers l'intérieur de la microgrille au pas qui précède celui où le dessin a été effectué; par contre, et c'est particulièrement visible sur les grilles 4-5, la frontière nord n'a pas été ramenée vers le centre parce que le courant pointait vers le nord au moment où les concentrations n'étaient pas significatives sur la partie nord de la frontière intérieure. Il faut remarquer, pour comprendre la différence d'éloignement relatif des frontières nord et sud par rapport à l'isocourbe extérieure, que par suite de la dispersion des modes numériques, les gradients sont plus élevés sur la face de la tache qui affronte le courant que dans la traînée de la tache : la décroissance des concentrations est donc plus douce de ce côté.

4.- Principes généraux des algorithmes de poursuite et d'intégration

On a vu que les dimensions de la grille varient au cours du temps, pour suivre au plus près la tache de polluant. On sait aussi que sur chaque réalisation de la microgrille, on définit les valeurs des diverses variables d'état qui constituent le système, ainsi que les paramètres hydrodynamiques. On désire d'autre part pouvoir simuler des déversements avec un nombre choisi, pas nécessairement toujours le même, de variables d'état.

Habituellement, lorsqu'on fait des simulations numériques d'équations aux dérivées partielles, que ce soit en hydrodynamique, en conduction de la chaleur, etc., on associe à la grille un certain nombre de tableaux (ou matrices) que l'on définit dans le programme de simulation pour contenir les variables ainsi que, éventuellement, des paramètres (une conductibilité thermique variable par exemple).

Les matrices sont de dimensions constantes au cours de la simulation et le nombre de variables est fixé par le phénomène que l'on étudie (par exemple fonction de courant et vorticité). On peut, pour la programmation, avoir recours alors aux facilités qu'offrent les langages de haut niveau, tels FORTRAN, qui permettent de définir des zones de mémoire à 2, 3 dimensions, symbolisées par des matrices à 2, 3, ... indices. Le nombre de telles matrices est fixé et immuable au cours du

déroulement du programme, du moins en FORTRAN IV, langage qui a été choisi pour l'écriture des programmes.

Dans le problème qui nous préoccupe, les dimensions des matrices de variables d'état et de paramètres se modifient au cours du temps, c'est-à-dire également au cours du déroulement du programme de simulation et le nombre de variables est dépendant du déversement à étudier; dans la mesure où on a voulu écrire un programme suffisamment général, il a fallu intégrer dans celui-ci la possibilité de simuler un nombre indéfini de variables d'état et d'utiliser des matrices de dimensions changeantes. Cela a été possible en définissant comme zones-mémoire pour accueillir ces données, des tableaux à une dimension dont l'occupation est entièrement gérée par le programme lui-même et non par le compilateur. Une telle technique procure une grande souplesse dans l'utilisation de la mémoire disponible, mais demande une logique plus complexe; le détail des séquences logiques réalisant les algorithmes ne peut être donné ici.

Il faut bien entendu, lors de chaque calcul des nouvelles dimensions de la microgrille, prendre garde de dépasser les dimensions maximales admissibles par le programme. Soit un problème à quatre variables d'état, et la possibilité de disposer en mémoire de 12000 mots pour ranger les variables d'état : chaque variable peut donc remplir 3000 mots. On vérifie tout au début de programme si cette dimension n'est pas dépassée; si c'est le cas on commence l'intégration, puis on détermine par l'algorithme décrit plus haut, le déplacement de la microgrille; on calcule alors les nouvelles dimensions. Si ces dimensions sont inférieures au maximum, on peut recommencer l'intégration; sinon on réduit, dans la mesure du possible, l'agrandissement prévu de la grille; comme une telle réduction est en contradiction avec les principes énoncés, notamment avec la notion d'encerclement au plus près, on ne l'exécute qu'une fois. Si elle doit avoir lieu une deuxième fois, cela signifie que l'extension de la tâche ne peut être simulée avec une grille aussi fine que celle qu'on a choisie et qu'il faut revoir le problème : le programme s'arrête donc et sauve les résultats, avant que le dépassement des limites des

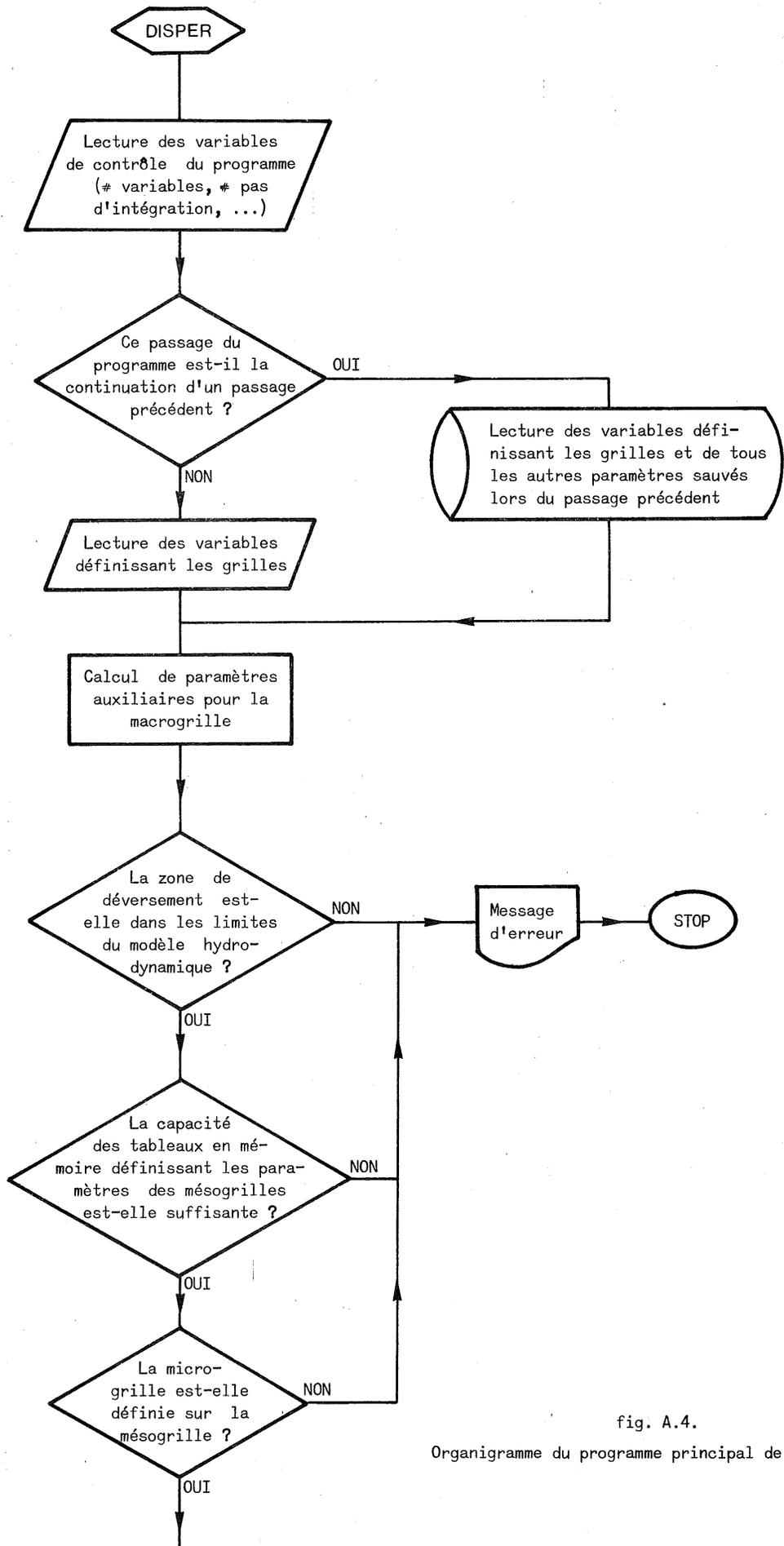
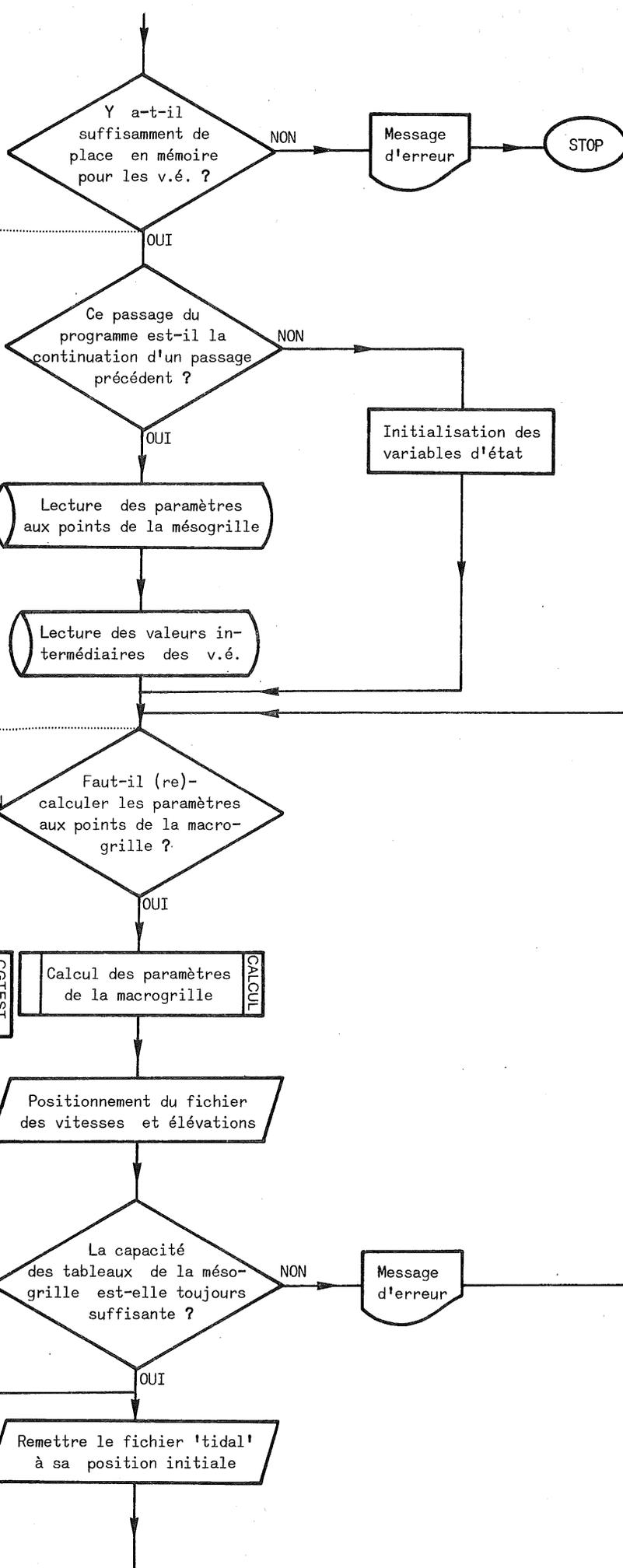


fig. A.4.

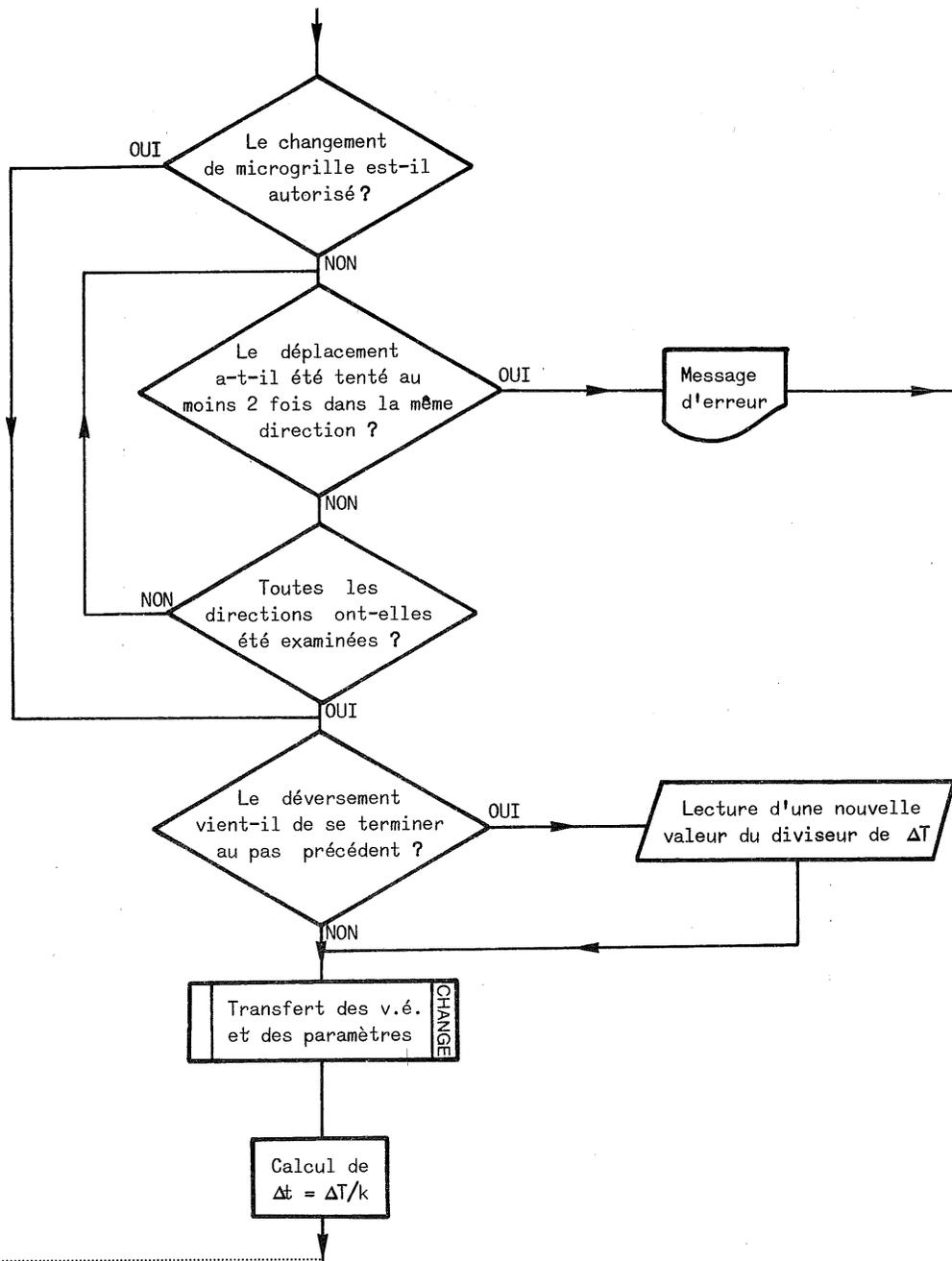
Organigramme du programme principal de simulation

PHASE D'INITIALISATION : SECONDE PARTIE

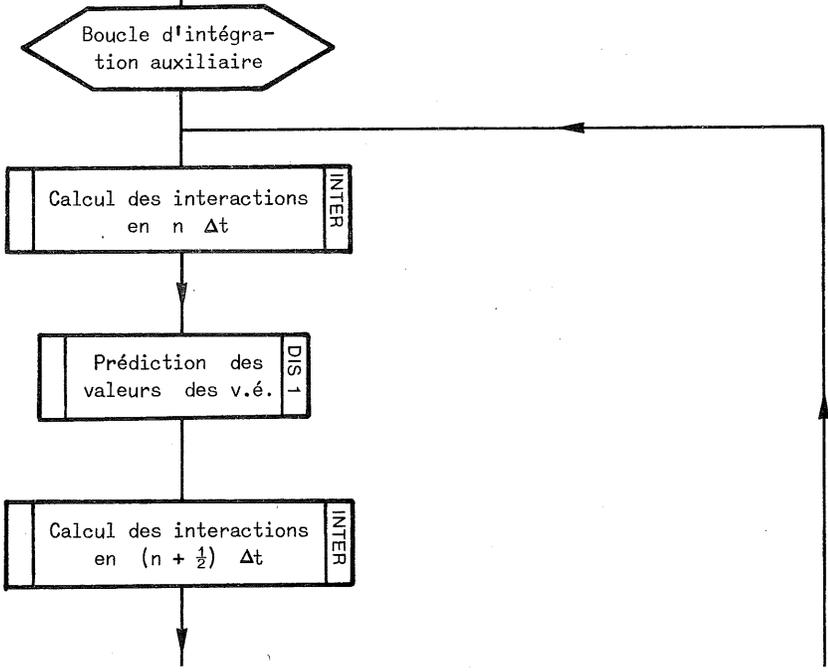
PHASE D'EVOLUTION : TRANSFERT



PHASE D'EVOLUTION : TRANSFERT



PHASE D'EVOLUTION : INTEGRATION



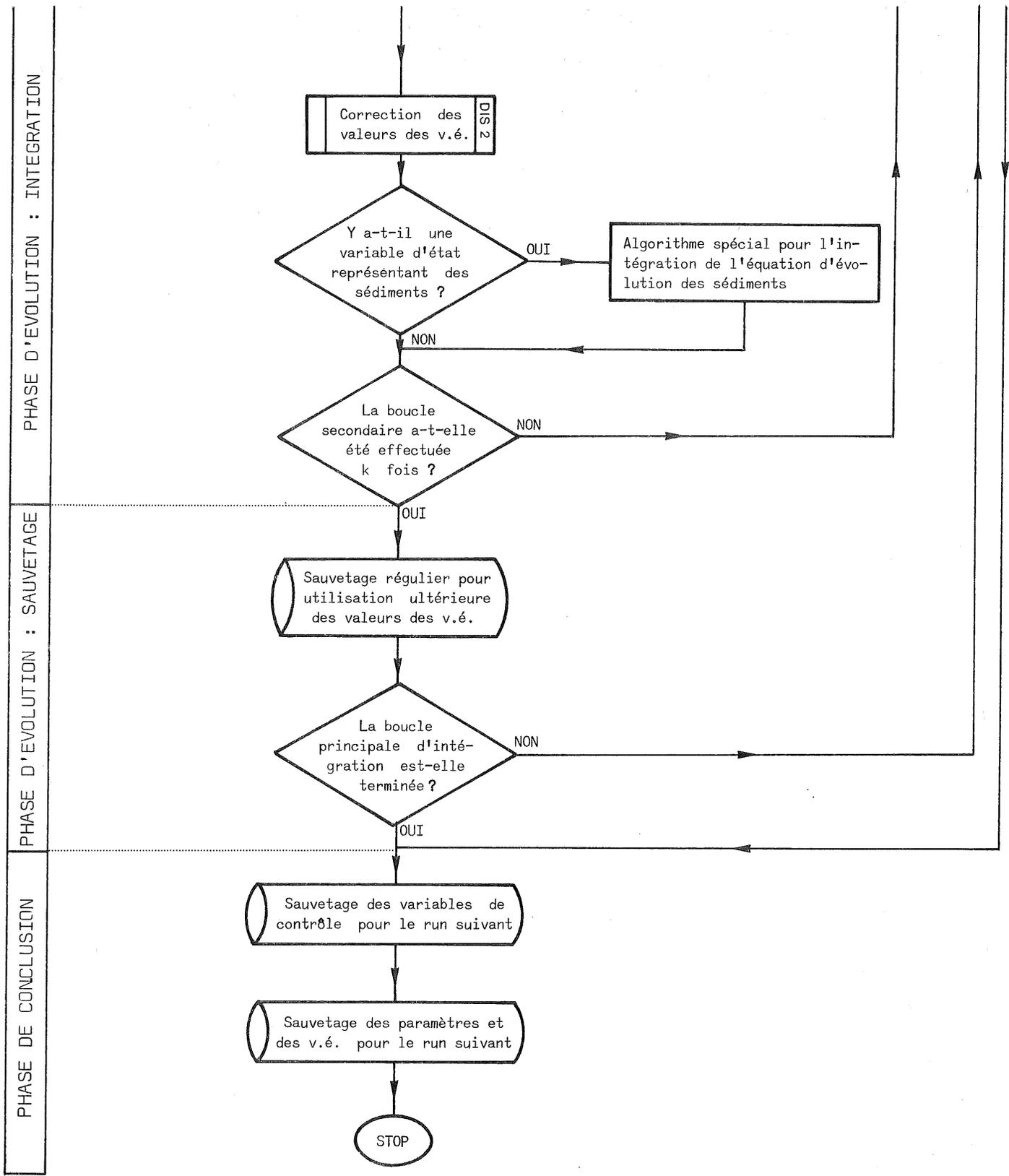


fig. A.4.

Organigramme du programme principal de simulation

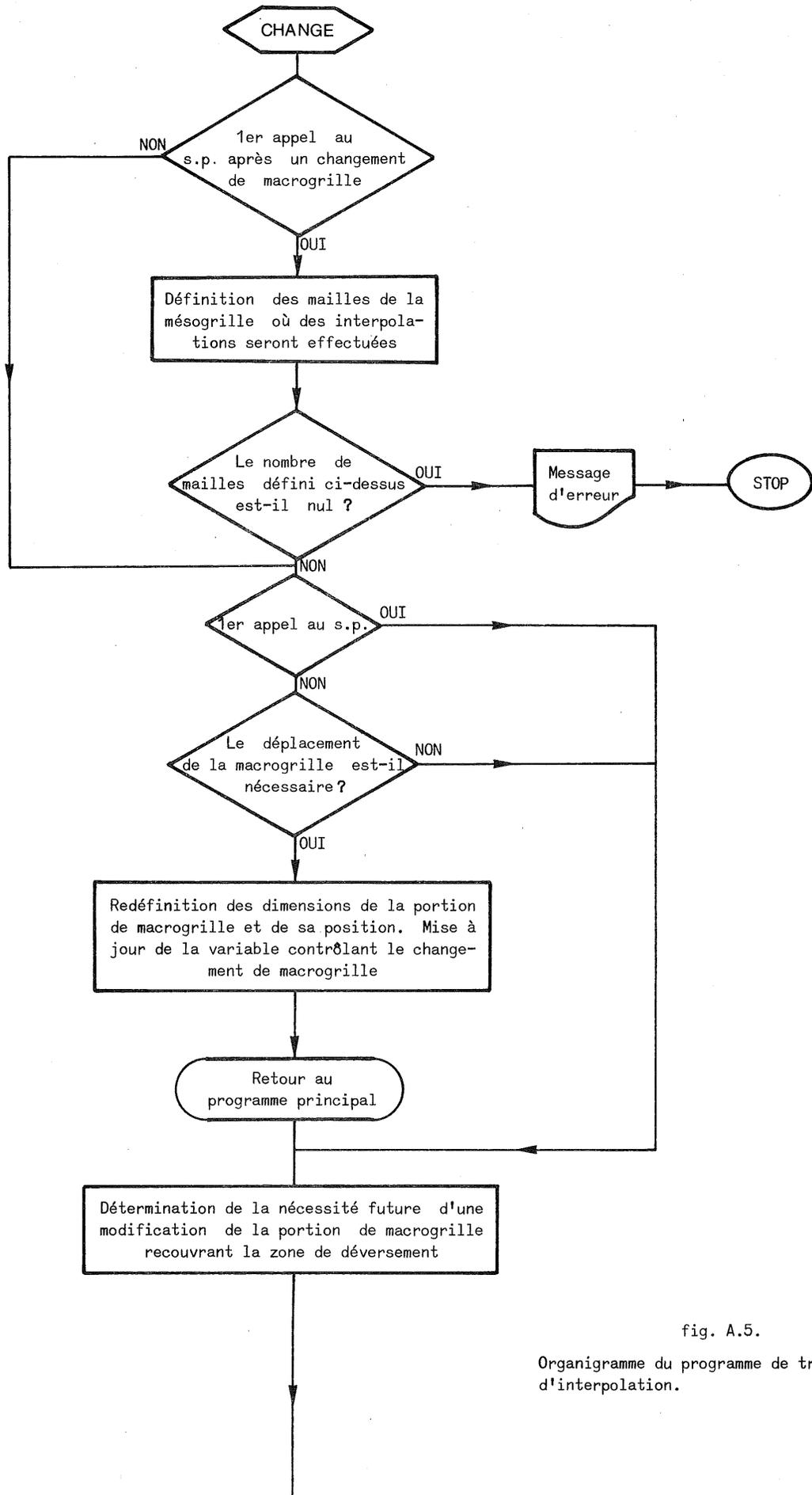
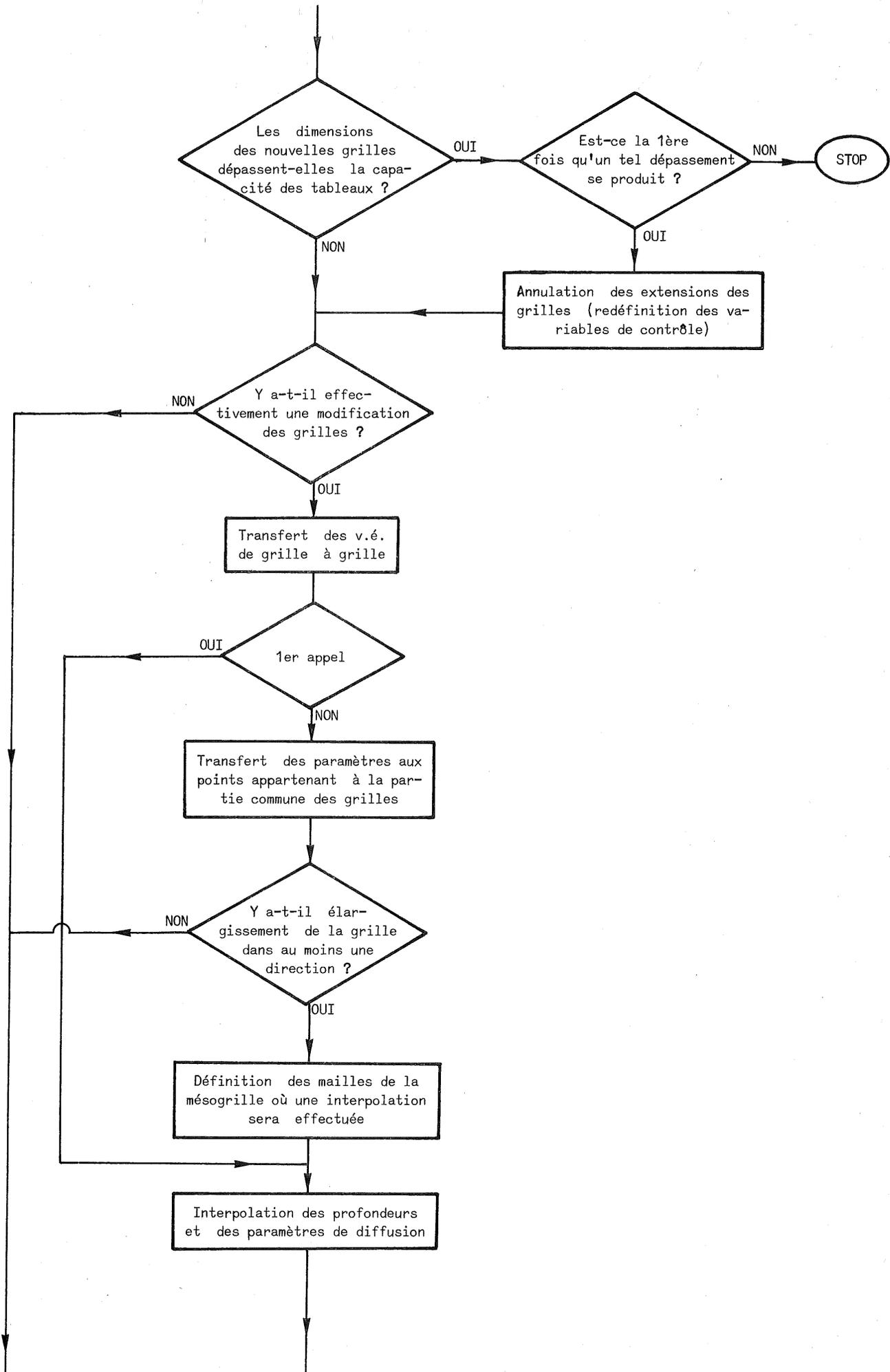


fig. A.5.
Organigramme du programme de transfert et d'interpolation.



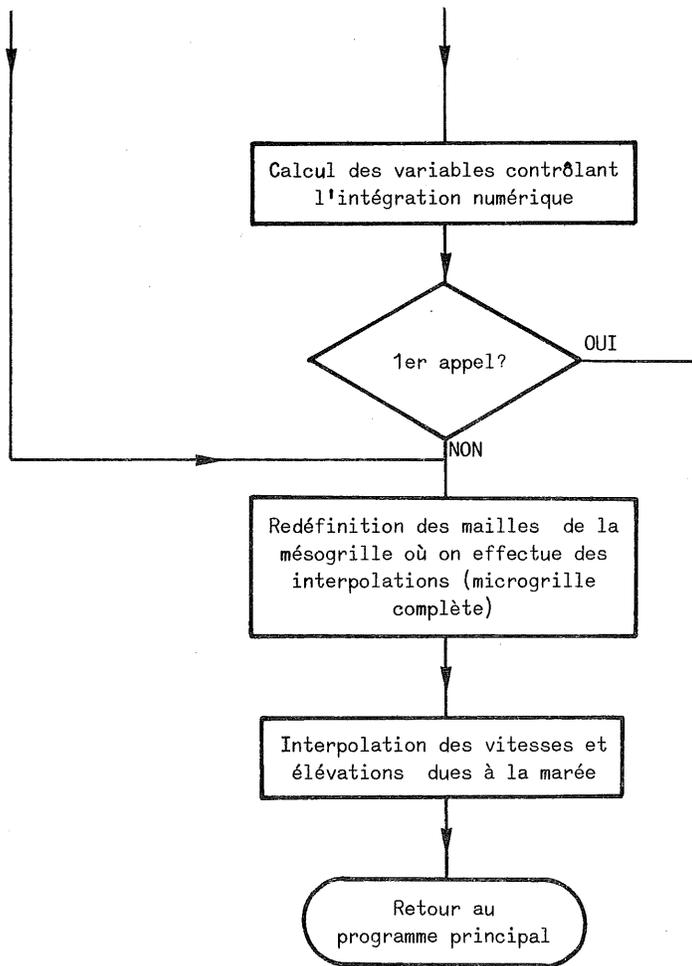


fig. A.5.

Organigramme du programme de transfert et d'interpolation

tableaux ne provoque un arrêt programmé par le système d'exploitation, arrêt qui détruirait tous les résultats déjà acquis. La structure des tests d'arrêt est assez complexe. On en trouvera la logique dans les organigrammes des figures A.4 et A.5 schématisant respectivement le programme principal de simulation et le programme de transfert des variables et paramètres.

5.- Description sommaire du programme de simulation

On va décrire ici brièvement la structure logique des programmes importants qui interviennent dans le programme général de simulation, expliquer leurs fonctions et essayer de préciser dans quelle mesure ils sont généraux ou spécifiques au problème traité. Certains programmes (la majorité) peuvent en effet être écrits une fois pour toutes et restent identiques à eux-mêmes quel que soit le déversement à simuler, d'autres doivent être réécrits chaque fois qu'un déversement de nature différente des précédents est à étudier. Avant de la présenter, il convient de décrire le programme principal, dont l'organigramme est présenté à la figure A.4.

Le programme principal comporte essentiellement trois phases :

- une phase d'initialisation,
- une phase d'évolution,
- une phase de conclusion.

5.1.- La phase d'initialisation

Elle comprend deux parties :

- la lecture sur organes extérieurs de divers paramètres, comme le nombre de variables d'état, la position de la portion de macrogrille recouvrant la zone à étudier, les dimensions de celle-ci, les dimensions de la mésogrille, la position et dimensions initiales de la microgrille et diverses autres variables de contrôle réglant la succession des opérations à réaliser par le programme de simulation;

- la lecture ou le calcul des paramètres hydrodynamiques aux points de la mésogrille et l'initialisation des valeurs des variables d'état sur la microgrille initiale. On distingue ici deux cas : ou bien le programme commence une simulation et dans ce cas, il faut calculer les ensembles de paramètres; ou bien le programme poursuit l'intégration d'un déversement déjà en cours et qui a été arrêtée pour vérifications, tests ou toute autre raison et alors les paramètres ont déjà été calculés précédemment, et peuvent être retrouvés sur des mémoires auxiliaires où ils ont été sauvés; dans ce dernier cas, il faut aussi lire les valeurs représentant l'état de déversement au moment où on reprend l'intégration.

5.2.- La phase d'évolution

C'est la phase de calcul de l'évolution du système proprement dite. Le calcul de l'évolution comprend trois parties :

i) l'intégration pas à pas des équations différentielles à l'aide des méthodes numériques décrites au chapitre II, deuxième partie. Le pas de base pour cette intégration est l'intervalle de temps ΔT entre deux ensembles de paramètres hydrodynamiques fournis par le modèle de marée, c'est-à-dire sec. Or on a vu que les pas spatiaux des microgrilles sur lesquelles on effectue les intégrations numériques pouvaient être fort petits (c'est la raison pour laquelle on a développé le concept de grille mobile); on a également calculé dans le chapitre II, deuxième partie, que la dispersion des modes numériques dépendait du paramètre $q = \frac{u \Delta T}{h}$. Si h diminue, q augmente de même que le déphasage dû à la méthode d'intégration (d'autant plus marqué que la méthode est moins précise). Donc, quand h diminue, il faut que Δt diminue, car u n'est pas contrôlable. On ne peut diminuer Δt qu'en utilisant une fraction de l'intervalle de base

$$(A.1) \quad t = \frac{\Delta T}{k}$$

où k , nombre entier, peut être calculé automatiquement par le programme de manière que

$$q \sim 1$$

ce qui est un compromis acceptable entre les exigences de la précision et le coût des calculs.

En pratique, on imposera que

$$(A.2) \quad \Delta t < \min \left(\frac{\bar{u}_1^{\max}}{h_1}, \frac{\bar{u}_2^{\max}}{h_2} \right)$$

où \bar{u}_1^{\max} et \bar{u}_2^{\max} sont les valeurs maximum de u_1 et u_2 sur la zone de déversement à un instant donné. Cette condition entraîne $q \sim 1$ et sa signification physique est la suivante : soit une distribution d'une variable d'état sur la microgrille; en supposant qu'il y a uniquement de l'advection homogène, cette distribution se déplace sans se déformer (voir la figure A.6); la condition (A.2) impose simplement que le

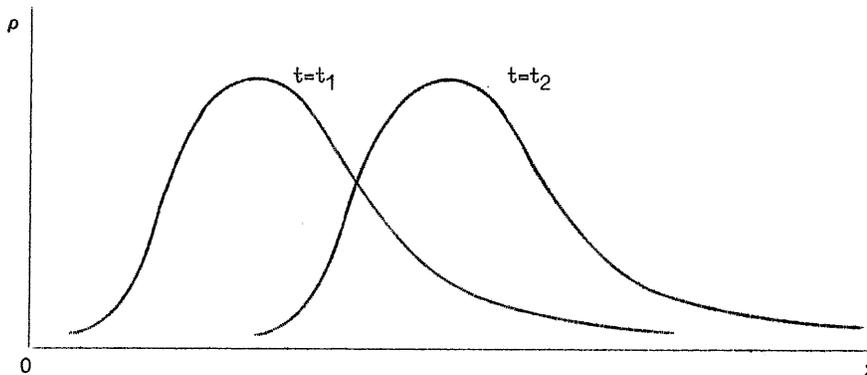


fig. A.6.

Evolution du profil de concentration d'une tache de polluant dans la direction du courant instantané sous l'effet de l'advection pure.

déplacement dans l'une ou l'autre des deux directions est inférieur au pas spatial dans cette direction. Cette condition est nécessaire pour une bonne précision; ce n'est pas une condition de stabilité; si la méthode d'intégration était conditionnellement stable par rapport aux termes d'advection, au lieu de (3.8), il faudrait imposer

$$(A.3) \quad \Delta t < \alpha \min \left(\frac{\bar{u}_1^{\max}}{h_1}, \frac{\bar{u}_2^{\max}}{h_2} \right)$$

où $\alpha \leq 1$ est déterminé à l'aide du critère de stabilité.

Une autre occasion où Δt doit être plus petit que ΔT se présente lorsque les interactions auxquelles sont soumises les variables d'état (au moins l'une d'entre elles) sont rapides; alors, la partie de l'erreur due à la discrétisation temporelle et qui est de la forme

$$(A.4) \quad O(\Delta t^2 \bar{I}_\gamma^3)$$

(où \bar{I}_γ est l'interaction la plus rapide) peut devenir très grande et supérieure aux erreurs spatiales. Dans ce cas également, il faut prendre

$$\Delta t = \frac{\Delta T}{k}$$

mais ici k ne peut être calculé automatiquement car I_γ ne peut être déterminé *a priori* par le programme; k doit être imposé par le programmeur, après estimation de la vitesse des réactions. Il ne peut y avoir conflit entre une valeur de k imposée et une valeur de k calculée (dans le cas où les deux raisons décrites pour la diminution du pas coexistent) : le programme prend par sécurité la plus grande des valeurs. Les valeurs des variables d'état connues en $n \Delta T$ peuvent donc, sous certaines circonstances, être calculées en $(n + 1) \Delta T$ à l'aide d'une série d'intégrations intermédiaires de pas $\Delta t = \frac{\Delta T}{k}$; à l'intérieur de cet algorithme auxiliaire d'intégration, il n'y a pas de modification de la microgrille, et, pour la simplicité, on suppose que les paramètres hydrodynamiques demeurent constants entre $n \Delta T$ et $(n + 1) \Delta T$. La variable k qui devient le nombre d'intégrations intermédiaires est calculée avant la mise en route de celles-ci. Les intégrations intermédiaires ne servent qu'à améliorer la précision des calculs.

ii) Le transfert des variables et des paramètres suivant la technique qui a été décrite plus haut. Ce transfert n'a lieu que tous les ΔT ; à l'occasion du transfert, on recalcule également aux points de la microgrille les paramètres qui varient de ΔT en ΔT (vitesses et élévation de marée).

iii) L'écriture sur *listing* et sur mémoires auxiliaires de résultats de l'intégration à différents moments de l'évolution (par exemple tous les ΔT , ou à une fréquence moindre). L'impression des résultats sur *listing* permet à l'analyste de vérifier la bonne marche du programme,

notamment si les changements de grille se font à bon escient, si les quantités totales de polluants évoluent logiquement (par exemple si la masse totale d'un polluant passif reste constante), etc.

Quant aux résultats sauvés dans des mémoires externes, il serviront à des analyses ultérieures, et notamment à la construction de graphiques, tracés d'isocourbes, ...

5.3.- La phase de conclusion

On passe automatiquement à la phase de conclusion dans l'un des cas suivants :

- le nombre de pas prévus pour le calcul de l'évolution a été complété;
- un quelconque des tests autorisant la poursuite des intégrations n'a pas été vérifié.

C'est notamment le cas lorsque la capacité des grilles mobiles est dépassée.

Cette phase consiste simplement à sauver toutes les variables et tous les paramètres dont le dernier état n'a pas encore été stocké sur la mémoire externe, de manière à pouvoir reprendre sans difficultés et avec le minimum de calculs, la poursuite de la simulation si besoin en est.

6.- Description sommaire des sous-programmes

Des algorithmes tels que l'intégration numérique, le calcul des interactions, le calcul du déplacement des grilles, le transfert des variables d'état et l'interpolation des paramètres sont des entités relativement indépendantes, qui pour faciliter la mise au point, sont réalisées à l'aide de sous-programmes, lesquels sont appelés à être exécutés en fonction du déroulement logique du programme principal (voir fig. A.5). Le programme principal et la plupart des sous-programmes sont indépendants du déversement à simuler. Seules l'initialisation du phénomène d'évolution et la forme des interactions doivent absolument être redéfinis pour chaque déversement.

En effet, un déversement peut avoir lieu dans une zone non polluée (dans le sens où son étendue est suffisamment importante pour considérer que son état n'est pas dû à un déversement particulier), ou bien avoir lieu dans une zone où un déversement antérieur, éventuellement de nature différente, n'est pas totalement dispersé (dans le sens où les concentrations encore présentes sont significativement différentes de ce qu'elles sont dans les zones voisines) et doit être pris en considération lors de l'initialisation. Quant aux interactions, elles dépendent des produits qu'on rejette, c'est-à-dire qu'elles sont différentes pour chaque déversement. Or il n'y a guère de forme analytique générale des interactions qu'on puisse une fois pour toutes introduire dans un programme, et où seules les valeurs numériques des coefficients devraient être modifiées. On est donc contraint d'écrire chaque fois les interactions particulières à un déversement et de les introduire dans un sous-programme; en pratique, il suffit de modifier chaque fois quelques instructions du programme, mais ceci empêche que la routine en question soit insérée définitivement dans le programme général de simulation.

Le mode de rejet varie également (par exemple selon la vitesse et le trajet du bateau), et un déversement est *rarement* ponctuel et instantané, sorte qu'on ne peut pas toujours considérer une condition initiale qui serait l'état du système juste après le déversement. Le déversement s'accomplit souvent au cours d'une période équivalente à plusieurs ΔT , et peut être scindé en "rejets partiels" (repris dans les termes \bar{S}_a dans l'équation 1.1) qui localement se comportent comme des interactions (variation significative d'une variable d'état, non à la suite d'une réaction qui la ferait apparaître ou disparaître, mais par simple addition de produits à la masse d'eau).

On en profite donc pour introduire le mode de déversement dans la routine qui calcule les interactions, puisque ce mode est lui aussi essentiellement dépendant du rejet étudié. On reviendra dans le chapitre IV sur les détails de cette technique.

Les routines d'intégration numérique ne posent pas de problème logique particulier, car il suffit de suivre la logique des formules d'intégration exposée au chapitre II, deuxième partie.

Les valeurs des variables d'état sont prédites par une routine et corrigées par l'autre. Les routines d'intégration ignorent tout des mécanismes de poursuite et travaillent comme si les grilles étaient fixes.

Il existe d'autres sous-programmes destinés notamment au positionnement des fichiers et à la mise sous forme des résultats avant l'impression sur *listing*.

Appendice II

Inlichtingsformulier

A.- Kenmerken en samenstelling van de stof

1.a. Hoeveelheid

- a. hoeveelheid per storting of lozing¹ : *60 m³*
- b. totale hoeveelheid per maand of per jaar² over een periode van vijf achtereenvolgende jaren vanaf de vermoedelijke datum van toelating : *200 m³ per maand*
- c. vooruitzichten voor de vijf daaropvolgende jaren³ : *geen uitbreiding*

b. Samenstelling⁴ :

a. op de datum van vertrek uit fabriek of stapelplaats :

- temperatuur °C
- pH
- BOD 20 °C / 5 d 0 mg/l
- COD *Niet te bepalen* mg/l
- Stoffen in suspensie *sludge* mg/l
- Bezinkbare stoffen na 2 u. *sludge* mg/l
- Vetstoffen en oliën 0 mg/l
- Detergenten (type) 0 mg/l
- Giftige stoffen (te specificeren) mg/l *zie samenstell.*
- Scheikundige stoffen (id) mg/l " "
- Kleur *Zwart*

b. op datum van laden aan boord van schip of vliegtuig :

- temperatuur *omgevingstemperatuur* °C
- pH 0 - 1
- BOD 20 °C / 5 d 0 mg/l
- COD *niet te bepalen* mg/l
- Stoffen in suspensie *sludge* mg/l

- (1) Indien een reeks van stortingen in het vooruitzicht wordt gesteld volstaat het de gemiddelde hoeveelheid aan te geven;
- (2) De aangifte moet toelaten een gebeurlijke toename in de loop van een jaar vast te stellen;
- (3) Indien mogelijk een gedetailleerde staat zoniet een globaal cijfer voor die nieuwe periode;
- (4) Zonder toevoeging van stoffen in verband met de gegevens vermeld onder B. 3 en 4;

- Bezinkbare stoffen na 2 u.	<i>sludge</i>	mg/l	
- Vetstoffen en oliën		0 mg/l	
- Detergenten (type)		0 mg/l	
- Giftige stoffen (te specificïeren)		mg/l	<i>zie samenstell.</i>
- Scheikundige stoffen (id)		mg/l	" "
- Kleur	<i>Zwart</i>		

c. vooruitzichten voor een gebeurlijke wijziging in de samenstelling⁵ :
Geen

c. Concentratie : H_2SO_4 65 % , sulfonzuren 10 à 15 % , organische stoffen 20 %

2. Vorm⁶ : *half vloeïend*

3. Densiteit : 1,6

*Door de sterke zuurconcentratie is er geen biochemische werking
Geen aanwezigheid van virussen, bacteria, gisten en parasieten.*

4. Toxiteit : *Zwavelzuur.*

In de stof als dusdanig is er geen biochemische werking.

Bij verdunning met het zeewater zullen de aanwezige organische stoffen eventueel kunnen afgebroken worden.

Geen besmetting.

(5) Een wijziging in de samenstelling brengt verval mee van de voor de aangegeven stof verleende toelating;

(6) Vast, half-vloeïend, vloeïend, gasachtig of andere.

Appendice III

Détermination et tracé d'isocourbes

La première phase du programme explore la matrice représentant la distribution d'une variable d'état en un instant donné en vérifiant si la valeur de l'isoligne est comprise entre les données de deux points successifs. Cette exploration se fait tant sur les segments du maillage parallèles à l'axe des x que sur ceux parallèles à l'axe des y .

La recherche est sautée pour tous les points auxquels on a assigné au préalable une valeur test.

Lorsque la valeur de l'isoligne se situe entre les données de deux points successifs, le programme calcule par interpolation linéaire les coordonnées exactes du point. Le balayage de la matrice terminé, le programme procède au classement des coordonnées des points. Ce travail s'effectue maille par maille. On détermine le point le plus proche du coin inférieur gauche du maillage afin d'essayer de tracer en une seule fois le segment d'isoligne le plus long possible.

Avant de rechercher le deuxième point, il faut s'assurer que, sur le pourtour de cette première maille, il ne reste plus de points à prendre en considération. Sans quoi, il faut ajouter dans les vecteurs des coordonnées le point original du tracé afin de pouvoir effectuer la liaison entre le dernier point et l'origine du tracé lorsqu'il s'agit d'une courbe fermée ou de continuer le tracé dans la direction opposée au sens de départ si le travail a débuté au milieu d'un segment d'isoligne.

Pour effectuer les liaisons successives, le programme balaie la maille considérée et dénombre les points appartenant à l'isoligne. S'il y a deux points, on les joint en rangeant dans les vecteurs résultat les coordonnées de ces points et ce, dans l'ordre logique de liaison. On poursuit le travail en traitant toujours la maille à laquelle appartient le dernier classé.

S'il y a plus de deux points sur le pourtour de la maille, il faut que l'isoligne englobe toute la région de valeur égale, ou supérieure, à l'isoligne. Pour déterminer le sens de la jonction à l'intérieur de la maille, on se base sur le fait que deux liaisons ne peuvent se couper à l'intérieur d'une même maille, sur certaines valeurs de concentrations environnantes et sur la valeur du point central de la maille.

Cependant, si le dernier point joint se situe sur un noeud du maillage, toutes les règles de jonction se résument à déterminer, parmi les quatre mailles entourant le noeud, celle qui ne contient plus qu'un seul point sur son pourtour.

Toutefois, si l'on arrive dans une maille où il ne reste plus aucun point appartenant à l'isoligne, le programme revient dans la dernière maille traitée. Il la réexplore. S'il reste encore des points, le traitement continue. Il s'agissait simplement du passage par un maximum ou un minimum. Par contre, s'il ne reste plus de points, on a atteint la limite d'une courbe. On vérifie si tous les points contenus dans les vecteurs de départ ont bien été traités. Dans ce cas, on passe au tracé de l'isoligne suivante, sinon on reprend le traitement du reste du vecteur en transmettant au sous-programme de dessin les coordonnées déjà classées.

On poursuit le travail jusqu'à ce que toutes les isolignes soient tracées.

Bibliographie

- ADAM, Y., (1975). A hermitian finite difference method for the solution of parabolic equations, *Comp. and Math. with Appl.*, 1, 3, 393.
- ADAM, Y., (1976). A predictor-corrector method for the simulation of sea pollution, *J. Inst. Math. Appl.*, 18.
- ADAM, Y., (1977). Highly accurate compact implicit methods and boundary conditions, *J. Comput. Phys.*, 24.
- BELLA, D.A. and DOBBINS, W.E., (1968). Difference modelling of stream pollution, *J. San. Eng. Div., ASCE*, 94, 995.
- BOWDEN, K.F., (1965). Horizontal mixing in the sea due to a shearing current, *J. Fluid Mech.*, 21, 83.
- BROOKS, N.H., (1959). Diffusion of sewage effluent in an ocean current, in *Waste disposal in the marine environment*, (E.A. Pearson, Ed.), Pergamon Press, New York.
- CARTER, H.H. et OKUBO, A., (1965). A study of the physical processes of movement and dispersion in the Cape Kennedy area, *Chesapeake Bay Inst., The John Hopkins Univ. Rep. Ret.*, 65.
- CHENG, S.I. et CHEN, J.H., (1972). Finite difference treatment of strong shocks over a sharp leading edge with Navier-Stokes equations, *Proceedings of the Third International Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics*, Paris, Springer, Berlin.
- CHEVEREAU, G., (1974). Mathematical model for oxygen balance in rivers, in *Models for environmental pollution control*, (R.A. Deininger, Ed.), Ann Arbor Science Publ., Ann Arbor.
- CHU, C.K., MORTON, K.W. et ROBERTS, K.V., (1972). Numerical studies of the heat equation with highly anisotropic tensor conductivity, *Proceedings of the Third International Conf. on Numerical Methods in Fluid Mechanics*, Paris, Springer, Berlin.
- COLLATZ, L., (1960). *The numerical treatment of differential equations*, (3rd edition), Springer Verlag, Berlin.

- CRANK, J., (1975). Finite difference methods in *Moving Boundary Problems in Heat Flow and Diffusion* (J.R. Ockendon, W.R. Hodgkins, Eds.), Clarendon Press, Oxford.
- DE CLERCK, R., VAN DE VELDE, J., VYNKE, V., (1972). On the effects of dumped organic industrial waste on density distribution and quality of fish and shrimps, *Fisheries Research Station Ostende, Rep. Biol. 01*.
- DRESNACK, R., DOBBINS, W.E., (1968). Numerical analysis of BOD and DO profiles, *J. San. Eng. Div., ASCE*, 94, 789.
- DUGDALE, R.C., WHITLEDGE, T., (1970). Computer simulation of phytoplankton growth near a marine sewage outfall, *Rev. Intern. Oceanogr. Med.*, 17, 201.
- ELLISON, T.H., (1957). Turbulent transport of heat and momentum from an infinite rough plane, *J. Fluid Mech.*, 2, 456.
- EPSTEIN, B., (1962). *Partial differential equations*, McGraw Hill, New York.
- FAO (1972). *Summary report of the Working Group on the scientific basis for disposal of waste into the sea*, FAO, Rome.
- GARABEDIAN, L., (1964). *Partial Differential Equations*, Wiley, New York.
- GARRELS, R.M., MACKENZIE, F.T., (1972). *Evolution of Sedimentary Rocks*, Wiley, New York.
- GORENFLO, R., (1970). Nichtnegativitäts und substanzerhaltende Differenzenschemata für lineare Diffusionsgleichungen, *Num. Math.*, 14, 448.
- HARLEMAN, C.R.F., CHEK HUNG LEE, HALL, L.C., (1968). Numerical studies of unsteady dispersion in estuaries, *J. San. Eng. Div., ASCE*, 94, 897.
- HAMMING, R.W., (1962). *Numerical Methods for Scientists and Engineers*, McGraw Hill, New York.
- HIRSCH, C., (1975). Methods of analysis of water quality simulation models in *Computer Simulation of Water Resources Systems*, (G.C. Vansteenkiste, Ed.), North Holland, Amsterdam.
- HIRSCH, R.S., RUDY, D.H., (1974). The role of diagonal dominance and cell Reynolds number in implicit difference methods for fluid mechanics problems, *J. Comput. Phys.*, 16, 3, 304.

- HIRSCH, R.C., (1975). Higher order accurate difference solutions of fluid mechanics problems by a compact differencing technique, *J. Comput. Phys.*, 19, 1.
- JOSEPH, J., SENDNER, H., (1958). Uber die horizontale Diffusion im Meere, *Dtsch. Hydrog. Z.*, 11, 49.
- KREISS, H.O., (1972). Comparison of accurate methods for the integration of hyperbolic equations, *Tellus*, 24, 199.
- KULLENBERG, G., (1972). Apparent horizontal diffusion in a stratified vertical shear flow, *Tellus*, 24, 1, 17.
- KULLENBERG, G., (1974). Investigations on dispersion in stratified vertical shear flow, Physical processes responsible for the dispersal of pollutants in the sea, *Rapp. P.V. Réunion. Cons. Int. Expl. Mer*, 167, 86.
- LAGER, J.A., TEHOBANOGLIOUS, G., (1968). Effluent disposal in South San Francisco Bay, *J. San. Eng. Div., ASCE*, 94, 747.
- LEBON, G., LAMBERMONT, J., (1974). Erosion of cohesive soils, *Progress Report N40, Projet Mer*, Ministère de la Programmation de la Politique Scientifique, Bruxelles.
- LEENDERTSE, J.J., (1967). *Aspects of a computational model for long period water wave propagation*, RM 5294 PR, Rand Corporation, Santa Monica.
- LEENDERTSE, J.J., (1975). *A water quality simulation model for well mixed estuaries and coastal seas*, The New York City Rand Institute, 1974, NYC.
- McKEE, S., MITCHELL, A.R., (1971). Alternating direction methods for a system of parabolic equations in two space dimensions with a mixed derivative, *J. Inst. Math. Applics.*, 8, 376.
- MARCHUK, G.I., (1970). *Méthodes numériques pour la prévision du temps*, Armand Colin/Interscience, Paris.
- MATH. MODELSEA, (1971). *Modèle Mathématique - Rapport de Synthèse I*, Programme national sur l'Environnement physique et biologique, Pollution des Eaux, Projet Mer; Commission Interministérielle de la Politique Scientifique, Bruxelles.
- MATH. MODELSEA, (1972). Fisheries Improvement and Hydrography Committee, International Council for the Exploration of the Sea, E9.
- MATH. MODELSEA, (1973). Fisheries Improvement and Hydrography Committee, International Council for the Exploration of the Sea, E19.

- MATH. MODELSEA, (1974). Fisheries Improvement and Hydrography Committee, International Council for the Exploration of the Sea, C:1.
- MATH. MODELSEA, (1975). Fisheries Improvement and Hydrography Committee, International Council for the Exploration of the Sea, C:21.
- MATH. MODELSEA, (1976). Projet Mer — Rapport Final (11 vol.), Services du Premier Ministre, Programmation de la Politique Scientifique, Bruxelles.
- MITCHELL, A.R., (1969). *Computational methods in partial differential equations*, Wiley, London.
- MITCHELL, A.R., FAIRWEATHER, G., (1964). Improved forms of the alternating direction method of Douglas, Peacemen and Rachford for solving parabolic and elliptic equations, *Num. Math.*, 6, 285.
- MOLLOWNEY, B.M., (1976). Solution of the advective diffusion equation by the method of moving coordinates system with particular reference to the modelling of estuarine pollution in *Mathematical Models for Environmental Problems*, (C.A. Brebbia, Ed.), Pentech Press, London.
- NIHOUL, J.C.J., (1972a). Shear effect diffusion in shallow open seas, *Bull. Soc. R. Sci. Liège*, 9, 521.
- NIHOUL, J.C.J., (1972b). Hydrodynamical and biochemical state variables and evolution equations for the mathematical modelling of sea pollution, *Mém. Soc. R. Sci. Liège*, 6, 2; (Proceedings of the 3rd Liège Colloquium on Ocean Hydrodynamics (ed. J.C.J. Nihoul).
- NIHOUL, J.C.J., (1974). Interactions at the boundaries as a handicap to modelling, *Mém. Soc. R. Sci. Liège*, 7, 6.
- NIHOUL, J.C.J., (1975). *Modelling of Marine Systems*, Elsevier, Amsterdam.
- NIHOUL, J.C.J., ADAM, Y., (1975). Dispersion et sédimentation autour d'un point de déversement en mer peu profonde, *J. Hydr. Res.*, 13, 2, 171.
- NIHOUL, J.C.J., RUNFOLA, Y., (1973). Coefficients of shear effect dispersion in the Southern Bight, *Progress Report N33, Projet Mer*, Ministère de la Programmation de la Politique Scientifique, Bruxelles.
- NOVIKOV, E.A., (1958). Concerning turbulent diffusion in a stream with a transverse gradient of velocity, *J. Appl. Math. and Mech.*, 22, 576.
- OKUBO, A., (1971). Oceanic diffusion diagrams, *Deep Sea Research*, 18, 789.

- ORLOB, G.T., (1974). Introduction to simulation techniques, in *Models for Environmental Pollution Control*, *op. cit.*
- ORSZAG, S.A., ISRAELI, M., (1974). Numerical simulation of viscous incompressible flows, in *Annual Review of Fluid Mechanics* (Van Dyke, Ed.) Annual Review Inc., New York.
- OWEN, M.W., ODD, N.V.M., (1970). *Proc. Int. Conference on Utilisation of Tidal Power*, Halifax, N.S. Department of Energy, Mines and Resources, Ottawa, Canada.
- PODAMO, J., (1975). in *Math. Modelsea*, *op. cit.*
- PRITCHARD, D.W., CARPENTER, J.H., (1960). Measurements of turbulent diffusion in estuarine and inshore waters, *Bull. Int. Assoc. Sci. Hydrol.*, 20, 37.
- PUCCI, C., (1958). *Some topics in parabolic and elliptic equations*, Univ. of Maryland Inst. Fluid Dynamics and Applied Maths. Lect. Series, 36.
- RICHTMEYER, R.D., MORTON, K.V., (1967). *Difference methods for initial value problems*, Wiley Interscience, New York.
- RONDAY, F., (1976). *Modèles hydrodynamiques de la mer du Nord, Circulations transitoires et résiduelles*, Thèse de doctorat en sciences appliquées.
- RUBIN, S.B., GRAVES, R.A.Jr., (1974). A cubic spline approximation for problems in fluid mechanics, *NASA TR R-436*, Washington, D.C.
- RUBIN, S.G., GRAVES, R.A.Jr., (1975). Viscous flow solution with a cubic spline approximation, *Computers and Fluids*, 3, 1.
- RUTHERFORD, J.C., O'SULLIVAN, M.J., (1974). Simulation of water quality in Tarawera River, *J. Env. Eng. Div., ASCE*, 99, 369.
- SKIRROW, G., (1975). The dissolved gases - Carbon Dioxide, in *Chemical Oceanography* (G. Skirrow & J.P. Riley, Ed.), Academic Press, London.
- SMITH, J.D., HOPKINS, T.S., (1972). Sediment transport on the continental shelf off Washington and Oregon in the light of recent current measurements, in *Shelf Sediment Transport*, (D.J.P. Swift, D.B. Duane & O.H. Pilkey, Eds), Dowden, Hutchinson & Ross Inc., Stroudsburg, Pa.
- STUMM, W., MORGAN, J.J., (1970). *Aquatic Chemistry*, Wiley Interscience, New York.

- TALBOT, J.W., TALBOT, G.A., (1974). Diffusion in shallow seas and English coastal and estuarine waters, in *Physical processes responsible for dispersal of pollutants in the sea*, Rapp. P.V. Réunion. Cons. Int. Expl. Mer, 167, 43.
- TAYLOR, G.I., (1954). The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe, *Proc. Roy. Soc. London* A223, 446.
- VERBOOM, G.K., (1975). The advection dispersion equation for an anisotropic medium solved by fractional step methods, in *Mathematical Models for Environmental Problems*, (C. Brebbia, Ed.), Pentech Press, London.
- VERSTRAËTE, W., VANLOOKE, R., MERCY, J., (1974). Mathematical modelling of biodegradation processes in waters and soils, in *Computer Simulation of Water Resource Systems*, *op. cit.*
- YANENKO, N.N., (1970). *Méthodes à pas fractionnaires*, Armand Colin Interscience, Paris.

DERDE DEEL

IN SITU ONDERZOEK VAN DE INVLOED VAN INDUSTRIËLE LOZINGEN
OP DE MARIENE FAUNA

door

F. REDANT, J. VAN DE VELDE en R. DE CLERCK

Hoofdstuk I

Lokalisatie van de lozingsplaatsen en organisatie van het onderzoek

De mogelijke invloed van industriële lozingen op de mariene fauna van de Thornton Bank en de Vlakte van de Raan werd op een continue wijze bestudeerd. In deze gebieden worden respectievelijk de afvalstoffen van titaandioxide produkties en organische afvalstoffen van de produktie van proteolytische enzymen geloosd.

1.- Thornton Bank

Tabel 1

Algemene karakteristieken van de lozingen op de Thornton Bank

Lozingsplaats	51°30' N - 3°00' E
Aard van de lozingsprodukten	Afvalstoffen titaandioxideproduktie
Samenstelling van de lozingsprodukten	H ₂ SO ₄ (18-25 %) ; Fe (1-2 %) ; Al (0,5-1 %) ; Mg (0,2-0,8 %) ; Ti (0,05-0,2 %) ; Va, Cr (sporen) ; In suspensie : 0-2,1 % waarvan ± 50 tot 60 % SiO ₂ , ± 20-22 % Al ₂ O ₃ en onoplosbare bestanddelen van Fe, Mg en Ca.
Lozingsritme	1500 t om de twee of drie dagen
Initiële verdunning	1 : 5000
Aanvang en duur van lozingen	Van juli 1970 tot heden
Wijze van lozen	In schroefwater van lozingschip, hierbij een achtvormige koers volgend

Tabel 1 geeft een overzicht van de algemene karakteristieken van de lozingen op de Thornton Bank.

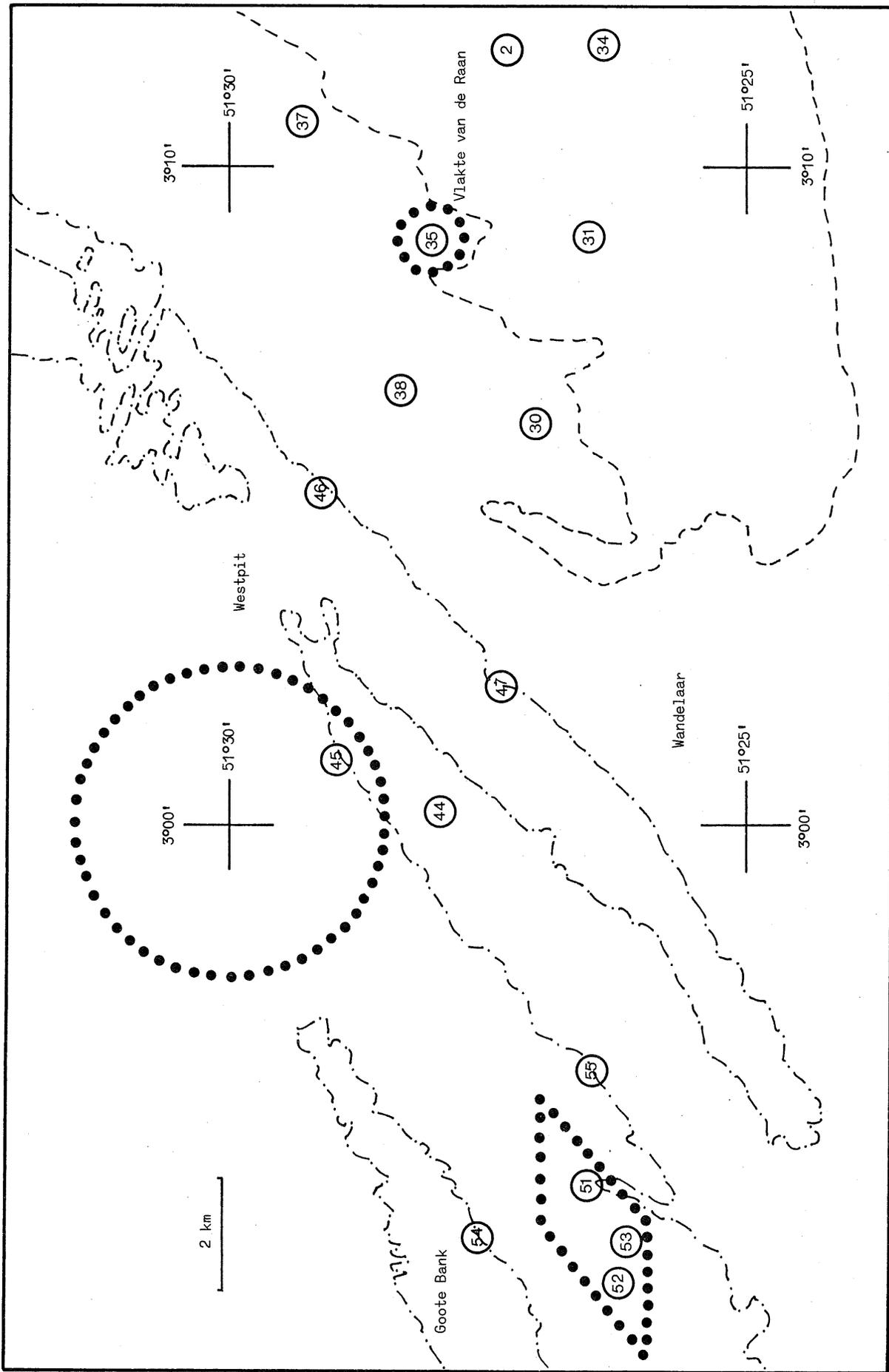


fig. 1.

Posities van de staalname-stations op de Thornton Bank (stations 44, 45, 46 en 47), op de Vlake van de Raan (stations 2, 30, 31, 34, 35, 37 en 38) en bezuiden de Gooite Bank (stations 51, 52, 53, 54 en 55). De stations 31 en 34 werden van 11-1971 tot 10-1972 bemonsterd. De stations 2, 30 en 35 werden vanaf 11-1971 bemonsterd en de stations 37 en 38 vanaf 11-1972. ●●●●● : lozingsgebied, ----- : 10 meter isobath, -·-·-·- : 20 meter isobath.

De organisatie van het onderzoek is vervat in tabel 2.

Tabel 2
Organisatie van het onderzoek

Onderwerp van het onderzoek	Aantal stations	Duur onderzoek	Frekventie staalname	Aard onderzoek
Epibenthos	4	07-73 tot heden	maandelijks	kwantitatief
Visplankton	4	01-73 tot 06-74	maandelijks	kwantitatief
Vissen	4	03-73 tot 12-74 01-75 tot heden	maandelijks tweemaandelijks	kwantitatief

2.- Vlakte van de Raan

De algemene karakteristieken van de lozingen op de Vlakte van de Raan zijn in tabel 3 opgenomen.

Tabel 3
Algemene karakteristieken van de lozingen op de Vlakte van de Raan

Lozingsplaats	51°28' N - 3°09' E
Aard van de lozingsprodukten	Afvalstoffen produktie proteolytische enzymen
Samenstelling van de lozingsprodukten	H ₂ O (61,7 %) ; Droge stof (38,3 % waarvan 56 % organische stof) ; Asbestanddelen : Ca , P , Al en S (1-5 %) ; Fe en Mg (0,1-0,3 %) ; B (30-100 ppm) ; Pb , Cu , Ti en Ga (10-30 ppm) .
Lozingsritme	± 3000 ton per jaar verdeeld over maandelijks lozingsbeurten
Aanvang en duur van lozingen	8-70 tot 8-73
Wijze van lozen	Vanuit een barkas, hierbij een achtvormige koers volgend

De organisatie van het onderzoek is weergegeven in tabel 4.

Tabel 4

Organisatie van het onderzoek

Onderwerp van het onderzoek	Aantal stations	Duur onderzoek	Frekwentie staalname	Aard onderzoek
Epibenthos	5	11-71 tot heden	maandelijks	Semi-kwantitatief van 11-71 tot 6-73 kwantitatief van 7-73 tot heden
Visplankton	5	1-73 tot 6-74	maandelijks	kwantitatief
Vissen	5	11-71 tot 12-74 1-75 tot 12-75	maandelijks tweemaandelijks	kwantitatief

Hoofdstuk II

Epibenthos

1.- Methodiek

Voor de bemonsteringen van de epibenthische fauna werd gebruik gemaakt van een otter- of boomtrawl met een minimum maaswijdte in de kuil van 18 mm . De bemonsteringen gebeurden steeds overdag. De behandeling van de vangsten, de staalname aan boord van het vaartuig, de uitgevoerde analyses en de statische verwerking van de resultaten werden in vorige rapporten reeds in extenso behandeld [Redant (1974a,b en 1975)] zodat het niet noodzakelijk is hierop terug te komen.

In deze bijdrage zullen enkel de resultaten van de analyses tot en met juni 1975 worden behandeld.

2.- Resultaten en bespreking

Het ontbreken van historische gegevens omtrent de kwalitatieve en kwantitatieve samenstelling van het epibenthos, daterend van vóór de aanvang van de lozingen, vormde een aanzienlijke handicap bij het opsporen van de eventuele gevolgen van de lozingen. De resultaten van het epibenthos-onderzoek zijn dan ook in hoofdzaak beschrijvend en maken slechts in enkele zeldzame gevallen de formulering van besluiten over de repercussies van de lozingen mogelijk.

De kwalitatieve en kwantitatieve samenstelling van het epibenthos op de Thornton Bank en op de Vlakte van de Raan wordt uitgebreid besproken in volume 7 (Faunistiek). Onderhavige bijdrage omvat een bondige samenvatting van de belangrijkste in volume 7 geformuleerde besluiten, alsmede een overzicht van de specifieke karakteristieken van het epibenthos in de beide gebieden. Bij dit laatste aspect gaat de aandacht

vooral uit naar de problemen die in verband staan met het pollutie-onderzoek.

2.1.- Thornton Bank

2.1.1.- Samenstelling van de epibenthische fauna

De epibenthische fauna van de Thornton Bank wordt volledig door de *Echinodermata*, *Asterias rubens* en *Ophiura species* gedomineerd. Gedurende de periode juli 1973 tot juni 1975 leverde deze groep een gemiddelde relatieve bijdrage van ongeveer 59 % tot de totale biomassa van het epibenthos (tabel 1). De *Decapoda* komen in dit gebied eveneens in tamelijk grote densiteiten voor, maar hun aandeel in de biomassa van het epibenthos blijft tot een gemiddelde van ongeveer 37 % beperkt. De belangrijkste vertegenwoordigers van deze groep zijn *Macropipus holsatus* en *Crangon crangon* (tabel 1).

Met uitzondering van de *Anthozoa* en *Pagurus bernhardus* zijn alle overige epibenthische taxa of species op de Thornton Bank duidelijk van veel minder kwantitatief belang (tabel 1).

De kwalitatieve en kwantitatieve samenstelling van de benthische en epibenthische fauna van de Thornton Bank wijst op de aanwezigheid van een *Abra*-levensgemeenschap [Redant (1974b en 1975)]. Deze levensgemeenschap wordt gekenmerkt door de talrijke aanwezigheid van *Abra alba*, eventueel in combinatie met *Macoma balthica* en/of *Astarte species* en/of *Echinocardium cordatum* [Blegvad (1917) en Petersen (1915, 1918 en 1924)]. De *Abra*-levensgemeenschap is typisch voor gebieden met een diepte van 10 tot 40 meter en met een zachte bodem, bestaande uit een zand-klei mengsel [Blegvad (1917); Petersen (1924) en Sparck (1935)].

De indicator-species *Abra alba* en *Echinocardium cordatum* werden op de Thornton Bank vaak in zeer grote hoeveelheden aangetroffen [Redant (1974b en 1975)]. Dit was eveneens het geval voor *Pectinaria koreni*, *Lanice conchilega*, *Ophiura species*, *Diastylis species*, *Crangon allmanni* en *Pagurus bernhardus* [Redant (1974b) en tabel 1]. Deze species zijn, naast de indicator-species, ook karakteristiek voor een dergelijke levensgemeenschap. *Astarte species* en *Macoma balthica* werden in dit gebied

Tabel 1

(overgenomen uit volume 7, partim Epibenthos)

Gemiddelde waargenomen densiteit (in gram vers gewicht per 10.000 m²) en relatieve of procentuele talrijkheid van de epibenthische organismen op de Thornton Bank en op de Vlakte van de Raan gedurende de periode juli 1973 tot juni 1975.

Groep of species	Thornton Bank		Vlakte van de Raan	
	(1)	(2)	(1)	(2)
Epibenthische Invertebrata (totaal)	16066	100,00	18261	100,00
<u>Porifera</u>	1	0,01	1	0,01
<u>Coelenterata</u>	118	0,73	556	3,04
<u>Hydrozoa</u>	104	0,65	137	0,75
Anthozoa	14	0,08	419	2,29
<u>Mollusca (uitsluitend epibenthische species) *</u>	98	0,61	175	0,96
Gastropoda *	12	0,07	30	0,17
Cephalopoda *	86	0,53	145	0,79
<u>Bryozoa</u>	17	0,10	16	0,09
<u>Arthropoda (uitsluitend epibenthische species)</u>	8532	53,11	6712	36,76
Decapoda	8521	53,04	6712	36,76
Crangon crangon (L.)	2927	18,22	2403	13,16
Pagurus bernhardus (L.) *	351	2,18	477	2,61
Macropipus holsatus (Fabricius)	5203	32,38	3622	19,83
Overige Decapoda	40	0,25	210	1,15
<u>Echinodermata (uitsluitend epibenthische species)</u>	7299	45,43	10802	59,15
Asterias rubens (L.)	2570	16,00	2680	14,68
Ophiura species	4729	29,43	8122	44,48

(1) Gemiddelde waargenomen densiteit (gram vers gewicht/10.000 m²)

(2) Relatieve of procentuele talrijkheid

* Inclusief scheelpen

nooit waargenomen. Dit zou er kunnen op wijzen dat de Thornton Bank een *Abra-Echinocardium*-levensgemeenschap herbergt. Ook de diepte van het gebied (nl. 10 tot 25 meter) en de bodemsamenstelling komen met de bibliografische gegevens overeen.

De hoge biomassa van *Annelida* en *Lamellibranchia* kan meteen ook een verklaring zijn voor de talrijke aanwezigheid van *Asterias rubens*. Op zachte bodems voedt deze species zich immers hoofdzakelijk met *Annelida* en *Lamellibranchia* [Blegvad (1915)].

2.1.2.- Associatie, diversiteit en dominantie van de Crustacea Decapoda op de Thornton Bank

Bij het onderzoek naar de invloed van de lozingen op de epibenthische fauna ging de aandacht vooral uit naar de *Crustacea Decapoda*.

De associatie tussen de *Decapoda* die op de verschillende staalnamestations voorkomen werd door middel van de Sørensen-associatie-index bepaald [Sørensen (1948)] (tabel 2) : $S = \frac{2C}{A + B}$.

Tabel 2

Waarden van de Sørensen-associatie-index voor de Decapoda van de Thornton Bank

	Stations	45	46	47
Periode 7-73 / 6-74	44	0,80	0,80	0,92
	45		0,78	0,83
	46			0,75
Periode 7-74 / 6-75	Stations	45	46	47
	44	0,92	0,86	0,83
	45		0,93	0,92
	46			0,86
Periode 7-73 / 6-75	Stations	45	46	47
	44	0,88	0,82	0,86
	45		0,74	0,88
	46			0,71

In deze formule is A het aantal species op station a, B het aantal species op station b en C het aantal gemeenschappelijke species op de stations a en b.

Uit deze resultaten blijkt zeer duidelijk dat er geen onderlinge kwalitatieve verschillen bestaan tussen de *Decapoda*-fauna's op de verschillende staalname-stations. De Sørensen-indexen verschaffen echter geen informatie over de onderlinge kwantitatieve verschillen of gelijknissen tussen de staalname-stations. Een analyse van de gegevens omtrent de densiteiten (in g/m^2) van de verschillende *Decapoda* toonde echter aan dat de belangrijkste vertegenwoordigers van deze groep homogeen verspreid zijn over de Thornton Bank.

De diversiteit van de *Decapoda* op de staalname-stations van de Thornton Bank werd aan de hand van de Shannon-Wiener-diversiteits-indexen nagegaan [Lloyd en Ghelardi (1964)] (figuur 1) :

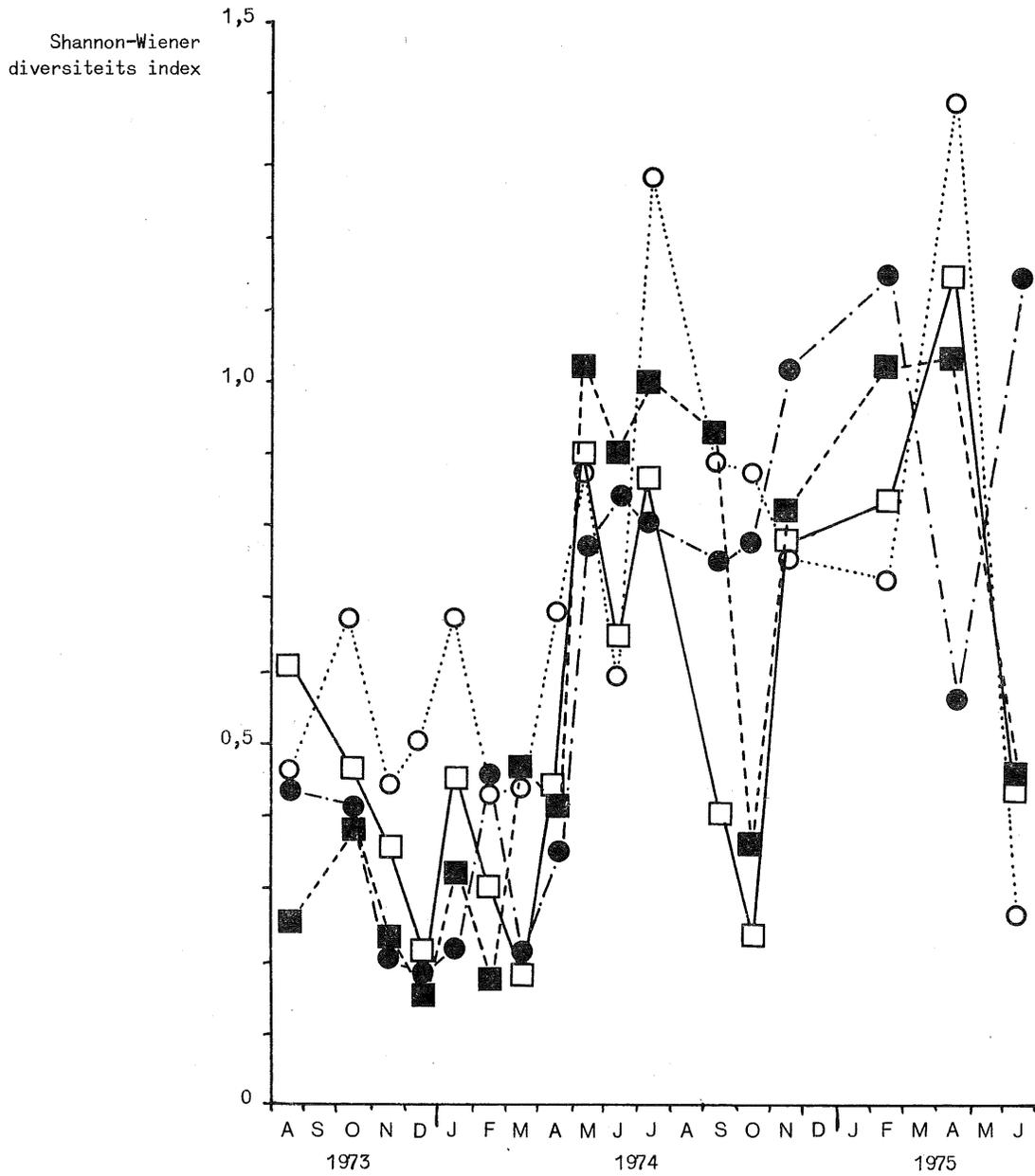
$$\bar{H} = - \sum_i \frac{n_i}{N} \ln \frac{n_i}{N} .$$

In deze formule is n_i het aantal individuen van een bepaalde species i per $1000 m^2$ en N het totaal aantal *Decapoda* per $1000 m^2$ ($N = \sum n_i$). Ter informatie werd aan de grafiek van de diversiteits-indexen (figuur 1) een tabel toegevoegd waarin het aantal waargenomen species per station is opgenomen.

De Shannon-Wiener-indexen vertonen in de periode juli 1974 tot juni 1975 gemiddeld een veel hogere waarde dan in de periode juli 1973 tot juni 1974 (figuur 1). Deze stijging is niet te wijten aan een toename van het aantal species (*cf.* tabel onder figuur 1), maar wel aan de vermindering van de dominantie door *Crangon crangon*. Dit blijkt trouwens zeer duidelijk uit het verloop van de Simpson-dominantie-indexen [Simpson (1949)] (figuur 2) :

$$d = \sum_i \left(\frac{n_i}{N} \right)^2 .$$

Hierin hebben n_i en N dezelfde betekenis als in de formule van de Shannon-Wiener-index. Deze daling in de densiteit van *Crangon crangon* is geen gevolg van de lozingen, maar wel van een intensieve predatie



	1973					1974												1975						
	A	S	O	N	D	J	F	M	A	M	J	J	A	S	O	N	D	J	F	M	A	M	J	
Aantal species per station	3	6	4	3	5	4	4	4	5	4	5	4	4	4	5	6	5	3	St. 44	□				
	5	8	4	3	3	3	5	4	5	3	5	6	5	5	5	5	5	3	St. 45	■				
	5	7	4	4	3	5	4	5	5	5	7	5	6	7	4	5	3	St. 46	○					
	4	6	2	2	3	5	4	4	4	3	4	4	5	5	4	4	4	St. 47	●					
Totaal aantal species	5	8	7	4	5	6	5	5	7	5	7	6	6	7	6	7	4							

fig. 1.

Shannon-Wiener diversiteitsindexen voor de Crustacea Decapoda op de staalname-stations van de Thornton Bank

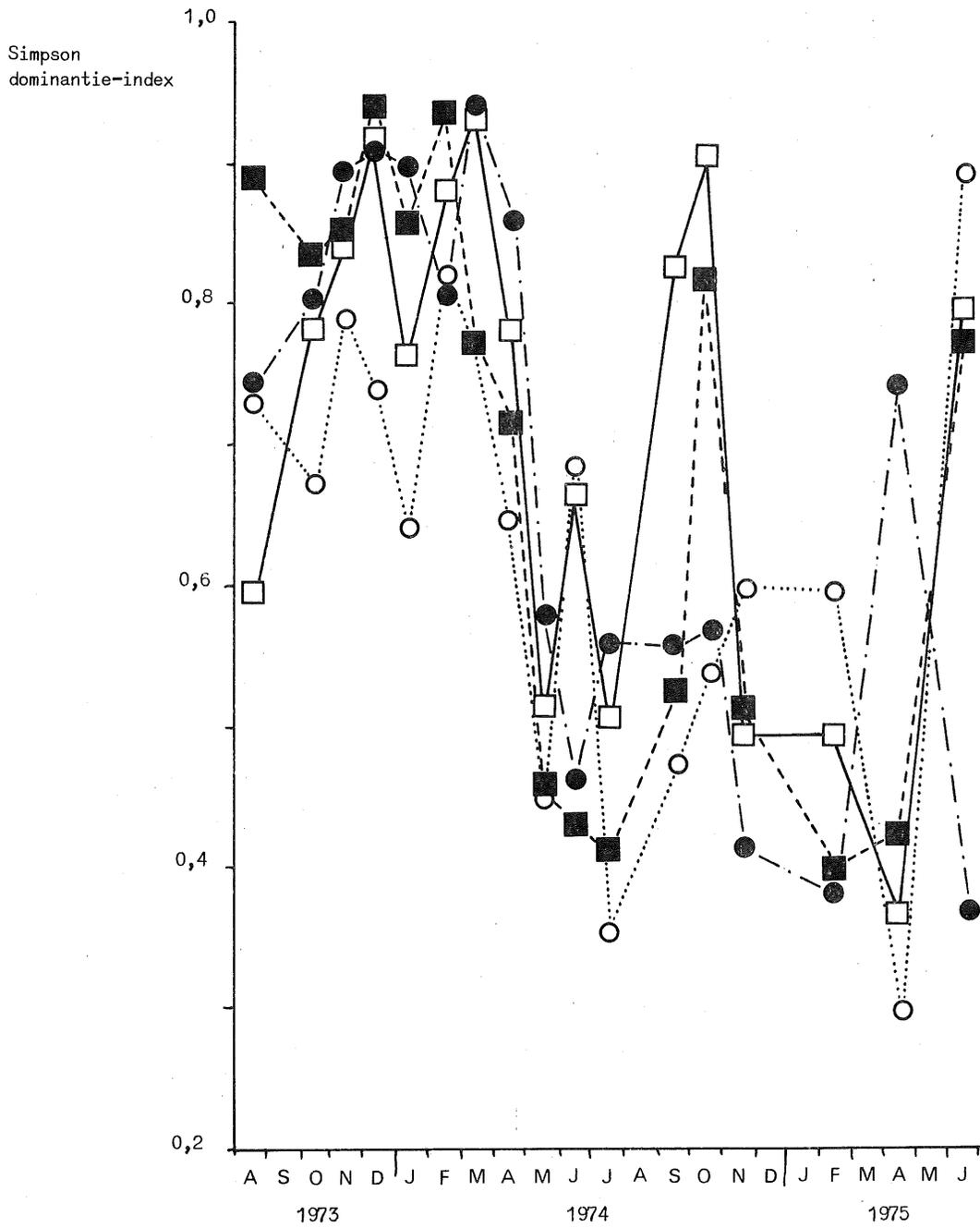


fig. 2.

Simpson dominantie-indexen voor de Crustacea Decapoda op de staalname-stations van de Thornton Bank

door *Gadus merlangus*. Dit verschijnsel werd trouwens langs de gehele Belgische kust waargenomen [Redant en De Clerck (1975)].

Geen enkel van de bemonsterde staalname-stations vertoont systems een lagere diversiteit dan de overige stations (figuur 1). Dit wijst erop dat, als de lozingen een invloed hebben op de *Crustacea decapoda*, de impact van de pollutie op alle stations van dezelfde aard en van dezelfde grootte-orde is.

2.2.- Vlakte van de Raan

2.2.1.- Samenstelling van de epibenthische fauna

Op de Vlakte van de Raan wordt de epibenthische fauna door de *Decapoda* gedomineerd. Deze groep vertegenwoordigde, gedurende de periode juli 1973 tot juni 1975, gemiddeld ongeveer 53 % van de totale biomassa van het epibenthos (tabel 1). De voornaamste *Decapoda* zijn *Macropipus holsatus* en *Crangon crangon*. Als tweede belangrijkste groep kunnen de *Echinodermata* worden vermeld, met een gemiddelde bijdrage van ongeveer 45,5 % tot de totale epibenthische biomassa (tabel 1). De voornaamste *Echinodermata* zijn *Asterias rubens* en *Ophiura species*.

Op de Vlakte van de Raan werd, net zoals op de Thornton Bank, een relatief grote biomassa van *Pagurus bernhardus* genoteerd. Alle overige taxa en species zijn in dit gebied duidelijk minoritair (tabel 1).

De resultaten van de semi-kwantitatieve analyses van de epibenthische fauna, uitgevoerd gedurende de periode november 1971 tot juni 1973 [De Clerck, Van de Velde en Vyncke (1973) en De Clerck en Van de Velde (1973)] tonen aan dat de samenstelling van het epibenthos, gedurende de lozingen, hetzelfde beeld vertoonde zoals hierboven beschreven. Na het beëindigen van de lozingen hebben zich dus geen aanzienlijke wijzigingen in de samenstelling van de epibenthische fauna voorgedaan.

2.2.2.- De evolutie van de *Crangon crangon*-populatie op de Vlakte van de Raan

Een vergelijkende studie toonde aan dat, gedurende de lozingen, de densiteit van *Crangon crangon* (in aantallen/15 minuten vissen) in

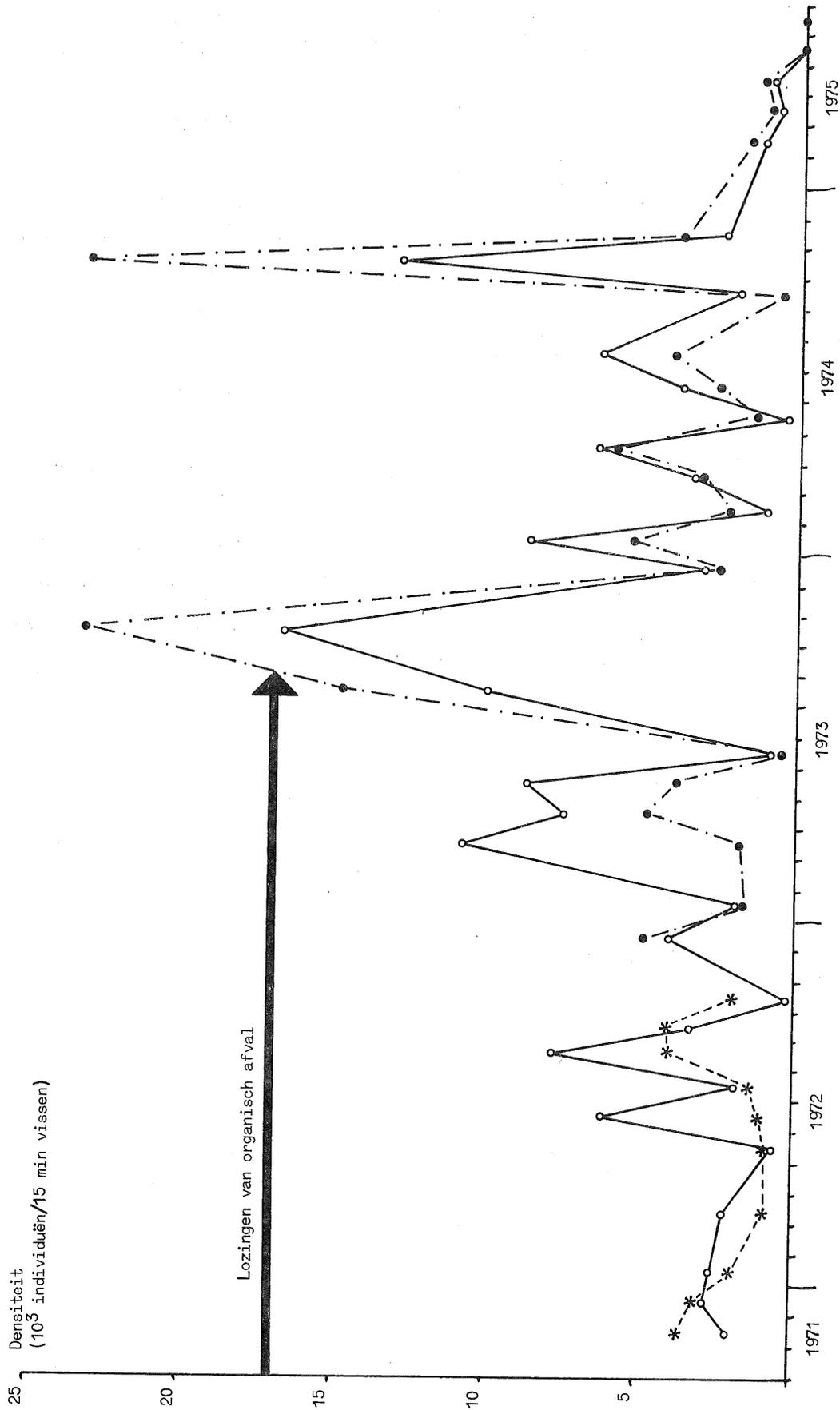


fig. 3.

Densiteit (in aantallen/15 minuten vissen) van Crangon crangon op de lozingsplaats van organisch industrieel afval op de Vlakte van de Raan (open cirkels) en op de referentie-stations ten zuiden (asterisks) of rondom (volle cirkels) de lozingsplaats (cf. fig. 1, hoofdstuk I). De gegevens tot en met juni 1973 werden aan De Clerck, Van de Velde en Vyncke (1973) en De Clerck en Van de Velde (1973) ontleend.

de lozingszone groter was dan in de referentie-zone (figuur 3) [De Clerck, Van de Velde en Vyncke (1973) en De Clerck en Van de Velde (1973)]. Deze tendens bleef, na het beëindigen van de lozingen in augustus 1973, niet bewaard (figuur 3). Hierbij dient echter opgemerkt te worden dat in de lozingszone slechts één staalnamestation werd bemonsterd tegenover vier in de referentie-zone (tabel 4, hoofdstuk I). De conclusie als zouden de lozingen van organisch afval een verhoging van de densiteit van *Crangon crangon* in de hand hebben gewerkt is, om louter statistische redenen, voorbarig. Het staat echter wel vast dat deze lozingen geen negatieve invloed hebben gehad op de populatie van *Crangon crangon*.

De lage densiteiten van *Crangon crangon* in 1971-1972 en in 1974 staan niet in verband met de lozingen, maar zijn het gevolg van respectievelijk de intensieve predatie door *Gadus morhua* [De Clerck en Redant (1974)] en de reeds eerder vermelde predatie door *Gadus merlangus* [Redant en De Clerck (1975)].

Hoofdstuk III

Viseieren en vislarven

1.- Methodiek

De staalname van het visplankton geschiedde bij middel van een Gulf-Sampler.

De stalen werden vervolgens met 4 % formol gefixeerd.

Voor nadere technische details aangaande de staalname wordt verwezen naar volume 7, hoofdstuk III.

De speciesdiversiteit van de stalen werd bepaald aan de hand van de Shannon-Wiener index [Lloyd en Ghelardi (1964)].

2.- Resultaten en bespreking

2.1.- Thornton Bank (fig. 1)

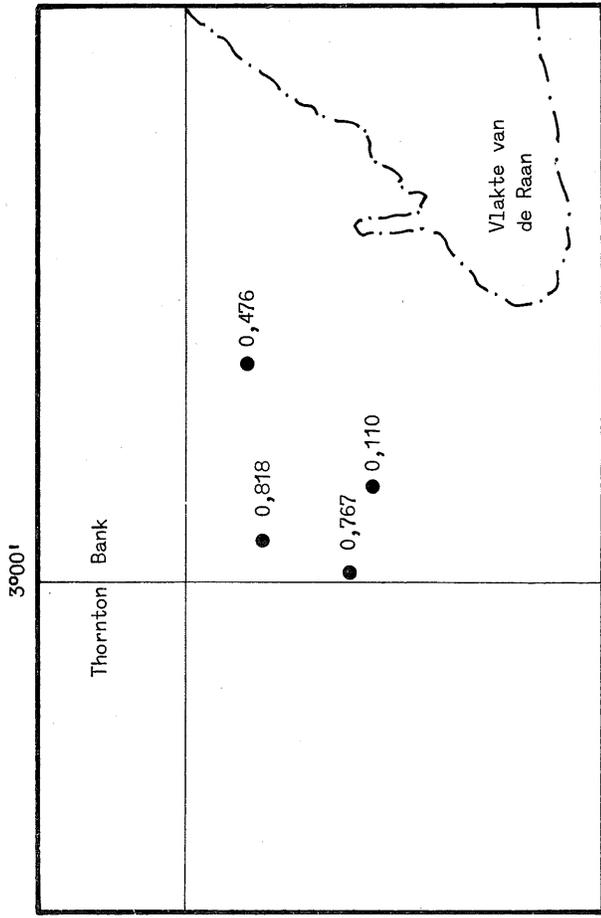
Het gebied van de Thornton werd, evenals de Vlakte van de Raan, gekenmerkt door een relatief hoog aantal sroteieren (> 90 %).

Niettegenstaande er gemiddeld per station in 1973 meer soorten eieren (5) dan larven (4) voorkwamen, lag de diversiteitsindex van de eieren toch lager dan deze van de larven.

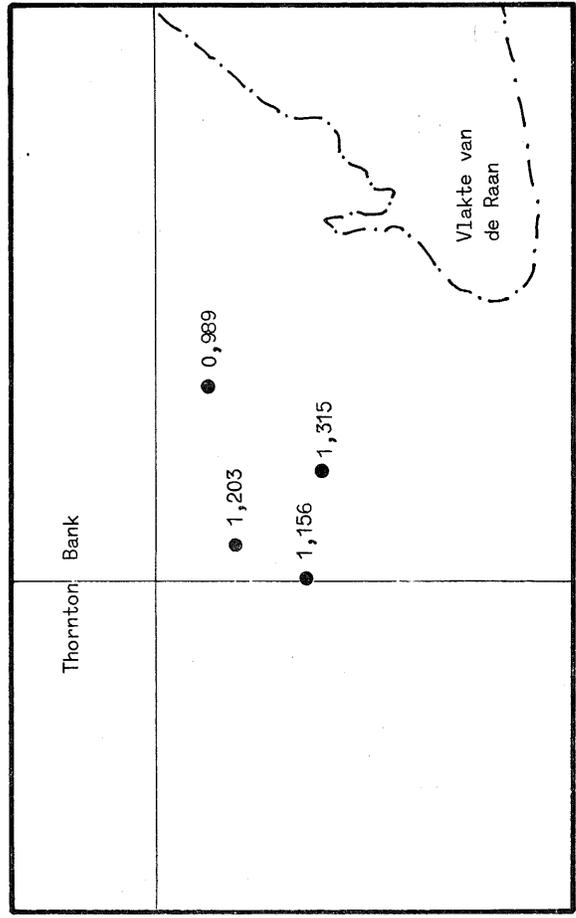
Dit verschijnsel is echter toe te schrijven aan een uitgesproken dominantie van sroteieren in 1973 (> 94 %).

De hogere diversiteitsindexen in 1974, in vergelijking tot deze van 1973, zijn het gevolg van een relatieve vermeerdering van de larven van *Pomatoschistus minutus* (Pallas) (> 22 %).

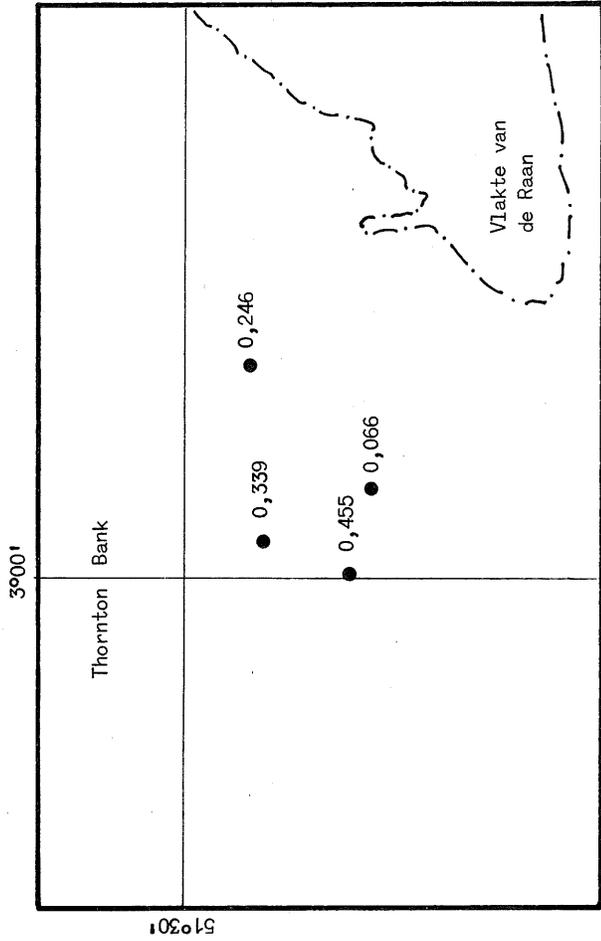
In 1974 werden ook hoge frekwenties (9 tot 27 %) *Ammodytes lancea* Cuvier genoteerd.



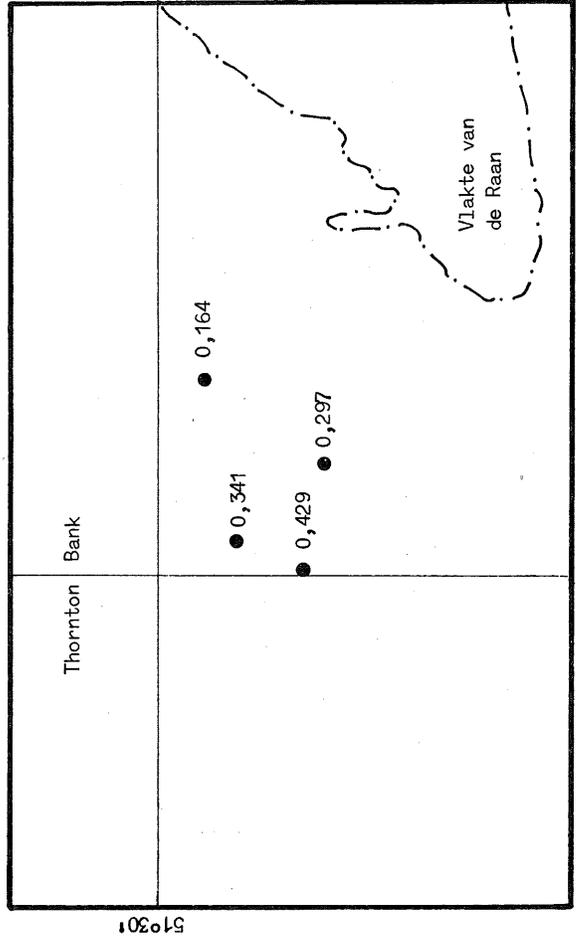
Larven - 1973



Larven - 1974



Eieren - 1973



Eieren - 1974

fig. 1.
Species-diversiteit in het gebied van de Thornton Bank

Zoals blijkt uit tabel 1 was het aandeel van eieren van *Engraulis encrasicolus* (L.) en larven van *Ammodytes lancea* Cuvier en *Solea solea* (L.) niet onaanzienlijk.

Tabel 1

Semi-kwantitatieve faunistische lijst van de species waargenomen in het visplankton op de Thornton Bank

Species	Eieren	Larven
Phylum CHORDATA		
Classis TELEOSTROMI		
Order Clupeiformes		CCD
Clupeidae		
<i>Sprattus sprattus</i> (L)	CCD	
Engraulidae		
<i>Engraulis encrasicolus</i> (L)	CC	
Gadidae		
<i>Merlangus merlangus</i> (L)	R	
<i>Onos</i> sp.	C	
Carangidae		
<i>Trachurus trachurus</i> (L)	R	C
Ammodytidae		
<i>Ammodytes lancea</i> Cuvier		CC
Callionymidae		
<i>Callionymus lyra</i> L.	RR	C
Gobbiidae		
<i>Pomatoschistus minutus</i> (Pallas)		CCD
Bothidae		
<i>Scophthalmus maximus</i> (L)	RR	
Pleuronectidae		
<i>Limanda limanda</i> (L)	R	
<i>Platichthys flesus</i> (L)	R	RR
Soleidae		
<i>Solea solea</i> (L)	R	CC

Verklaring van de symbolen :

- CCD : zeer talrijk, dominante species.
- CC : talrijk tot zeer talrijk doch niet dominant.
- C : vrij talrijk tot talrijk.
- R : vrij zeldzaam tot zeldzaam.
- RR : zeldzaam tot zeer zeldzaam.

De resultaten hebben betrekking op de periode 1973-1974. Vermits de dichtheden van eieren en larven dermate verschillend zijn, kan de vergelijking tussen de ramingen voor eieren en larven volgens deze schaal niet in absolute zin opgaan.

Aan de hand van de bekomen resultaten is het echter onmogelijk konklusies omtrent een eventuele positieve of negatieve invloed van verontreiniging te trekken.

2.2.- Vlakte van de Raan (fig. 2)

Tabel 2

Semi-kwantitatieve faunistische lijst van de species waargenomen in het visplankton op de Vlakte van de Raan

Species	Eieren		Larven	
	1973	1974	1973	1974
Phylum CHORDATA				
Classis TELEOSTOMI				
Order Clupeiformes			CCD	CCD
Clupeidae				
<i>Sprattus sprattus</i> (L)	CCD	CCD		
Engraulidae				
<i>Engraulis encrasicolus</i> (L)	R	CCD		
Gadidae				
<i>Trisopterus luscus</i> (L)			RR	
<i>Onos</i> sp.	R	R		
Syngnathidae				
<i>Syngnathus</i> sp.			RR	RR
Carangidae				
<i>Trachurus trachurus</i> (L)	RR	R	CC	R
Ammodytidae				
<i>Ammodytes lancea</i> Cuvier			CC	R
Callionymidae				
<i>Callionymus lyra</i> L.		C	R	C
Gobbiidae				
<i>Pomatoschistus minutus</i> (Pallas)			CC	CCD
Triglidae				
<i>Eutrigla gurnardus</i> (L)	RR			
Agonidae				
<i>Agonus cataphractus</i> (L)				RR
Liparidae				
<i>Liparis liparis</i> (L)			RR	
Pleuronectidae				
<i>Limanda limanda</i> (L)		R		
<i>Platichthys flesus</i> (L)	R			
Soleidae				
<i>Solea solea</i> (L)	C			

Verklaring van de symbolen : cf. tabel 1.

Vermits de dichtheden van eieren en larven dermate verschillend zijn kan de vergelijking tussen de ramingen voor eieren en larven volgens deze schaal in absolute zin niet opgaan.

De resultaten voor eieren en larven mogen niet absoluut met elkaar worden vergeleken.

Het gebied van de vlakte van de Raan werd voornamelijk gekarakteriseerd door zijn relatief belang (> 94 %) als paaiplaats voor *Sprattus sprattus* (L).

De dominantie van sroteieren resulteerde dan ook in een lage diversiteitsindex.

Gemiddeld werden per station 4 soorten eieren en 5 soorten larven aangetroffen. De inbreng van de larven van niet-pelagofiele soorten is hier de voornaamste oorzaak.

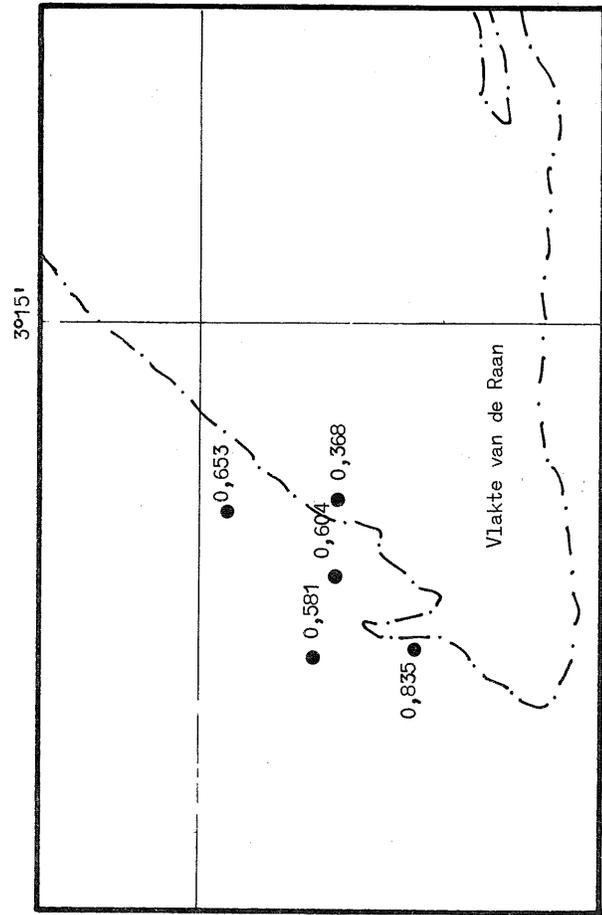
Het hoger aantal soorten larven lag aan de basis van een hogere diversiteitsindex.

De hogere diversiteitsindex in 1974, in vergelijking tot deze van 1973, was te wijten door de aanwezigheid in de stalen van larven van *Pomatoschistus minutus* (Pallas).

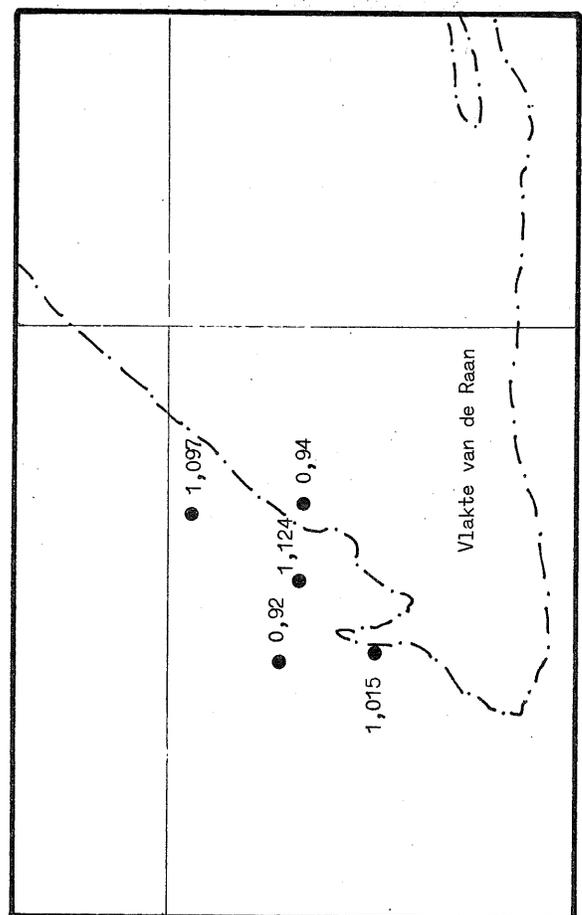
De relatief hoge diversiteitsindex in 1974 op station 37 was een gevolg van het voorkomen van eieren van *Engraulis encrasicolus* (L).

De densiteiten van larven van *Trachurus trachurus* (L) en *Ammodytes lancea* Cuvier op de Vlakte van de Raan waren tamelijk belangrijk (tabel 2).

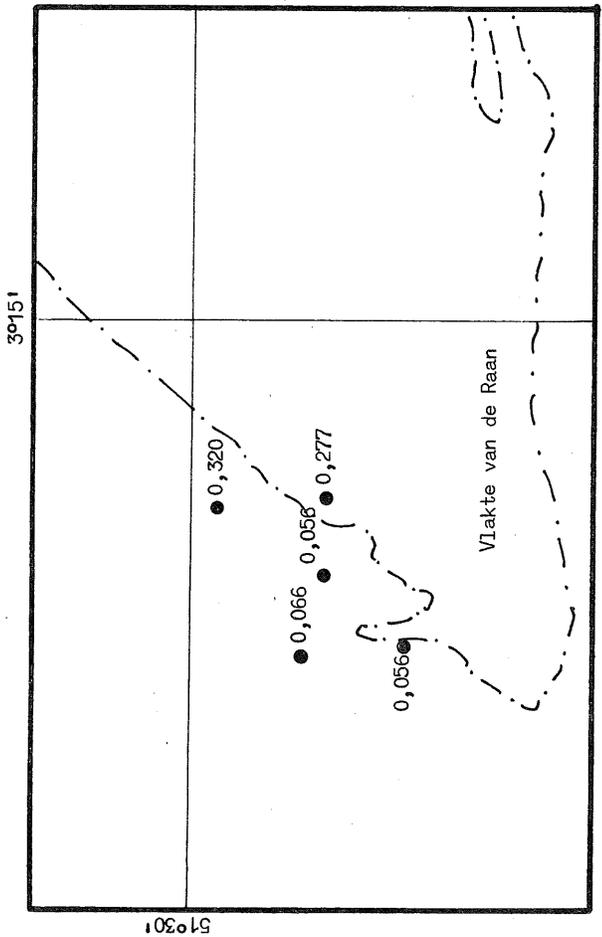
Uit de figuren blijkt duidelijk dat er geen systematische verschillen tussen de staalnamestations optreden, met uitzondering evenwel voor eieren; in 1973 en 1974 vertoonden de stations 30 en 37 respectievelijk de laagste en de hoogste diversiteitsindex.



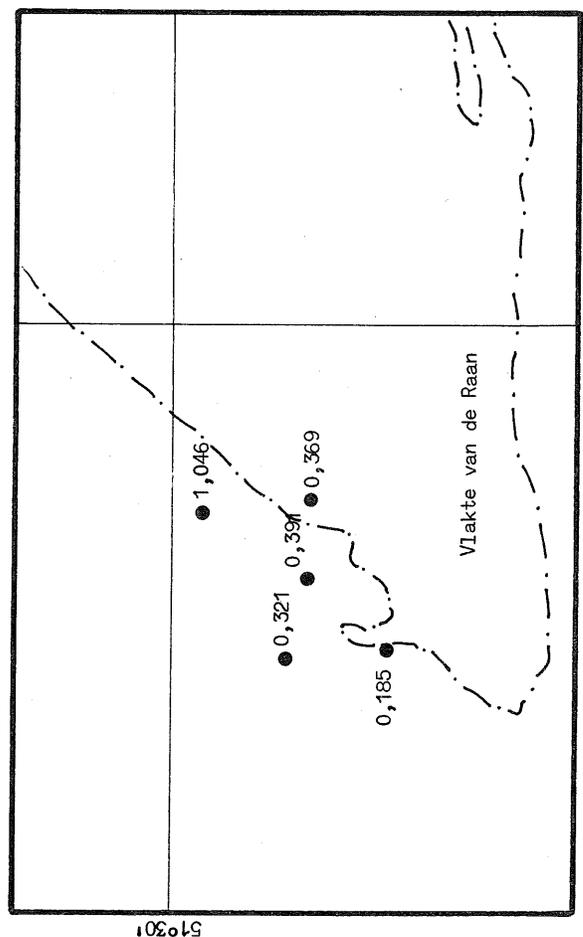
Larven - 1973



Larven - 1974



Eieren - 1973



Eieren - 1974

fig. 2.
Species-diversiteit in het gebied van de Vlakte van de Raan

Hoofdstuk IV

Visstocks

1.- Methodiek

Experimentele visserijen werden verricht met een garnaalnet, waarvan de maaswijdte van de eindkuil 18 mm bedroeg. Van de commerciële vissoorten werd de vangst in lengteklassen onderverdeeld overeenkomstig de leeftijd. Ook de niet-kommerciële vissen werden nagegaan doch enkel op een kwalitatieve en semi-kwantitatieve basis [De Clerck, Van de Velde (1973)].

2.- Resultaten

2.1.- Thornton Bank

De dumpingszone werd bepaald in een gebied waar de visserij onbelangrijk kan worden genoemd. Om deze reden was de sterkte van de plaatselijke visstapel dan ook gering, hetgeen door de proefnemingen werd bevestigd. De waargenomen vissoorten waren :

Pleurotremata	Carcharinidae	<i>Galeorhinus galeus</i> (L.)
Hypotremata	Rajidae	<i>Raja clavata</i> L.
Isopondily	Clupeidae	<i>Engraulis encrasicolus</i> (L.) <i>Alosa fallax</i> (Lacépède) <i>Sprattus sprattus</i> (L.) <i>Clupea harengus</i> L.
Apodes	Anguillidae	<i>Anguilla anguilla</i> (L.)
Synentognati	Belonidae	<i>Belone bellone</i> (L.)

Anacanthini	Gadidae	<i>Merlangius merlangus</i> (L.)
		<i>Trisopterus luscus</i> (L.)
		<i>Gadus morhua</i> L.
		<i>Ciliata mustela</i> (L.)
Percomorphi	Carangidae	<i>Trachurus trachurus</i> (L.)
	Mullidae	<i>Mullus surmuletus</i> L.
	Scombridae	<i>Scombrus scombrus</i> L.
	Gobiidae	<i>Pomatoschistus minutus</i> (Pallas)
	Callionymidae	<i>Callionymus lyra</i> L.
Scleroparei	Triglidae	<i>Trigla lucerna</i> L.
	Cottidae	<i>Myoxocephalus scorpius</i> (L.)
	Agonidae	<i>Agonus cataphractus</i> (L.)
	Cyclopteridae	<i>Cyclopterus lumpus</i> L.
	Liparidae	<i>Liparis liparis</i> (L.)
Heterosomata	Pleuronectidae	<i>Limanda limanda</i> (L.)
		<i>Platichthys flesus</i> (L.)
		<i>Pleuronectes platessa</i> (L.)
		<i>Myerostomus kitt</i> (Welbaum)
	Soleidae	<i>Solea solea</i> (L.)

Rekening houdend met de verschillende interacties van andere abiotische invloeden (stromingen, hydrologische en meteorologische omstandigheden) op de lozingsplaats, kon tot op heden geen negatieve invloed van de lozing op de visstapel worden vastgesteld. Verdere onderzoekingen omtrent de wijzigingen op langere termijn dringen zich evenwel op.

2.2.- Vlakte van de Raan

Tot augustus 1973 situeerde de lozingsplaats van de organische afval zich in het gebied Vlakte van de Raan en vanaf september 1973 tot heden in het gebied bezuiden de Goote Bank. De bemonsteringen bezuiden de Goote Bank werden aangevat vanaf april 1974 tot op heden.

2.2.1.- Eerste lozingsplaats

Bij het onderzoek werd de visstapel in het lozingsgebied vergeleken met deze in het referentiegebied. Gedurende de onderzoekingsperiode

werden volgende verschijnselen vastgesteld :

a) De aanwezige visstapel vertoonde kwalitatief geen merkbare verschillen tussen het lozingsgebied en het referentiegebied. De aangetroffen species waren de volgende :

Hypotremata	Rajidae	<i>Raja clavata</i> L.
Isopondily	Clupeidae	<i>Engraulis encrasicolus</i> (L.)
		<i>Alosa fallax</i> (Lacépède)
		<i>Sprattus sprattus</i> (L.)
		<i>Clupea harengus</i> L.
Apodes	Anguillidae	<i>Anguilla anguilla</i> (L.)
Synentognati	Belonidae	<i>Belone bellone</i> (L.)
Solenichthyes	Syngnathidae	<i>Syngnatus acus</i> L.
Anacathini	Gadidae	<i>Merlangius merlangus</i> (L.)
		<i>Trisopterus luscus</i> (L.)
		<i>Gadus morhua</i> L.
Percomorphi	Carangidae	<i>Trachurus trachurus</i> (L.)
	Scombridae	<i>Scombrus scombrus</i> L.
	Gobiidae	<i>Pomatoschistus minutus</i> (Pallas)
	Callionymidae	<i>Callionymus lyra</i> L.
Scleroparei	Triglidae	<i>Eutrigla gurnadus</i> (L.)
		<i>Trigla lucerna</i> L.
	Agonidae	<i>Agonus cataphractus</i> (L.)
	Liparidae	<i>Liparis liparis</i> (L.)
	Heterosomata	Bothidae
<i>Scophthalmus rhombus</i> (L.)		
<i>Arnoglossus laterna</i> (Walbaum)		
Pleuronectidae		<i>Limanda limanda</i> (L.)
		<i>Platichthys flesus</i> (L.)
		<i>Pleuronectes platessa</i> L.
	Soleidae	<i>Solea solea</i> (L.)

b) De kwantitatieve bepaling van de visstapel bracht geen negatieve invloed van het lozingsmateriaal aan het licht. Anderzijds werden van juveniele *Merlangius merlangus* en aanvankelijk ook van juveniele

Pleuronectes platessa grotere densiteiten waargenomen op de lozingsplaats ten opzichte van het referentiegebied (figuur 1).

Gedurende het onderzoek in de periode die na de stopzetting van de lozing volgde, bleef de *M. merlangus*-stapel een hogere dichtheid in het dumpingsgebied te vertonen. De resultaten wezen echter op een gradueel en langzaam teruglopen naar een evenwichtstoestand. Verder onderzoek dient hieromtrent nog verdere gegevens te verstrekken. De *P. platessa* en *L. limanda* stand anderzijds vertoonde na het beëindigen van de dumping geen systematische verschillen tussen het lozingsgebied en het referentiegebied.

2.2.2.- Tweede dumpingplaats

Gezien de tweede dumpingplaats een tamelijk groot gebied bestrijkt, werden drie stations uit dit gebied betrokken teneinde de aanwezige visstock te analyseren en met twee referentiepunten buiten het gebied te vergelijken.

Tijdens het onderzoek werden volgende vaststellingen gedaan :

a) Kwalitatief kwamen op beide gebieden geen merkbare verschillen tot uiting. De bemonsterde species waren de volgende :

Pleurotremata	Triakidae	<i>Mustellus mustelus</i> (L.)
Hypotremata	Rajiidae	<i>Raja clavata</i> L.
Isopodily	Clupeidae	<i>Alosa fallax</i> (Lacépède)
		<i>Sprattus sprattus</i> (L.)
		<i>Clupea harengus</i> L.
	Osmeridae	<i>Osmerus eperlangus</i> (L.)
Anacanthini	Gadidae	<i>Merlangius merlangus</i> (L.)
		<i>Trisopterus luscus</i> L.
		<i>Gadus morhua</i> L.
Zeomorphi	Zeidae	<i>Zeus faber</i> L.
Percomorphi	Carangidae	<i>Trachurus trachurus</i> (L.)
	Ammodytidae	<i>Ammodytes tobianus</i> L.
	Trachinidae	<i>Trachinus vipera</i> Cuvier
	Gobiidae	<i>Pomatoschistus minutus</i> (Pallas)
	Callionymidae	<i>Callionymus lyra</i> L.

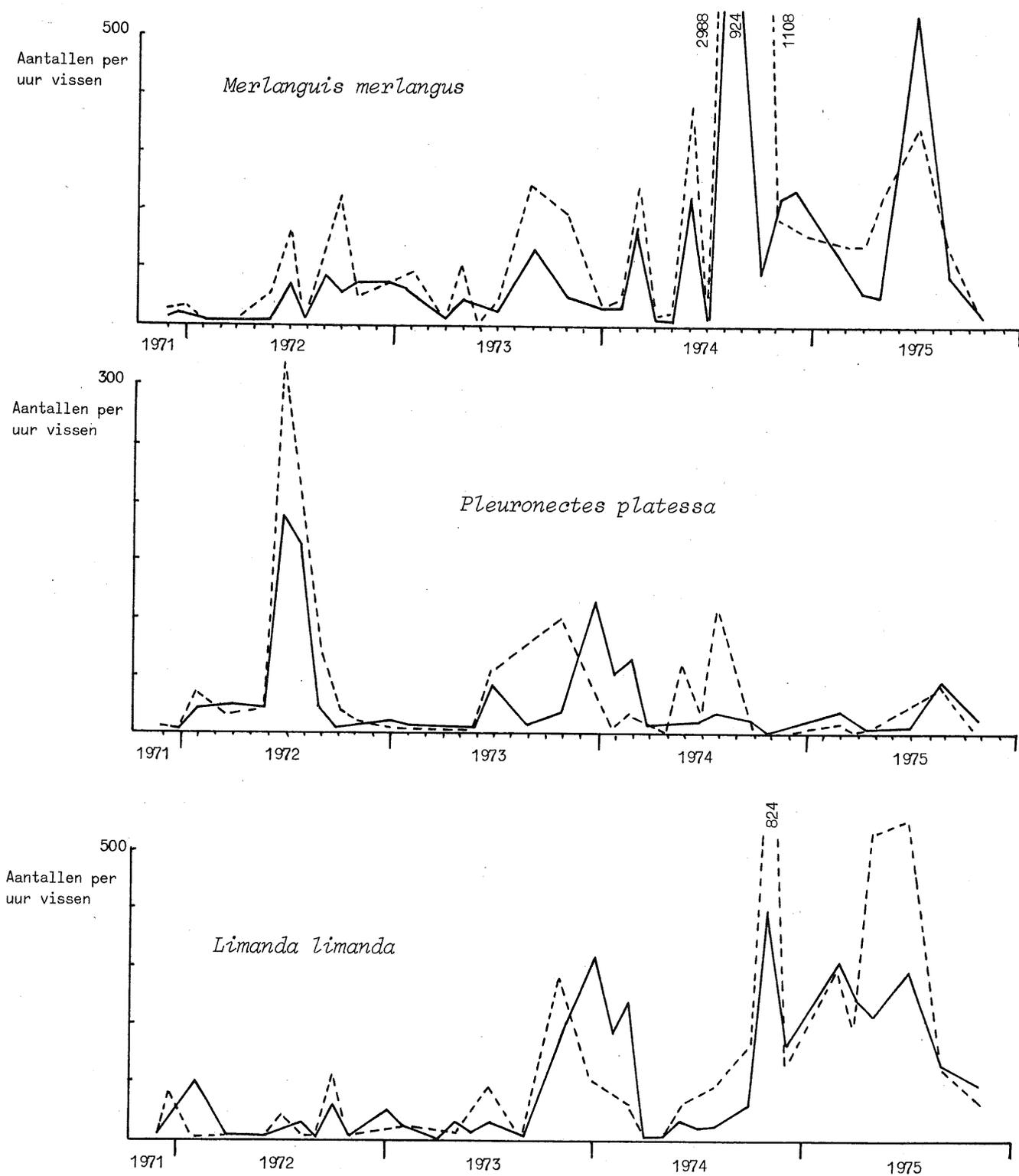


fig. 1.

Maandelijkse dichtheden, uitgedrukt in aantallen per uur vissen van juveniele Merlangius merlangus, Pleuronectes platessa en Limanda limanda in de Vlakte van de Raan.

----- Referentiegebied ————— Lozingsgebied

Scleroparei	Triglidae	<i>Trigla lucerna</i> L.
	Agonidae	<i>Agonus cataphractus</i> (L.)
	Liparidae	<i>Liparis liparis</i> (L.)
Heterosomata	Pleuronectidae	<i>Limanda limanda</i> (L.)
		<i>Platichthys flesus</i> (L.)
		<i>Pleuronectidae platessa</i> L.
	<i>Mycrostomus kitt</i> (Walbaum)	
	Soleidae	<i>Solea solea</i> (L.)

b) Kwantitatief kwam vooral naar voren dat het dumpingsgebied een duidelijk hogere dichtheid van *G. merlangus* vertoonde. Dit verschijnsel dat eveneens in het eerste dumpingsgebied werd vastgesteld, kon niet aan de predatie op *C. crangon* worden toegeschreven, vermits de garnalenstand in het tweede dumpingsgebied zeer schaars was vooral omwille van de diepte en ook de afstand tot de kust. Voor de overige soorten werden geen merkbare verschillen in dichtheden van de visstapels in het dumpingsgebied en in het referentiegebied vastgesteld.

REFERENTIES

- ARNOLD, E.L. en ROYCE, W.F., (1950). Observations on the effect of acid-iron waste disposal on animal populations, U.S. Dept. of the Interior, Fish and Wildlife Service, Spec. Scient. Report, Fisheries, n° 11.
- BLEGVAD, H., (1915). Food and conditions of nourishment among the communities of invertebrate animals found on or in the sea bottom in Danish waters, *Rep. Dan. Biol. Stat.*, 22, 41-78.
- BLEGVAD, H., (1917). On the food of fish in the Danish waters within the Skaw, *Rep. Dan. Biol. Stat.*, 24, 17-72.
- DE CLERCK, R., (1974). Further results on the dumping of organic industrial waste derived from the production of proteolytic enzymes along the Belgian coast, C.I.P.S., Biol. Synthese RZ02.
- DE CLERCK, R., en REDANT, F., (1974). The evolution of the shrimp stock along the Belgian coast in 1969-1973, I.C.E.S., Shellfish and Benthos Comm., C.M. 1974/K:23.
- DE CLERCK, R. en VAN DE VELDE, J., (1973). Preliminary results on the effects of dumped industrial waste derived from the titanidioxyste process on fish and shrimps, C.I.P.S. Biol. Synthese RZ03.
- DE CLERCK, R. en VAN DE VELDE, J., (1973). Further results of the effects of dumped organic industrial waste deriving from the production of proteolytic enzymes on density and distribution of fish and shrimps, Programma C.I.P.S., Technical Report/Biol./Synthese RZ02.
- DE CLERCK, R. en VAN DE VELDE, J., (1976). Progress report on the effects of dumped industrial waste derived from the titanedioxyste process on fish (in voorbereiding).
- DE CLERCK, R., VAN DE VELDE, J. en VYNCKE, W., (1973). On the effects of dumped organic industrial waste deriving from the production of proteolytic enzymes on density, distribution and quality of fish and shrimps, *Aquaculture*, 2, 323-335.
- KETCHUM, B.H., (1974). Sea disposal of acid-iron wastes resulting from the production of titanium dioxyste, I.C.E.S., Fish. Improvement Comm., C.M. 1974/E:52.
- LLOYD, M. en GHERALDI, R.J., (1964). A table for calculating the equitability component of species diversity, *J. Animal Ecology*, 33, 217-225.

- PETERSEN, C.G.J., (1915). The animal communities of the sea bottom in the Skagerak, the Christiania Fjord and the Danish waters, *Rep. Dan. Biol. Stat.*, 23, 3-22.
- PETERSEN, C.G.J., (1918). The sea bottom and its production of fish food, *Rep. Dan. Biol. Stat.*, 25, 1-82.
- PETERSEN, C.G.J., (1924). A brief survey of the animal communities in Danish waters, based upon quantitative samples taken with the bottom sampler, *Amer. Journal of Science*, Series V, 7, 41, 343-354.
- RACHOR, E. en DETHLEFSEN, V., (1974). Effects of acid-iron waste disposal in the marine environment, I.C.E.S., Fish. Improvement Comm., C.M. 1974/E:27.
- REDANT, F., (1974a). A qualitative and quantitative study on the invertebrates in the catches of experimental shrimp fishing in the Westdiep, I.C.E.S., Shellfish and Benthos Comm., C.M. 1974/K:21.
- REDANT, F., (1974b). The benthic and epibenthic fauna of the Thornton Bank area, I.C.E.S., Shellfish and Benthos Comm., C.M. 1974/K:22.
- REDANT, F., (1975). Studie van het epibenthos langsheen de Belgische kust, C.I.P.S., Biol./Synthese.
- REDANT, F. en DE CLERCK, R., (1975). Unfavourable prospects for the Belgian shrimp fishery in 1975, I.C.E.S., Shellfish and Benthos Comm., C.M. 1975/K:43.
- SIMPSON, E.H., (1949). Measurements of diversity, *Nature*, 163, 688.
- SPARCK, R., (1935). On the importance of quantitative investigations of the bottom fauna in marine biology, *Journal du Conseil*, 10, 3-19.
- STRIPP, K. en GERLACH, S.A., (1969). Die Bodenfauna in Verklappungsgebiet von Industrieabwässern nordwestlich von Helgoland, *Veröff. Inst. Meeresforsch. Bremerh.*, 12, 149-156.
- SØRENSEN, T., (1948). A method of establishing groups of equal amplitude in plant society based on similarity of species content, *K. Danske Vidensk. Selsk.*, 5, 1-34.

QUATRIEME PARTIE

FLUCTUATIONS ALEATOIRES ET STRUCTURATION SPATIO-TEMPORELLE

DE POPULATIONS BIOLOGIQUES

SIMULATION DE LA DISTRIBUTION HORIZONTALE DE PLANCTON

EN MER DU NORD

par

D. DUBOIS

Introduction

Dans ce travail, notre but a été d'essayer d'expliquer, d'un point de vue théorique, la formation de figures géométriques en forme de disques et d'anneaux dans la répartition horizontale de populations planctoniques dans l'océan.

Comme le plancton peut être considéré comme étant de petits organismes en suspension dans l'eau de mer dont le nombre est suffisamment grand, un modèle continu de la forme

$$(1) \quad \frac{\partial N_i}{\partial t} = \text{termes d'interactions (écologiques, biochimiques, ...)} \\ + \text{termes "spatiaux" (advection, turbulence, ...)}$$

peut être utilisé afin d'en expliquer l'évolution spatio-temporelle. Ce système d'équations ($i = 1, \dots, n$) aux dérivées partielles en la variable N_i (nombre d'individus ou concentration de la population pour l'espèce i) peut tenir compte des lois d'interactions écologiques entre l'espèce i et les autres espèces, du transport par advection, de la diffusion latérale turbulente, etc.

Il y a essentiellement deux manières d'étudier l'évolution des populations biologiques à partir de ce type d'équations : la théorie déterministe et la théorie stochastique. Les chapitres I et II reverront un certain nombre de modèles les plus généralement utilisés par les écologistes.

Au chapitre III, nous étudions la dynamique de populations de plancton proie-prédateur dans la mer du Nord en tenant compte non seulement de la dynamique des interactions entre ces deux espèces mais également du transport par advection et de la diffusion latérale turbulente. Le terme d'advection représente la partie structurée du mouvement de l'eau tandis que la turbulence en représente sa partie aléatoire. La simulation numérique des équations différentielles partielles non-linéaires permet de montrer le mécanisme de la structuration horizontale sous forme de disques et d'anneaux des populations de plancton en mer du Nord.

Chapitre I

La théorie¹ déterministe de la dynamique des populations biologiques

Introduction

Partant d'une question d'un biologiste concernant les fluctuations des quantités de poissons dans la mer Adriatique, le mathématicien Volterra (1927) a développé la théorie déterministe de la dynamique des populations par l'utilisation des équations différentielles. A la même période, une grande partie de la théorie de Volterra a été développée indépendamment par Lotka (1925). Plus tard, Kostitzin (1934) et Kolmogoroff (1936) ont fait une analyse critique des équations différentielles non-linéaires de la dynamique des populations.

En examinant les travaux de ces pionniers de la biologie théorique, on constate que "par l'étendue complète et l'excellence de ce travail initial, peu de choses ont été laissées à ceux qui ont suivi; en fait, en ce moment, rien d'essentiellement nouveau n'a été ajouté aux théories mathématiques (déterministes) de ces quatre hommes" [Rescigno et Richardson (1972)]. Dans la suite, les mêmes méthodes ont été utilisées pour trouver des extensions de leurs principes fondamentaux.

Dans ce chapitre, on va rappeler les différents modèles mathématiques qui sont les plus importants et les plus significatifs dans la description de la dynamique des populations.

Dans une première étape, on va revoir la dynamique d'une espèce isolée représentée par l'équation de Malthus (1798) et de Pearl (1924) - Verhulst (1845). Mais, comme il est assez facile de s'en rendre compte,

1. Implicitement, on supposera, tout au cours des développements mathématiques, que les nombres d'individus des populations sont suffisamment grands pour être décrits par des variables continues.

ce sont les modèles mathématiques des processus de compétition entre différentes espèces qui sont les plus intéressants. Ces modèles deviennent rapidement très difficiles à résoudre analytiquement quand on se trouve en face d'un grand nombre de populations.

Parmi les modèles les plus simples, il y a les modèles de compétition et d'interaction proie-prédateur. C'est à ces types de modèles que nous nous attacherons tout particulièrement. Nous allons étudier tout d'abord les propriétés des équations décrivant les interactions entre deux espèces : nous proposons de mettre ces équations sous une forme symétrique afin de bien voir les rôles joués par les deux espèces. La solution du modèle proie-prédateur de Lotka-Volterra est décrite par un nombre infini de cycles dans le plan de phase, c'est-à-dire que les deux populations oscillent indéfiniment avec des amplitudes dépendant des conditions initiales. Des propriétés de ces équations, Volterra en a déduit trois lois. Quand deux espèces sont en compétition, Volterra a formulé le très fameux "principe d'exclusion compétitive" qui dit que, dans ces conditions, une des deux espèces finit toujours par disparaître. Toutes ces lois peuvent d'ailleurs se généraliser en cas d'un nombre quelconque d'espèces.

Si des phénomènes de saturation dans le taux de croissance et d'interaction du système proie-prédateur se présentent, la solution des équations est décrite par un cycle limite au lieu de la stabilité orbitale [May (1972); Gilpin (1972) et Rosenzweig (1972)]. Une étude de ces deux types de stabilité peut se faire à partir de la fonction d'auto-corrélation.

De plus, en couplant le système proie-prédateur avec une variation temporelle de la nourriture disponible pour la proie, nous montrons la difficulté qu'il y a de séparer les spectres de fréquence des oscillations propres de l'écosystème par rapport aux oscillations imposées par l'environnement. Quand il y a synchronisation des deux fréquences, les deux populations oscillent en minimisant les fluctuations de la quantité de nourriture.

1.- La dynamique d'une espèce isolée

1.1.- L'équation de Malthus

Le plus bel exposé connu sur la dynamique des populations et, sans aucun doute, celui qui a eu le plus d'influence historiquement, est *An essay on the principle of population as it affects the future improvement of society* [Malthus (1798)].

Son impact socioéconomique fut important. Il influença Charles Darwin, qui a mis en évidence les causes de la sélection naturelle.

Malthus proposa qu'une population sans contrainte s'accroît en progression géométrique.

Soit $N(t)$ le nombre d'individus d'une population au temps t . Si on suppose que cette espèce est isolée et que le taux de natalité et le taux de mortalité sont directement proportionnels à la grandeur de la population, c'est-à-dire $N(t)$, alors la variation temporelle de la grandeur de la population est

$$(1.1) \quad \frac{dN(t)}{dt} = k N(t) \quad \text{avec} \quad k = k^+ - k^-$$

où $k^+ > 0$ est le coefficient de natalité et $k^- > 0$ est le coefficient de mortalité.

En se donnant une grandeur initiale de population N_0 , au temps $t = 0$, l'intégration de l'équation (1.1) donne l'équation pour une croissance malthusienne

$$(1.2) \quad N = N_0 \exp(kt).$$

1.2.- L'équation de Pearl-Verhulst

L'objection évidente à l'équation (1.1) est que, pour $k > 0$, la population s'accroît indéfiniment en fonction du temps. Il est raisonnable de supposer que l'entassement affecte le coefficient d'accroissement : par exemple, la quantité de nourriture et les limitations d'espace vital.

En supposant que le coefficient d'auto-croissance décroît proportionnellement à la population, l'équation (1.1) devient alors

$$(1.3) \quad \frac{dN}{dt} = (k - k'N) N$$

avec $k' > 0$. Le terme $(k - k'N)$ est appelé le coefficient d'accroissement. Une intégration entre les limites 0 et t donne l'équation de Pearl (1924) - Verhulst (1845)

$$(1.4) \quad N = \frac{k \exp(kt)}{C + k' \exp(kt)}$$

où

$$(1.5) \quad C = \frac{k - k'N_0}{N_0}$$

dans le cas $k \neq 0$. Si $k = 0$, l'intégration de l'équation (1.3) donne

$$(1.6) \quad N = \frac{N_0}{1 + k'N_0 t}$$

Pour t tendant vers l'infini, N tend asymptotiquement vers une valeur limite :

- i) pour $k \leq 0$, $\lim_{t \rightarrow \infty} N = 0$;
- ii) pour $k > 0$, $\lim_{t \rightarrow \infty} N = \frac{k}{k'}$.

Pour $k > 0$, on obtient une courbe à caractère sigmoïde, souvent appelée *courbe logistique*.

Blumberg (1968) a généralisé ces équations en ajoutant des exposants aux termes.

2.- Les modes d'interaction entre deux espèces

2.1.- La compétition et le principe d'exclusion compétitive de Volterra : deux espèces en compétition pour la même niche écologique

Considérons le cas de deux espèces en compétition pour une niche écologique commune. Faisons l'hypothèse qu'une quantité de nourriture commune soit le facteur déterminant. Soient N_1 le nombre d'individus d'une espèce et N_2 celui de la seconde. Soient $k_1 > 0$ et $k_2 > 0$ les coefficients d'autocroissance. La quantité de nourriture disponible diminuera proportionnellement à la grandeur de la population totale; cependant, les deux espèces l'affecteront à des degrés différents. Si

la première espèce diminue la quantité de nourriture de $h_1 N_1$ par unité de temps et la seconde de $h_2 N_2$, la diminution totale sera de $h_1 N_1 + h_2 N_2$ ($h_1 > 0$ et $h_2 > 0$). On obtiendra le système d'équations suivant :

$$(1.7) \quad \frac{dN_1}{dt} = [k_1 - \gamma_1 (h_1 N_1 + h_2 N_2)] N_1 ,$$

$$(1.8) \quad \frac{dN_2}{dt} = [k_2 - \gamma_2 (h_1 N_1 + h_2 N_2)] N_2 .$$

Les constantes $\gamma_1 > 0$ et $\gamma_2 > 0$ peuvent être considérées comme des mesures d'utilisation de la nourriture disponible, c'est-à-dire les coefficients d'utilisation.

On peut donner une explication biologiquement plus complète du modèle en attribuant une partie de la décroissance à la limitation du territoire [Garfinkel (1967)] (termes en N_i^2) et l'autre partie à la compétition (termes en $N_i N_j$, $i \neq j$).

En divisant par N_1 et multipliant par γ_2 l'équation (1.7) et par N_2 et γ_1 l'équation (1.8), on obtient :

$$(1.9) \quad \gamma_1 \frac{d(\ln N_1)}{dt} - \gamma_2 \frac{d(\ln N_2)}{dt} = \gamma_2 k_1 - \gamma_1 k_2 .$$

Cette équation peut être immédiatement intégrée

$$(1.10) \quad \frac{N_1^{\gamma_2}}{N_2^{\gamma_1}} = C \exp[(\gamma_2 k_1 - \gamma_1 k_2) t] ,$$

où C est une constante d'intégration dépendant des grandeurs initiales des populations.

Il est particulièrement intéressant de voir le comportement des solutions en fonction du temps. Supposons $\gamma_2 k_1 - \gamma_1 k_2 \neq 0$. Nous pouvons prendre $\gamma_2 k_1 - \gamma_1 k_2$ positif, car si ce n'était pas le cas, nous pourrions alors renuméroter les espèces, en les intervertissant. Prenant la limite de l'équation (1.10), nous avons :

$$(1.11) \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{N_1^{\gamma_2}}{N_2^{\gamma_1}} \right) = \infty .$$

En vertu de l'équation (1.7), $\frac{dN_1}{dt}$ est toujours négatif pour $k_1 - \gamma_1 h_1 N_1 \leq 0$; c'est-à-dire que N_1 décroît constamment pour

$N_1 \geq \frac{k_1}{\gamma_1 h_1}$. On a $N_1 < \frac{k_1}{\gamma_1 h_1}$ ou $N_1 \geq \frac{k_1}{\gamma_1 h_1}$, dans lequel cas il décroît. Cependant N_1 étant toujours plus petit qu'une certaine quantité, la limite donnée par l'équation (1.11) implique que N_2 tend vers zéro en fonction du temps.

Quand N_2 devient éventuellement suffisamment petit pour être négligé, l'équation (1.7) devient l'équation logistique avec $k' = \gamma_1 h_1$. L'extinction inévitable d'une des deux espèces en compétition, dont les interactions sont décrites par les équations (1.7) et (1.8), peut être énoncée en tant que 'loi' de la dynamique des populations [Volterra (1931)]. *Le principe d'exclusion compétitive de Volterra* s'énonce : si deux espèces sont en compétition pour une niche écologique commune, l'une des deux espèces est destinée à disparaître et l'autre espèce atteint une valeur limite.

2.2.- Deux espèces vivant en relation proie-prédateur : les trois lois de Volterra sur la prédation

Soit N_1 le nombre d'individus de l'espèce proie et $k_1 > 0$ son coefficient d'autocroissance. Nous supposons que, si la proie est isolée, l'accroissement dN_1 de sa population doit être proportionnel à sa grandeur N_1 et à l'intervalle de temps dt , c'est-à-dire

$$(1.12) \quad dN_1 = k_1 N_1 dt .$$

D'autre part, l'espèce prédatrice doit décroître si elle est isolée de sa nourriture (la proie); donc, nous avons pour $k_3 > 0$:

$$(1.13) \quad dN_2 = - k_3 N_2 dt .$$

Quand ces deux populations occupent un territoire commun, le nombre de rencontres entre un prédateur et une proie est proportionnel au produit des deux grandeurs des populations et à l'intervalle de temps, c'est-à-dire que le nombre de rencontres est $kN_1 N_2 dt$ avec $k > 0$. Une certaine fraction α_1 de ces rencontres résulte en la mort d'une proie et, de ce fait, la quantité donnée par l'équation (1.12) doit être diminuée de $\alpha_1 k N_1 N_2 dt$. La consommation d'une proie contribue à l'accroissement des prédateurs, et la quantité donnée par l'équation (1.13) est accrue d'un

facteur $\beta_2 \alpha_1 k N_1 N_2 dt$, où $\beta_2 > 0$ peut être considéré comme un *coefficient d'utilisation* de la nourriture. En général, on prend $\alpha_1 k = k_2$ et $\beta_2 \alpha_1 k = k_4$ comme coefficients; évidemment $k_2 > 0$ et $k_4 > 0$.

Incorporant les termes précédents dans les équations (1.12) et (1.13), nous obtenons les équations différentielles pour deux espèces vivant en relation proie-prédateur :

$$(1.14) \quad \frac{dN_1}{dt} = k_1 N_1 - k_2 N_1 N_2,$$

$$(1.15) \quad \frac{dN_2}{dt} = -k_3 N_2 + k_4 N_1 N_2 .$$

Si le mécanisme d'offensive des prédateurs s'améliore, alors la constante α_1 augmente et, de ce fait, causera une augmentation de k_2 et de k_4 . Si les proies se protègent mieux, alors α_1 diminuera et k_2 et k_4 décroîtront. Par le jeu de la sélection naturelle, de l'adaptation au milieu ainsi que de l'adaptation du prédateur à sa proie, ces coefficients doivent obéir à des lois d'évolution qui sont d'ailleurs difficiles à mettre en évidence.

Dans le système décrit par les équations de Lotka-Volterra, on suppose que les individus formant la population proie sont attaqués par le prédateur sans aucune discrimination. Quand la population des prédateurs est comparable ou plus grande que celle des proies, il est raisonnable de s'attendre à ce que ce soit, en effet, la situation la plus probable. Cependant, dans le cas le plus réaliste d'un rapport prédateur-proie petit, la *compétition* la plus naturelle (*sélection naturelle*) consiste à ce que les individus proies les moins bien adaptés (les individus ayant les plus petites valeurs de quelque paramètre d'"adaptation optimale" qui mesure la capacité de résister ou d'échapper au prédateur) soient attaqués. Il est évident que ces effets doivent jouer un grand rôle, notamment dans la sélection naturelle. De plus, il faudrait mettre cette conclusion en rapport direct avec la dynamique génétique des populations. Une des conséquences de ces processus est de permettre une *évolution* de l'espèce *proie* dans laquelle les individus les moins bien adaptés et se trouvant à la fin de la distribution interne sont éliminés continuellement. De plus, on peut également assister à

une évolution de l'espèce *prédateur* qui peut s'adapter à sa proie, éliminant ainsi les moins bons prédateurs (principe d'exclusion compétitive entre les individus de la même espèce).

2.2.1.- Interaction interspécifique et intra-spécifique

Dans les interactions entre proie et prédateur, seule la dynamique entre les deux espèces est considérée. Mais il existe également une dynamique des individus au sein d'une même espèce. C'est ce qu'on appelle en mécanique statistique le *hard core effect* (l'effet de sphère dure), ce qui revient à dire que deux particules ne peuvent pas occuper la même place au même moment. Il est également évident que ces effets *élastiques* ont un temps de relaxation assez court par rapport aux temps caractéristiques des fluctuations (dans l'état liquide, solide, etc.). Ceci pourrait d'ailleurs être mis en relation avec le *principe d'exclusion compétitive* de Volterra qui s'appliquerait pour les individus d'une même espèce : si deux individus d'une même espèce sont en compétition pour une même *niche écologique* au même moment, alors un seul des deux individus parviendra à l'obtenir, l'autre étant obligé d'en choisir une autre. Ces notions sont en plus à mettre en évidence avec la notion de territorialité.

En mécanique statistique quantique, le principe d'exclusion de Pauli est assez similaire et il est bien connu que la statistique des fermions est tout à fait différente de la statistique des bosons. A ces deux types de statistique, il correspond des fluctuations dont les amplitudes sont différentes. De plus, pour les bosons, on assiste à des phénomènes coopératifs très importants.

2.2.2.- Les trois lois de Volterra

Loi de la périodicité

Les fluctuations des grandeurs des populations des prédateurs et des proies sont périodiques, et la période dépend seulement des coefficients d'autocroissance (k_1, k_3), des coefficients d'interaction (k_2, k_4) et d'une constante d'intégration dépendant des grandeurs initiales des populations.

Loi de la conservation des moyennes

La valeur moyenne du nombre d'individus de chaque espèce évaluée sur un cycle complet est indépendante des conditions initiales et dépend seulement des coefficients de croissance et d'interaction. La valeur moyenne de N_1 est $\frac{k_3}{k_4}$; la valeur moyenne de N_2 est $\frac{k_1}{k_2}$.

Loi de perturbation des moyennes

Si des membres des deux espèces sont uniformément détruits proportionnellement aux grandeurs relatives des populations, alors le nombre moyen de proies augmente et le nombre moyen de prédateurs décroît. Les deux moyennes augmentent si la proie est protégée d'une façon telle à ne pas détruire les prédateurs.

3.- Généralisation au cas de n espèces

La paire d'équations a été généralisée par Volterra (1931) pour un ensemble de n espèces :

$$(1.16) \quad \frac{dN_i}{dt} = k_i N_i + \beta_i^{-1} \sum_{j=1}^n a_{ij} N_i N_j \quad (i = 1, 2, \dots, n) .$$

Le premier terme décrit le comportement de l'espèce i en l'absence des autres. Les termes quadratiques décrivent l'interaction de l'espèce i avec toutes les autres espèces. Les constantes a_{ij} tiennent compte de la fréquence des rencontres entre les espèces i et j . Les constantes a_{ij} peuvent être positives, négatives ou nulles. Les quantités positives β_i ont été appelées *nombre équivalents* par Volterra.

Durant des collisions binaires des espèces i et j , le rapport entre la variation de l'espèce i et celle de l'espèce j par unité de temps vaut

$$\frac{\beta_i^{-1}}{\beta_j^{-1}} .$$

Avec cette définition, on a

$$a_{ij} = - a_{ji} \quad \text{et} \quad a_{ii} = 0 .$$

L'état stationnaire non-nul est caractérisé par l'ensemble des $\{N_{j0}\}$ ($j = 1, \dots, n$) pour lesquels $\frac{dN_j}{dt} = 0$ pour tous les j .

En définissant

$$(1.17) \quad v_j = \ln \frac{N_j}{N_{j0}} \quad \text{ou} \quad N_j = N_{j0} \exp(v_j)$$

il est possible d'obtenir une constante de mouvement K positive qui s'écrit

$$(1.18) \quad \sum_j \beta_j N_{j0} [\exp(v_j) - v_j] = K = \text{constante} = \sum_j K_j$$

où chaque terme individuel K_j est positif.

A partir de l'étude analytique de ces systèmes à n espèces, Volterra a formulé les résultats obtenus sous la forme de lois qui sont très semblables aux lois obtenues au cas de deux espèces.

4.- Propriétés des équations "proie-prédateur"

4.1.- La constante de mouvement

L'état d'équilibre est caractérisé par un ensemble de populations $\{N_{j0}\}$ pour lesquelles $\frac{dN_j}{dt} = 0$ pour $j = 1, 2$. Les quantités N_{j0} ($j = 1, 2$) sont les valeurs de N_j satisfaisant les équations suivantes :

$$(1.19) \quad N_{10} (k_1 - k_2 N_{20}) = 0$$

$$(1.20) \quad N_{20} (k_4 N_{10} - k_3) = 0 .$$

Quand aucun des N_{i0} ne s'annule, ils satisfont :

$$(1.21) \quad N_{20} = \frac{k_1}{k_2}$$

$$(1.22) \quad N_{10} = \frac{k_3}{k_4} .$$

Volterra a montré qu'il y a une constante de mouvement qui dépend des $\{N_{i0}\}$. On définit

$$(1.23) \quad v_j = \ln \frac{N_j}{N_{j0}}$$

ou

$$(1.24) \quad N_j = N_{j0} \exp(v_j)$$

et nous voyons que, quand $N_j \rightarrow N_{j0}$, $v_j \rightarrow 0$. Ainsi v_j est une mesure de l'écart de N_j par rapport à l'écart d'équilibre.

Les équations (1.14) et (1.15) sont exprimées en termes des v_j par

$$(1.25) \quad \frac{dv_1}{dt} = k_1 [1 - \exp(v_2)]$$

$$(1.26) \quad \frac{dv_2}{dt} = k_3 [\exp(v_1) - 1]$$

en utilisant les équations (1.21) et (1.22).

Divisant (1.25) par (1.26), on obtient, après intégration :

$$(1.27) \quad N_{10} [\exp(v_1) - v_1] + N_{20} [\exp(v_2) - v_2] = C^{te} = K_1$$

qui est la constante du mouvement. Chaque terme individuel dans l'équation (1.27) est positif : $v_j > 0$ implique $\exp(v_j) > v_j$ et $v_j < 0$, $v_j > 0$ et $\exp(v_j)$ est positif.

Donc nous avons $K_1 > 0$.

L'équation (1.27) représente une famille de courbes fermées dont chacune correspond à une valeur particulière de K_1 [Davis (1962)].

Toute condition initiale (excepté $N_1 = 0$ et $N_2 = 0$ ou $N_1 = N_2 = 0$) sur les populations détermine des variations périodiques des populations (en fixant la constante K_1) qui sont représentées dans le plan de phase (N_1, N_2) par une courbe fermée autour de l'état stationnaire (N_{10}, N_{20}) qui représente un "centre". Une discussion approfondie est donnée dans les monographies de Davis (1962), Minorsky (1962), Césari (1963) et Cunningham (1963).

Les moyennes temporelles de N_1 et N_2 durant un cycle de période T donnent, à partir des équations (1.25) et (1.26), les relations :

$$(1.28) \quad \frac{1}{T} \int_0^T \frac{dv_1}{dt} dt = 0 = k_1 - k_1 \frac{1}{T} \int_0^T \exp(v_2) dt$$

ou

$$(1.29) \quad \bar{N}_2 = \frac{1}{T} \int_0^T N_2 dt = N_{20} .$$

De façon semblable,

$$(1.30) \quad \bar{N}_1 = N_{10} .$$

Les moyennes temporelles de N_1 et N_2 calculées sur un cycle correspondent donc aux valeurs de N_1 et N_2 à l'état d'équilibre, N_{10} et N_{20} .

Pour de petites oscillations autour de l'état stationnaire (N_{10}, N_{20}) , on peut résoudre explicitement les équations de Lotka-Volterra.

4.2.- Les équations linéarisées

On considère les fluctuations (n_1, n_2) des deux populations autour de (N_{10}, N_{20}) , c'est-à-dire :

$$(1.31) \quad N_1 = N_{10} + n_1$$

$$(1.32) \quad N_2 = N_{20} + n_2 .$$

En remplaçant N_1 et N_2 données par les équations (1.31) et (1.32) dans les équations (1.14) et (1.15), on obtient, après linéarisation :

$$(1.33) \quad \frac{dn_1}{dt} = - \left(\frac{k_2 k_3}{k_4} \right) n_2$$

$$(1.34) \quad \frac{dn_2}{dt} = \left(\frac{k_1 k_4}{k_2} \right) n_1 .$$

En dérivant la première équation et en utilisant la seconde, on a :

$$(1.35) \quad \frac{d^2 n_1}{dt^2} + \omega_0^2 n_1 = 0$$

où
$$\omega_0 = (k_1 k_3)^{\frac{1}{2}} .$$

On voit donc que l'équation (1.35) est l'équation de l'oscillateur harmonique. Dans le plan de phase, les courbes représentatives sont des ellipses. En effet, la solution de l'équation (1.35) peut s'écrire sous la forme

$$(1.36) \quad n_1 = n_{10} \sin(\omega_0 t + \phi) .$$

A partir de l'équation (1.33), une équation similaire est écrite pour n_2

$$(1.37) \quad n_2 = n_{10} \omega_0 \left(\frac{k_4}{k_2 k_3} \right) \cos(\omega_0 t + \phi) .$$

Les deux populations oscillent en quadrature de phase avec une période commune T_0 et des amplitudes différentes. Il faut remarquer que la fréquence ne dépend que des taux de natalité et de mortalité des deux populations, c'est-à-dire k_1 et k_3 .

Par un changement de variables, il est possible de rendre symétrique les équations de Lotka-Volterra.

4.3.- Les équations symétriques

Tout d'abord en faisant le changement de variables suivant

$$(1.38) \quad N_1 = \alpha N_1^*$$

$$(1.39) \quad N_2 = \beta N_2^*$$

les équations (1.14) et (1.15) deviennent

$$(1.40) \quad \frac{dN_1^*}{dt} = k_1 N_1^* - k_2 N_1^* N_2^*$$

$$(1.41) \quad \frac{dN_2^*}{dt} = -k_3 N_2^* + k_2 N_1^* N_2^*$$

en prenant $\beta = 1$ et $\alpha = \frac{k_2}{k_4}$.

Ensuite, en faisant un nouveau changement de variables :

$$(1.42) \quad p_i = \frac{N_i^* k_2}{k_1 + k_3} \quad i = 1, 2$$

$$(1.43) \quad \bar{p}_1 = p_{10} = \frac{k_3}{k_1 + k_3}$$

$$(1.44) \quad \bar{p}_2 = p_{20} = \frac{k_1}{k_1 + k_3}$$

et

$$(1.45) \quad \tau = t (k_1 + k_3) ,$$

les équations (1.40) et (1.41) se mettent sous la forme :

$$(1.46) \quad \frac{dp_1}{d\tau} = p_1 \bar{p}_2 - p_1 p_2$$

$$(1.47) \quad \frac{dp_2}{dt} = -\bar{p}_1 p_2 + p_1 p_2 .$$

Les deux constantes \bar{p}_1 et \bar{p}_2 représentent les valeurs moyennes des populations ainsi que les solutions stationnaires (p_{10} , p_{20}) des équations. Sous cette forme, les équations apparaissent plus symétriques : les p_i peuvent représenter des probabilités d'état comme en mécanique statistique. De plus, dans ce formalisme, la fréquence fondamentale ω_0 s'écrit

$$(1.48) \quad \omega_0 = (\bar{p}_1 \bar{p}_2)^{\frac{1}{2}}$$

c'est-à-dire la racine carrée du produit des moyennes des deux populations.

4.4.- La stabilité orbitale

Les orbites suffisamment voisines (petites perturbations) de l'état stationnaire étant décrites par une seule fréquence ω_0 (de la théorie linéarisée) sont stables selon la théorie de la stabilité de Lyapunov.

Au contraire, quand on se trouve à distance finie de l'état stationnaire, le système d'équations de Lotka-Volterra présente un *spectre continu de fréquences* dû au nombre infini de cycles possibles.

Ainsi, deux points voisins mais situés sur des cycles distincts tendent à s'éloigner l'un de l'autre à cause de la différence entre les périodes. Ce mouvement devient alors *instable au sens de Lyapunov*, mais sera considéré comme stable *au sens étendu de stabilité orbitale* [voir Pars (1968) § 23.8, p. 474].

Dans le plan de phase, plus un cycle s'approche de l'origine, plus il s'en éloigne ensuite dans la région des grandes concentrations. Cet effet est dû aux non-linéarités. Le cycle proche de l'état stationnaire est pratiquement une circonférence comme la théorie linéarisée le prévoit. La période associée à différents cycles (correspondant à différentes conditions initiales) augmente avec la distance du cycle par rapport à l'état stationnaire.

Une variante des équations de Lotka-Volterra permet d'obtenir un cycle limite comme propriété intrinsèque de l'écosystème lui-même en introduisant une saturation dans le terme d'interaction "proie-prédateur".

4.5.- Cycle limite

May (1972) [voir également Gilpin (1972), Rosenzweig (1972)] part du couple d'équations :

$$(1.49) \quad \frac{dN_1}{dt} = r N_1 \left(1 - \frac{N_1}{K}\right) - k N_2 [1 - \exp(-c N_1)]$$

$$(1.50) \quad \frac{dN_2}{dt} = -b N_2 + \beta N_2 [1 - \exp(-f N_1)]$$

Le premier terme de droite de l'équation (1.49) est le taux de natalité de la proie du type logistique afin d'inclure un facteur stabilisant dépendant de la densité. Le second terme de droite représente le taux de perte de proie dû à la prédation sous une forme suggérée par Ivlev (1961) à partir de résultats expérimentaux. Ce taux de prédation est proportionnel à N_1 pour une valeur petite de N_1 mais sature à une constante k pour N_1 grand, ce qui entraîne une déstabilisation de tout le système. L'étude de la stabilité des solutions de ce système peut être faite à partir du théorème de Kolmogorov [voir Minorsky (1962) chap. II, § 9] qui nous dit que des modèles du type

$$(1.51) \quad \frac{dN_1}{dt} = N_1 g(N_1, N_2)$$

$$(1.52) \quad \frac{dN_2}{dt} = N_2 h(N_1, N_2)$$

possèdent soit un point d'équilibre stable soit un cycle limite stable si les fonctions g et h ont les propriétés suivantes :

$$(1.53) \quad \frac{\partial g}{\partial N_2} < 0 ; \quad N_1 \frac{\partial g}{\partial N_1} + N_2 \frac{\partial g}{\partial N_2} < 0$$

$$(1.54) \quad \frac{\partial h}{\partial N_2} < 0 ; \quad N_1 \frac{\partial h}{\partial N_1} + N_2 \frac{\partial h}{\partial N_2} > 0$$

$$(1.55) \quad g(0,0) > 0$$

et s'il existe A , B et C tels que :

$$(1.56) \quad g(0,A) = 0, \quad A > 0$$

$$(1.57) \quad g(B,0) = 0, \quad B > 0$$

$$(1.58) \quad h(C,0) = 0, \quad C > 0$$

$$(1.59) \quad B > C .$$

En appliquant ce théorème à l'exemple spécifique [équations (1.49) et (1.50)], on peut voir que les conditions mathématiques données par l'équation (1.59) correspondent à l'hypothèse que la population proie au point d'équilibre (éventuellement instable)

$$\frac{dN_1}{dt} = \frac{dN_2}{dt} = 0$$

est plus petite que celle maintenue par les ressources de l'environnement en l'absence de prédateur. Explicitement, l'équation (1.59) impose

$$(1.60) \quad Kf > \ln\left[\frac{\beta}{\beta - b}\right] .$$

Les autres conditions données par les équations (1.53) à (1.58) sont satisfaites par le modèle donné par les équations (1.49) et (1.50).

Ainsi, une étude des équations linéarisées peut mettre en évidence un point d'équilibre instable et il ne faut pas conclure directement à une instabilité du système car il peut y avoir un cycle limite. En passant à la limite $K \rightarrow \infty$, $c \rightarrow 0$ (avec $ck = \text{constant}$), $f \rightarrow 0$ (avec $f\beta = \text{constant}$) dans les équations (1.49) et (1.50), on retrouve les équations classiques de Lotka-Volterra dont la solution est un ensemble de cycles fermés caractérisé par ce qu'on appelle une stabilité orbitale, comme nous l'avons vu. La fonction d'autocorrélation permet de tester si on a affaire à une stabilité orbitale ou à un cycle limite.

4.6.- La fonction d'autocorrélation

Cette différence entre les deux types de comportement, stabilité orbitale et cycle limite, peut se détecter par l'étude du comportement

de la fonction d'autocorrélation de concentration. De plus, la méthode utilisant la fonction d'autocorrélation est également utilisée expérimentalement pour obtenir des spectres de fréquence [voir par exemple, Platt *et al.* (1970)]. Cette fonction a pour définition :

$$(1.61) \quad C(\tau) = \frac{\langle \overline{X(t) X(t+\tau)} \rangle}{\langle \overline{X^2(t)} \rangle} .$$

Dans cette égalité, les crochets représentent une *moyenne d'ensemble* par rapport aux conditions initiales et la barre horizontale une *moyenne temporelle*.

A cette fonction d'autocorrélation correspond la *fonction spectrale* $G(\omega)$

$$(1.62) \quad G(\omega) = \int_0^{\infty} C(\tau) \cos \omega \tau \, d\tau$$

[pour plus de renseignements sur ces méthodes, voir par exemple Wax (1954); Max (1972)].

Dans le cas d'un cycle limite, la fonction spectrale $G(\omega)$ se situe dans une bande de fréquences étroite autour de la fréquence fondamentale. Au contraire, dans le cas du système de Lotka-Volterra, on trouve une large dispersion des fréquences.

En effet, Lefever et Nicolis (1971) ont donné quelques simulations numériques du modèle de Lotka-Volterra. Ils sont partis de la fonction d'autocorrélation suivante :

$$(1.63) \quad C(\tau) = \sum_m p_m T_m^{-1} \int_0^{T_m} X_m(t) X_m(t+\tau) \, dt$$

où l'indice m représente la $m^{\text{ème}}$ orbite et p_m la probabilité d'avoir cette orbite.

Tout d'abord, ils ont considéré que p_m satisfait à

$$(1.64) \quad p_m = \{N[\overline{X^2(t)}]_m\}^{-1}$$

où N est le nombre d'orbites considérées.

La fonction spectrale est obtenue en simulant numériquement les équations de Lotka-Volterra. Le spectre de fréquences est fondamentalement différent du cas linéaire qui consisterait en une fonction delta en $\omega = \omega_0$.

Ensuite, ils ont considéré que p_m satisfait à

$$(1.65) \quad p \sim \exp[\alpha(V - V_0)]$$

où α est une constante et V est une fonction qui reste constante le long d'une trajectoire donnée (V_0 étant la valeur de V à l'état stationnaire), c'est-à-dire la constante du mouvement du système de Lotka-Volterra.

La fonction spectrale $G(\omega)$ obtenue par simulation numérique est très semblable à la précédente.

L'objection fondamentale que l'on doit faire à ce type de calcul est la suivante. Une des propriétés des équations de Lotka-Volterra étant de *ne pas posséder de mécanisme interne* de régression des fluctuations, on se trouve obligé d'introduire *artificiellement et a priori* une fonction de distribution des différents états accessibles au système. Ce point sera discuté plus loin lors de la présentation de la théorie de Kerner (1971). La mécanique statistique qu'il a faite des systèmes de Lotka-Volterra fait l'objet des mêmes objections.

Remarque

L'étude du spectre de fréquences d'un écosystème se heurte à une difficulté. Le spectre de fréquences des perturbations de l'environnement est difficile à séparer du spectre de l'écosystème. De plus, il y a un couplage entre les fréquences des variations de l'environnement et les fréquences de l'écosystème. Etudions un exemple simple.

4.7.- Couplage écosystème-environnement

Afin d'étudier les variations dans le comportement des systèmes écologiques interagissant avec leur environnement, on a couplé les équations de Lotka-Volterra pour des proie-prédateur avec une variation cyclique d'un paramètre de l'environnement influençant le taux de natalité-mortalité de la proie.

La forme générale des équations de Lotka-Volterra pour deux espèces proie-prédateur est [équations (1.49) et (1.50)] :

$$(1.66) \quad \frac{dN_1}{dt} = k_1 N_1 - k_2 N_1 N_2$$

$$(1.67) \quad \frac{dN_2}{dt} = -k_3 N_2 + k_4 N_1 N_2$$

où k_1 , k_2 , k_3 et k_4 sont des constantes. En pratique, k_1 dépend fortement des facteurs de l'environnement. Pour étudier les effets des variations de l'environnement sur le comportement de l'écosystème, considérons une variation de k_1 donnée par l'équation simple :

$$(1.68) \quad \frac{db}{dt} = -k_1 N_1 + \hat{a} + a \sin(\omega t + \phi)$$

avec

$$(1.69) \quad k_1 = k_1' b$$

où b est la quantité de nutriment dont les caractéristiques de production sont données par \hat{a} , le taux moyen et $a \sin(\omega t + \phi)$, a représentant l'intensité du taux fluctuant, ω la fréquence et ϕ la phase. Les valeurs numériques suivantes ont été prises en considération : $k_1' = 1$, $k_2 = 1$, $k_3 = 0,5$, $k_4 = 1$, $\hat{a} = 0,25$, $a = 0,125$, $\phi = 0$. En $t = 0$, $N_1 = 0,5$, $N_2 = 0,5$ et $b = 0,5$.

Trois valeurs différentes de la fréquence ω de l'environnement sont considérées : $\omega = 0,5$, $\omega = 0,1$ et $\omega = 2,5$. Ces trois cas ont été simulés sur ordinateur et les résultats sont donnés aux figures 1, 2 et 3.

A la figure 1, nous voyons qu'après une période transitoire, le taux de natalité-mortalité est pratiquement constant, ce qui conduit à un comportement proche de celui où k_1 est considéré comme constant. L'écosystème augmente donc son autonomie par rapport aux variations de l'environnement en s'auto-organisant. L'intensité des oscillations des deux populations autour de leur moyenne est assez importante et la fréquence de ces oscillations correspond à la fréquence de résonance des équations de Lotka-Volterra, c'est-à-dire :

$$(1.70) \quad \omega_0 \sim [k_1 k_3]^{\frac{1}{2}} = 0,5.$$

Notez que la fréquence des oscillations de k_1 est le double de la fréquence ω_0 .

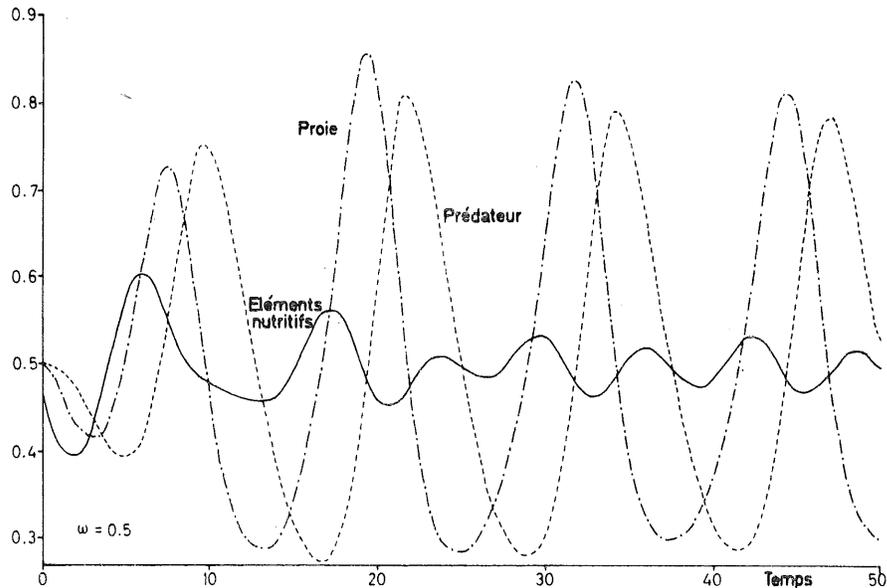


fig. 1.

L'écosystème s'auto-organise pour diminuer la variation de nutriment (5 %) et se rend autonome par rapport aux fortes variations de l'environnement (100 %). La fréquence des oscillations est proche de la fréquence des variations de l'environnement. La fréquence des nutriments est deux fois celle de la fréquence de l'environnement.

Il est bien connu que les équations de Lotka-Volterra pour deux populations proie-prédateur se comportent comme une "horloge biologique". Certainement, il y a un avantage sélectif pour un système écologique de synchroniser son spectre de fréquences aux fréquences de l'environnement (adaptation). Les fréquences les plus naturelles étant celles des rythmes naturels. De plus, dans ces conditions, les systèmes écologiques ont une performance maximum due au transfert d'énergie par résonance.

Ce phénomène de couplage écosystème-environnement, par transfert d'énergie par résonance est à l'origine de la difficulté de séparer les deux types de fluctuations qui se présentent dans les systèmes écologiques.

Comme, dans un couplage écosystème-environnement, l'écosystème s'auto-organise afin de réduire les variations de son environnement (et en accroissant par là sa stabilité), il est impossible de séparer

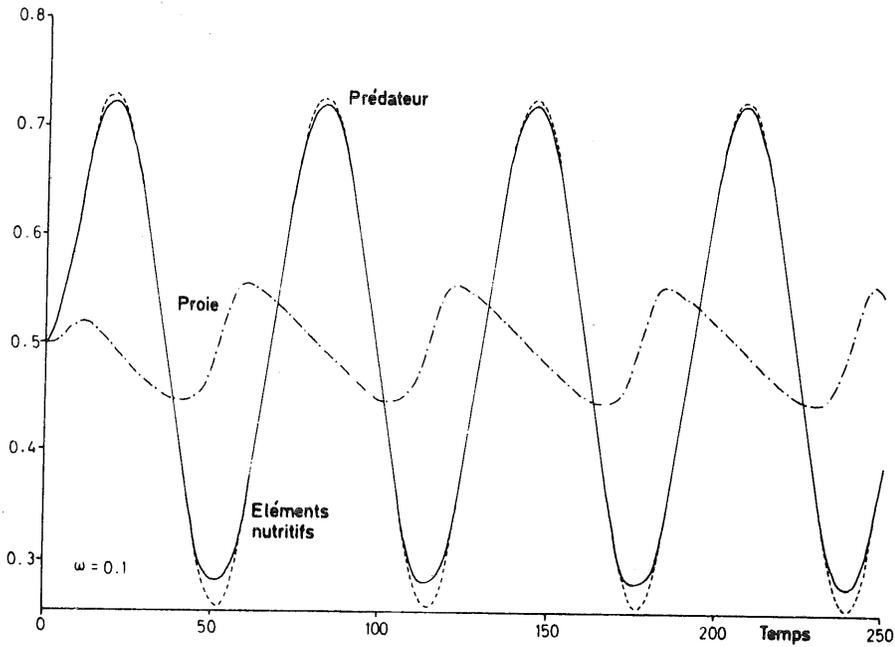


fig. 2.

La fréquence des variations de l'environnement est cinq fois plus petite. Les oscillations du prédateur sont proches des variations de nutriment bien que le nutriment agisse sur la proie. Ainsi, les variations de l'environnement peuvent causer des perturbations aux espèces non directement affectées par ces variations. Notez également que la fréquence des oscillations est la fréquence de l'environnement.

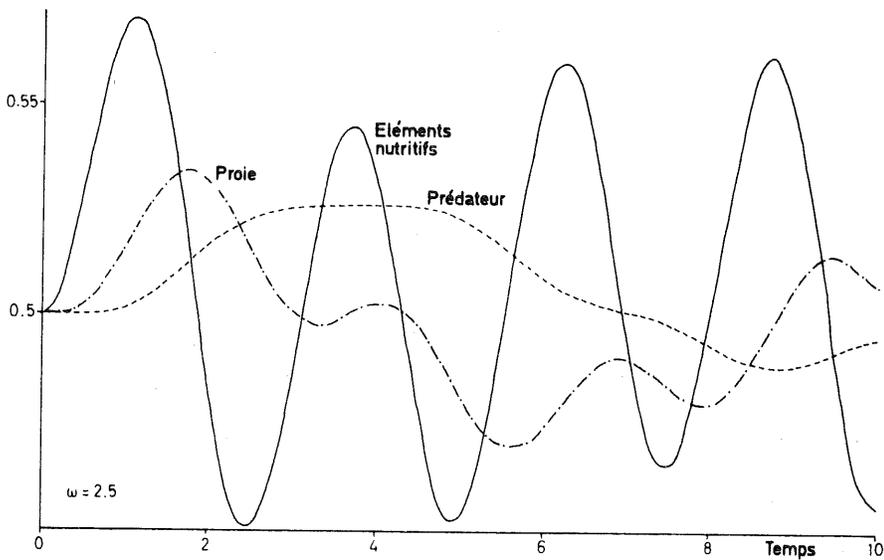


fig. 3.

La fréquence des variations de l'environnement est cinq fois plus élevée. Dans ce cas, la fréquence interne de l'écosystème interagit avec la fréquence externe.

les fluctuations externes et internes. L'écosystème se comporte comme un tout avec son environnement et représente un aspect global de l'organisation spatio-temporelle et il n'est pas toujours possible de savoir quelle fluctuation est due à des propriétés internes ou externes de l'écosystème quand le couplage est fort. Huang et Morowitz (1972) ont pris la constante de mouvement des équations de Lotka-Volterra qui est insensible aux fluctuations du type Volterra afin de détecter des perturbations externes. Ils séparent les fluctuations en deux parties : les fluctuations internes qui se passent sous des conditions externes constantes et les fluctuations externes qui sont dues aux variations des variables de l'environnement. Leur hypothèse de séparer les fluctuations en deux composantes peut conduire à une fausse compréhension de l'organisation globale de couplage écosystème-environnement.

Aux figures 2 et 3, nous donnons la réponse de l'écosystème à deux fréquences différentes de l'environnement. D'abord, pour une fréquence faible, $\omega = 0,1$, le comportement est tout à fait différent et, de façon surprenante, c'est le prédateur et non la proie qui est le plus altéré. Ensuite, à haute fréquence, $\omega = 2,5$, la fréquence de l'écosystème interagit avec la fréquence de l'environnement et l'amplitude des oscillations est très faible.

Références

- BLUMBERG, A.A., (1968). Logistic growth rate function, *J. Theoret. Biol.*, 21, 42-44.
- CESARI, L., (1963). *Asymptotic behaviour and stability problems in Ordinary differential equations*, Academic Press.
- CUNNINGHAM, W.J., (1963). *Analyse non-linéaire*, Dunod, Paris.
- DAVIS, H.T., (1952). *Introduction to non-linear differential and integral equations*, Dover, New York.
- GARFINKEL, D., (1967). Effect on stability of Lotka-Volterra ecological systems of imposing strict territorial limits on population, *J. Theoret. Biol.*, 14, 325-327.

- GILPIN, M.E., (1972). Enriched predator-prey systems : Theoretical stability, *Science*, 177, 902-904.
- GLANSDORFF, P. and PRIGOGINE, I., (1971). *Structure, stability and fluctuations*, Wiley-Interscience.
- HUANG, H.W. and MOROWITZ, H.J., (1972). A method for phenomenological analysis of ecological data, *J. Theoret. Biol.*, 55, 489-503.
- IVLEV, V.S., (1961). *Experimental ecology of the feeding of fishes*, Yale Univ. Press, New Haven, Conn.
- KERNER, (1971). *Gibbs ensemble biological ensemble*, Gordon and Breach, New York.
- KOLMOGOROFF, A., (1936). Sulla teoria di Volterra della lotta per l'esistenza, *G. Istit. Ital. Degli Attuari*, 7, 74-80.
- KOSTITZIN, V.A., (1934). *Symbiose, parasitisme et évolution* (Etude mathématique), Hermann et Cie, Paris.
- KOSTITZIN, V.A., (1937). *Biologie mathématique*, Colin, Paris.
- KOSTITZIN, V.A., (1939). *Mathematical Biology*, G.G. Harrap, London.
- LA SALLE and LEFSCHETZ, (1961). *Stability by Lyapunov's direct method with applications*, Academic Press.
- LEFEVER, R. and NICOLIS, G., (1971). Chemical instabilities and sustained oscillations, *J. Theoret. Biol.*, 30, 267-284.
- LOTKA, A.J., (1925). *Elements of Physical Biology*, William and Wilkins, Baltimore.
- LOTKA, A.J., (1956). *Elements of mathematical biophysics*, Dover Publications Inc., New York.
- MALTHUS, T.R., (1798). *An essay on the principle of population*, Johnson, London.
- MARGALEF, R., (1967). Some concepts relative to the organization of plankton, *Oceanogr. Mar. Biol. Ann. Rev.*, 5, 257-289.
- MARGALEF, R., (1973). Some critical remarks on the usual approaches to ecological modelling, in *Investigation Pesquera*, 37 (3), 621-640.
- MAY, R.M., (1972). Limit cycles in predator-prey communities, *Science*, 177, 900-902.
- MAX, J., (1972). *Traitement du signal*, Masson et Cie, Paris.

- MINORSKY, N., (1962). *Non-linear oscillations*, Van Nostrand.
- PARS, L.A., (1968). *A treatise on analytical dynamics*, Heineman, London.
- PEARL, R., (1924). *Studies in human biology*, Williams and Wilkins, Baltimore.
- PLATT, T., DICKIE, L.M. and TRITES, W., (1970). Spatial heterogeneity of phytoplankton in a near shore environment, *J. Fish. Res. Bd. Canada*, 27, 1453-1473.
- RESCIGNO, A. and RICHARDSON, I.W., (1972), in *Foundation of Mathematical Biology*, ed. R. Rosen, Academic Press, vol. III, 283-360.
- ROSENZWEIG, M.L., (1972). Enriched predator-prey systems : Theoretical stability (a comment), *Science*, 177, 904.
- SHANNON, C.E. and WEAVER, W., (1963). *The mathematical theory of communications*, Urbana, University of Illinois Press.
- VERHULST, P.F., (1845). *Nuov. Mem. Acad. Royale*, Bruxelles, 18, 1.
- VERHULST, P.F., (1847). *Nuov. Mem. Acad. Royale*, Bruxelles, 20, 1.
- VOLTERRA, V., (1927). Variazioni e fluttuazioni del numero d'individui & in specie animali conviventi, *Mem. R. Comitato Talassografico Ital.*, 131, 1-142.
- VOLTERRA, V., (1931). *Leçon sur la théorie mathématique de la lutte pour la vie*, Paris, Gauthier-Villars.
- WAX, N., (1954). *Selected papers on noise and stochastic processes*, Dover, New York.
- ZUBOV, V.I., (1964). *Methods of A.M. Lyapunov and their application*, Noordhoff-Groningen, The Netherlands.

Chapitre II

La théorie stochastique en dynamique des populations biologiques

Introduction

La première tentative sérieuse de versions stochastiques des modèles déterministes fut faite par Feller (1939).

Mais, comme le dit Chapman (1967), les modèles stochastiques sont encore plus difficilement traitables analytiquement que les modèles déterministes. L'approche analytique la plus simple consiste à remplacer l'équation différentielle de croissance par des probabilités de transition qui peuvent dépendre de la grandeur de la population et du temps [voir Kendall (1952)]. Cependant, comme Bailey (1964), p. 186, l'a observé, les probabilités de transition sont typiquement des fonctions non-linéaires des grandeurs des populations.

De plus, la source la plus importante de difficultés réside dans le réalisme du modèle. Comme Kerner (1971) l'a montré, en faisant une mécanique statistique des espèces biologiques interagissantes, nous sommes, en écologie, en face d'une quantité effrayante de variables et de données effectives.

Afin de bien se rendre compte de la différence fondamentale qui existe entre "la pensée déterministe" et la "pensée stochastique", nous allons revoir un certain nombre de modèles sous l'angle stochastique.

1.- Processus de "naissance et de mort"

Dans la méthode générale, on part de la fonction génératrice de probabilités

$$(2.1) \quad P(x,t) = \sum_{N=0}^{\infty} p_N(t) x^N ,$$

de la fonction génératrice de moments

$$(2.2) \quad M(\theta,t) = P(e^\theta, t) ,$$

ou de la fonction génératrice de cumulants

$$(2.3) \quad K = \log M .$$

Ainsi, on travaille avec ces fonctions plutôt qu'avec les probabilités $p_N(t)$ elles-mêmes.

Supposons que la grandeur de la population au temps t soit donnée par la variable aléatoire $X(t)$, telle que les transitions dans l'intervalle Δt soient indiquées par $\Delta X(t)$. Soit un nombre fini de transitions possibles de probabilités :

$$(2.4) \quad P\{\Delta X(t) = j | X(t)\} = f_j(X) \Delta t , \quad j \neq 0$$

où j est un entier non nul, et f_j est une fonction non négative de X . La probabilité de n'avoir aucune transition est

$$(2.5) \quad P\{\Delta X(t) = 0 | X(t)\} = 1 - \sum_{j=0} f_j(X) \Delta t .$$

Dans l'équation (2.4), nous supposons que les probabilités de transition en Δt dépendent de la grandeur de la population au temps t . L'histoire antérieure du processus n'est pas prise en considération. De tels processus sont appelés des *processus de Markov*.

Il peut être démontré que le processus défini par les équations (2.4) et (2.5) peut être caractérisé par une simple *équation de mouvement* représentée par une équation différentielle partielle pour $P(x,t)$

$$(2.6) \quad \frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \sum_{j \neq 0} (x^j - 1) f_j(x) \frac{\partial}{\partial x} P(x,t)$$

où $f_j(x) \frac{\partial}{\partial x}$ est un opérateur agissant sur $P(x,t)$. L'expression correspondante pour $M(\theta,t)$ est :

$$(2.7) \quad \frac{\partial M(\theta,t)}{\partial t} = \sum_{j \neq 0} (e^{\theta j} - 1) f_j \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \right) M(\theta,t) .$$

Il arrive souvent que j prenne seulement les valeurs $+1$ ou -1 , et que f_j ait une forme très simple.

Considérons tout d'abord le cas du processus de naissance simple.

1.1.- Le processus de naissance simple (analogue stochastique de l'équation de Malthus)

Si nous appliquons ces résultats au processus malthusien, nous voyons qu'une seule espèce de transition est possible, c'est-à-dire $j = 1$. La fonction $f_1(X)$ est simplement $k^+ X$, puisque la probabilité d'une nouvelle naissance en Δt avec N individus est $k^+ N \Delta t$. Substituant dans l'équation (2.6), on obtient :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = k^+ x (x - 1) \frac{\partial P}{\partial x}$$

avec la condition initiale :

$$(2.9) \quad P(x,0) = x^{N_0}.$$

Par des méthodes classiques de résolution, on obtient la solution demandée :

$$(2.10) \quad P(x,t) = [1 - \exp(kt) (1 - x^{-1})]^{-N_0}.$$

En calculant les coefficients de x^n dans (2.10), on obtient la valeur de $p_N(t)$, c'est-à-dire :

$$(2.11) \quad p_N(t) = \binom{N-1}{N_0-1} \exp(-Nk^+t) [\exp(k^+t) - 1]^{N-N_0}, \quad N \geq N_0.$$

A partir de la fonction génératrice de moments :

$$(2.12) \quad M(\theta,t) = \{1 - \exp(k^+t) [1 - \exp(-\theta)]\}^{-N_0}$$

obtenue en substituant $x = \exp(\theta)$ dans l'équation (2.10), la moyenne et la variance s'écrivent

$$(2.13) \quad m(t) = N_0 \exp(k^+t)$$

$$(2.14) \quad \sigma^2(t) = N_0 \exp(k^+t) [\exp(k^+t) - 1].$$

Maintenant, appliquons cette méthode à un processus de naissance et de mort.

1.2.- Le processus de naissance et de mort

Avec en plus un processus de mort, la probabilité de mort d'un individu en Δt peut être donnée par $k^- \Delta t$. La variable j prend alors les deux valeurs $+1$ et -1 , avec $f_1(X) = k^+ X$ et $f_{-1}(X) = k^- X$. L'équation différentielle partielle pour la fonction génératrice de moments est :

$$(2.15) \quad \frac{\partial M}{\partial t} = \{k^+ [\exp(\theta) - 1] + k^- [\exp(-\theta) - 1]\} \frac{\partial M}{\partial \theta}$$

avec la condition initiale :

$$(2.16) \quad M(\theta, 0) = \exp(N_0 \theta) .$$

En résolvant l'équation (2.15) avec la condition initiale (2.16), on obtient

$$(2.17) \quad M(\theta, t) = \left[\frac{k^+ v - 1}{k^- v - 1} \right]^{N_0}$$

où

$$v \equiv [\exp(\theta) - 1] \frac{\exp[(k^+ - k^-) t]}{k^- \exp(\theta) - k^+} .$$

La moyenne et la variance sont obtenues facilement à partir de l'équation (2.17) car elles représentent respectivement les coefficients de θ et θ^2 de $K = \log M$. On trouve

$$(2.18) \quad m(t) = N_0 \exp[(k^+ - k^-) t]$$

$$(2.19) \quad \sigma^2(t) = N \frac{k^+ + k^-}{k^+ - k^-} \exp[(k^+ - k^-) t] \{ \exp[(k^+ - k^-) t] - 1 \} .$$

On voit tout de suite que, comme dans le processus de naissance seule, la moyenne stochastique est identique à l'équation de la théorie déterministe, bien que la forme de la variance stochastique indique la présence de grandes fluctuations.

Afin d'obtenir plus d'informations sur ces fluctuations, considérons le cas particulier où les effets de naissance et de mort se compensent mutuellement, c'est-à-dire $k^- = k^+$. Dans ce cas, les équations (2.18) et (2.19) deviennent :

$$(2.20) \quad m(t) = N_0$$

$$(2.21) \quad \sigma^2(t) = N_0 (k^+ + k^-) t .$$

Le premier résultat [équation (2.20)] est exactement ce que nous attendons, c'est-à-dire que la grandeur de la population moyenne reste à sa valeur initiale. Le second résultat [équation (2.21)], cependant, montre que la variance de la population augmente avec le temps t , et avec le *turnover* de la population, $k^+ = k^-$.

Ce résultat montre qu'il n'y a pas d'état stable (même statistiquement) pour cette population.

Ainsi, des fluctuations de grandeurs infinies sont possibles, ce qui n'est pas réaliste car un mécanisme de régression de ces fluctuations devrait entrer en action. Par exemple, il faudrait tenir compte du fait que le coefficient de natalité décroît en fonction de la densité de la population (épuiement de la nourriture ou limitation de l'espace, etc.).

Avant de poursuivre plus loin la discussion, nous voudrions souligner le fait que, si le taux de naissance et de mortalité sont contrôlés par des facteurs de l'environnement ayant une variation connue dans le temps, il suffit de remplacer k^+ et k^- par $k^+(t)$ et $k^-(t)$ dans l'équation (2.15) [voir Bailey (1964) § 9.3].

Dans la section suivante, nous allons étudier l'effet de la migration sur ce processus de naissance et de mort.

1.3.- L'effet de la migration

Afin d'obtenir des résultats plus réalistes, il faut tenir compte du fait que beaucoup de populations biologiques sont l'objet d'un quelconque phénomène de migration (migration par leurs propres moyens, diffusion "moléculaire", migration par les courants, diffusion turbulente, etc.).

En ce qui concerne l'émigration, le départ d'individus de la population est similaire, comme effet, à la mort, quand la population seule est concernée. Par conséquent, nous pouvons tenir compte de l'émigration par un ajustement convenable du taux de mortalité, puisqu'il est raisonnable de supposer que la probabilité d'une émigration en un temps Δt

est, comme la probabilité d'une mort, proportionnelle à la grandeur de la population.

Avec l'immigration, cependant, la situation est assez différente, et l'hypothèse stochastique la plus simple possible consiste à supposer que de nouveaux individus apparaissent au hasard à un taux ν . La probabilité qu'un nouvel individu apparaisse en Δt est ainsi $k^+ N \Delta t + \nu \Delta t$, en combinant les effets de naissance et d'immigration. La grandeur j prend encore les valeurs $+1$ et -1 , mais maintenant nous avons $f_1 = k^+ X + \nu$, tandis que $f_{-1} = k^- X$ comme auparavant. L'équation différentielle partielle pour la fonction génératrice de moments est immédiatement obtenue :

$$(2.22) \quad \frac{\partial M}{\partial t} = \{k^+ [\exp(\theta) - 1] + k^- [\exp(-\theta) - 1]\} \frac{\partial M}{\partial \theta} + \nu [\exp(\theta) - 1] M$$

avec la condition initiale suivante :

$$(2.23) \quad M(\theta, 0) = \exp(N_0 \theta) .$$

L'équation (2.22) ne diffère de l'équation (2.15) que par le terme additionnel, qui est manifestement une composante d'un processus de Poisson. La solution de l'équation différentielle partielle s'écrit sous la forme :

$$(2.24) \quad M(\theta, t) = \frac{(k^+ - k^-)^n}{k^+} \frac{[k^- (T-1) - (k^- T - k^+) \exp(\theta)]^{N_0}}{[k^+ T - k^- - k^+ (T-1) \exp(\theta)]^{N_0 + \nu/k^+}}$$

où $T = \exp[(k^+ - k^-) t] .$

Un certain nombre de solutions particulières peut nous donner une idée de l'effet de la migration sur le processus de naissance et de mort.

Prenons $N_0 = 0$ et $\exp(\theta) = x$ dans l'équation (2.24) pour obtenir la fonction génératrice de probabilités :

$$(2.25) \quad P(x, t) = \left[\frac{k^+ - k^-}{k^+ T - k^-} \right]^{\nu/k^+} \left[\frac{1 - k^+ (T-1) x}{k^+ T - k^-} \right]^{-\nu/k^+} .$$

La distribution de fréquence de la grandeur de la population est donc binomiale négative dont la moyenne est :

$$(2.26) \quad m(t) = \left[\frac{v}{k^+ - k^-} \right] \{ \exp[(k^+ - k^-) t] - 1 \} .$$

Quand $k^+ > k^-$, la grandeur de la population moyenne croît exponentiellement (pour un temps t grand), avec un taux $k^+ - k^-$ et une échelle dépendant du taux d'immigration.

D'autre part, si $k^+ < k^-$, la valeur asymptotique est $\frac{v}{k^+ - k^-}$. Une forme différente se présente dans le cas critique où la naissance et la mort se compensent exactement; nous avons maintenant $m(t) = vt$, *i.e.* la moyenne stochastique est directement proportionnelle au temps. En résumé, nous pouvons écrire :

$$(2.27) \quad m(t) \sim \frac{v}{k^+ - k^-} \exp[(k^+ - k^-) t] , \quad k^+ > k^- ,$$

$$(2.28) \quad = vt \quad k^+ = k^- ,$$

$$(2.29) \quad \sim \frac{v}{k^- - k^+} \quad k^+ < k^- .$$

Dans le cas particulier où $k^+ < k^-$, non seulement la moyenne stochastique tend vers une constante, mais toute la distribution a une forme bien déterminée; quand $t \rightarrow \infty$, l'équation (2.25) devient :

$$(2.30) \quad P(x, \infty) = \left[\frac{k^- - k^+ x}{k^- - k^+} \right]^{-\nu/k^+} , \quad k^+ < k^- .$$

De nouveau, nous pouvons être intéressé par un processus représentant seulement la mort et l'immigration, c'est-à-dire $k^+ = 0$. Ce modèle pourrait s'appliquer au nombre de particules présent dans un petit volume ΔV au sein d'un système plus grand, V . Ce cas a été utilisé par Chandrasekhar (1961) pour étudier des particules colloïdales en suspension. En somme, nous supposons que l'immigration de l'environnement ($V - \Delta V$) est un processus aléatoire de Poisson avec un paramètre ν , et que l'émigration (ou la mort) dans le volume ΔV est proportionnel au centre de particules présentes. Nous pouvons déduire la distribution de probabilité en calculant la limite $k^+ \rightarrow 0$ de l'équation (2.24), c'est-à-dire :

$$(2.31) \quad \lim_{k^+ \rightarrow 0} P(x,t) = \exp\left\{\frac{\nu}{k^-} [1 - \exp(-k^- t) (x - 1)]\right\}$$

qui est simplement une distribution de Poisson dont le paramètre est $(\frac{\nu}{k^-}) [1 - \exp(-k^- t)]$. Pour des temps grands, ce paramètre tend vers $\frac{\nu}{k^-}$.

Un autre type de distribution peut également être obtenu si nous considérons la situation dans laquelle ν est très petit, c'est-à-dire que nous prenons $\nu \rightarrow 0$ mais en gardant k^+ et k^- constants. Ceci signifie que nous supposons l'effet général de l'immigration négligeable, mais juste suffisant pour restaurer le processus s'il arrive à s'éteindre.

On obtient dans ce cas, une distribution logarithmique pour laquelle la fonction génératrice de probabilités est :

$$(2.32) \quad P(x,t) = \frac{\log(1 - Bx)}{\log(1 - B)}$$

où
$$B = \frac{k^+(T - 1)}{k^+T - k^-}$$

En général, des distributions différentes peuvent décrire des phénomènes stochastiques, ces distributions pouvant résulter de phénomènes tout à fait différents, et la connaissance d'une distribution particulière ne peut pas nous renseigner beaucoup sur les mécanismes qui engendrent ce phénomène.

2.- L'analogie stochastique de l'interaction proie-prédateur

Dans ce premier modèle stochastique, dû à Chiang (1954), le nombre d'individus des différentes espèces est considéré comme étant une variable aléatoire. La distribution de probabilités de naissance et de mort de ces individus est donnée par une équation différentielle.

Considérons un système à deux espèces N_1 et N_2 . Soient $X(t)$ et $Y(t)$ les variables aléatoires qui représentent les grandeurs des populations des deux espèces. Soit $P(x,y;t)$ ($x,y = 0,1,\dots$) la fonction de distribution mixte. Les événements qui peuvent causer un changement dans les grandeurs des populations des deux espèces et, donc,

dans $P(x,y;t)$ sont les suivants :

i) La naissance d'un individu de l'espèce N_1 durant l'intervalle de temps dt . Soit $p_x dt$ la probabilité de cet événement.

ii) La mort d'un individu de l'espèce N_1 durant l'intervalle de temps dt . Soit $q_x dt$ la probabilité de cet événement.

iii) et iv) Les événements correspondants à (i) et (ii) pour l'espèce N_2 . Soient $p_y dt$ et $q_y dt$ respectivement les probabilités.

Les p et les q dépendent des interactions entre les espèces.

Faisons l'hypothèse que la probabilité de transition du nombre d'individus N_1 et N_2 dans l'intervalle dt est de l'ordre de dt , $P(x,y;t)$ satisfait alors l'équation différentielle suivante :

$$(2.33) \quad \frac{dP(x,y;t)}{dt} = (p_x + q_x + p_y + q_y) P(x,y;t) + p_{x-1} P(x-1, y; t) + p_{y-1} P(x, y-1; t) + q_{x+1} P(x+1, y; t) + q_{y+1} P(x, y+1; t) .$$

La solution de cette équation dépend du type d'interaction. Considérons le cas de l'interaction proie-prédateur : soient N_1 la proie et N_2 le prédateur. En analogie avec le cas déterministe, nous faisons les hypothèses suivantes pour les coefficients p et q de l'équation (2.33) :

$$(2.34) \quad p_x = k_1 x, \quad q_x = k_2 xy, \quad p_y = k_4 xy, \quad q_y = k_3 y .$$

En substituant (2.34) dans (2.33), nous obtenons une équation différentielle qui peut, en principe, être résolue. La méthode classique de résolution consiste à introduire une fonction génératrice définie par

$$(2.35) \quad G(s,z;t) = \sum_{x=0}^{\infty} \sum_{y=0}^{\infty} s^x z^y P(x,y;t) .$$

P est le coefficient de $s^x z^y$ dans le développement de G .

En multipliant (2.33) par $s^x z^y$ et sommant sur x et y , nous obtenons l'équation différentielle satisfaite par $G(s,z;t)$, c'est-à-dire

$$\frac{\partial G}{\partial t} = k_1 s(s-1) \frac{\partial G}{\partial s} - k_3 (z-1) \frac{\partial G}{\partial z} + [k_4 z(1-s) + k_2 sz(z-1)] \frac{\partial^2 G}{\partial z \partial s} .$$

Sans résoudre l'équation (2.36), il est possible d'obtenir les équations des moments en x et y . Soient $E(x)$ et $E(y)$ les espérances mathématiques de x et y , c'est-à-dire :

$$(2.37) \quad E(x) = \sum_{x=0} \sum_{y=0} x P(x,y;t)$$

$$(2.38) \quad E(y) = \sum_{x=0} \sum_{y=0} y P(x,y;t)$$

et, à partir de (2.33) et (2.34), on obtient :

$$(2.39) \quad \frac{dE(x)}{dt} = k_1 E(x) - k_2 E(xy)$$

$$(2.40) \quad \frac{dE(y)}{dt} = -k_3 E(y) + k_4 E(x,y) .$$

Ces équations doivent être comparées aux équations déterministes. $E(x)$ et $E(y)$ sont les analogues de N_1 et N_2 . Les grandeurs des deux populations sont mutuellement dépendantes à cause de leur interaction. Mais ce modèle stochastique est différent du modèle déterministe, car

$$(2.41) \quad E(x,y) \neq E(x) E(y) .$$

Il y a plusieurs façons de discuter ce processus. La première consiste à résoudre l'équation (2.36) et à calculer les différentes espérances mathématiques $E(x)$, $E(y)$, $E(xy)$, etc. Une autre méthode consiste à construire une hiérarchie d'équations pour les espérances de x , y , xy , x^2 , y^2 , x^3 , etc., les équations (2.39) et (2.40) représentant la première étape d'une telle hiérarchie. Une première approche de la solution est évidemment celle qui consiste à prendre $E(xy) = E(x) E(y)$, ce qui revient à résoudre les équations de Lotka-Volterra.

Bartlett (1957) a simulé des réalisations artificielles par la méthode classique de Monte Carlo du modèle proie-prédateur. Il a montré qu'après quelques oscillations (de trois à quatre), le prédateur disparaît. En d'autres mots, le modèle stochastique de Lotka-Volterra est instable. Ceci est dû au fait qu'il n'y a pas de mécanisme interne entraînant la régression des fluctuations aléatoires. Ce résultat est

d'ailleurs confirmé théoriquement. En effet, on peut étudier le comportement de fluctuations autour de l'état stationnaire en supposant que les équations de Lotka-Volterra définissent un processus markovien de naissance et de mort dans l'espace du nombre de populations.

Nicolis (1972) considère les équations de Lotka-Volterra

$$(2.42) \quad \frac{dX}{dt} = \epsilon_1 X - k_2 XY$$

$$(2.43) \quad \frac{dY}{dt} = k_2 XY - \epsilon_3 Y$$

où il prend :

$$(2.44) \quad \epsilon_1 = k_1 A$$

$$(2.45) \quad \epsilon_3 = k_3 D .$$

L'équation donnant la distribution de probabilité $P(x,y;t)$ est alors :

$$(2.46) \quad \begin{aligned} \frac{dP}{dt} = & A(X-1) P(X-1, Y; t) - AXP(X,Y;t) \\ & + (X+1)(Y-1) P(X+1, Y-1; t) - XYP(X,Y;t) \\ & + D(Y+1) P(X, Y+1; t) - DYP(X,Y;t) . \end{aligned}$$

Cette équation, ayant une structure très compliquée, peut seulement être analysée à la limite des petites fluctuations autour de l'état stationnaire. On peut exprimer cette limite en appliquant la méthode de van Kampen (1969) qui consiste à considérer les variables x et y définies par :

$$(2.47) \quad X = \bar{X} + \epsilon_1 x , \quad \epsilon_1 \alpha \left| \frac{x}{\bar{X}} \right| \ll 1$$

$$(2.48) \quad Y = \bar{Y} + \epsilon_2 y , \quad \epsilon_2 \alpha \left| \frac{y}{\bar{Y}} \right| \ll 1$$

où \bar{X} est un régime macroscopique proche de l'état stationnaire et x est une fluctuation aléatoire. En développant P et les coefficients de l'équation (2.46) suivant les puissances des ϵ , on obtient, au premier ordre non trivial, une équation de Fokker-Planck de la forme :

$$(2.49) \quad \frac{\partial P(x,y;\tau)}{\partial \tau} = (y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y}) P(x,y;\tau) + [(\frac{A}{D})^{\frac{1}{2}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + (\frac{D}{A})^{\frac{1}{2}} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial x \partial y}] P(x,y;\tau)$$

en prenant :

$$(2.50) \quad X = X_0 + D^{\frac{1}{2}} x$$

$$(2.51) \quad Y = Y_0 + A^{\frac{1}{2}} y$$

$$(2.52)^1 \quad k_1 = k_2 = k_3 = k$$

$$(2.53) \quad \tau = k(AD)^{\frac{1}{2}} t = \omega_0 t .$$

Les résultats qui sont obtenus à partir de l'équation (2.49) décrivent seulement le comportement du système pour des temps courts autour de l'état stationnaire pour de petites fluctuations.

A partir de l'équation (2.49), on peut calculer les seconds moments de la distribution de probabilité. En multipliant les deux membres de l'équation (2.49) par x^2 , y^2 et xy et en intégrant sur x et y , en utilisant les conditions aux limites

$$(2.54) \quad P(\pm\infty, y; t) = P(x, \pm\infty, t) = 0$$

on obtient

$$(2.55) \quad \frac{d\overline{x^2}}{d\tau} = -2\overline{xy} + 2\lambda$$

$$(2.56) \quad \frac{d\overline{y^2}}{d\tau} = -2\overline{xy} + \frac{2}{\lambda}$$

$$(2.57) \quad \frac{d(\overline{xy})}{d\tau} = \overline{x^2} - \overline{y^2} - 1$$

avec $\lambda = (\frac{A}{D})^{\frac{1}{2}} .$

On voit immédiatement que ce système n'admet pas de solution stationnaire. Les solutions, fonctions du temps, sont les suivantes :

1. Cette condition n'est pas restrictive (voir équations réduites au chapitre III).

$$(2.58) \quad \overline{x^2} = -\frac{1}{2} \left[\left(-\lambda + \frac{1}{\lambda}\right) \sin 2\tau + \cos 2\tau \right] + \left(\lambda + \frac{1}{\lambda}\right) \tau + \frac{3}{2}$$

$$(2.59) \quad \overline{y^2} = \frac{1}{2} \left[\left(-\lambda + \frac{1}{\lambda}\right) \sin 2\tau + \cos 2\tau \right] + \left(\lambda + \frac{1}{\lambda}\right) \tau + \frac{1}{2}$$

$$(2.60) \quad \overline{xy} = \frac{1}{2} \left(-\lambda + \frac{1}{\lambda}\right) (\cos 2\tau - 1) - \frac{1}{2} \sin 2\tau$$

en utilisant les conditions initiales

$$(2.61) \quad (\overline{xy})_{\tau=0} = 0$$

$$(2.62) \quad (\overline{x^2})_{\tau=0} = (\overline{y^2})_{\tau=0} = 1 .$$

Les variances $\overline{x^2}$ et $\overline{y^2}$ augmentent en fonction du temps et s'écartent immédiatement de la distribution de Poisson. Stochastiquement, l'état stationnaire est sans signification puisque, même à la limite de fluctuations infinitésimales, le système présente des fluctuations critiques anormales qui s'accroissent linéairement avec un bruit de fond périodique. Ecologiquement, cette situation a une interprétation claire. La distribution stationnaire de la proie n'est jamais stable parce qu'il n'y a pas de mécanisme interne qui rétablit l'équilibre une fois que le système a été perturbé par le prédateur.

Ce comportement particulier des moments d'ordre deux peut se déduire directement par inspection de la structure de l'équation différentielle partielle (2.49). En effet, l'équation (2.49) est elliptique partout dans le plan (x,y) ($-\infty < x, y < +\infty$). Elle décrit qualitativement un phénomène de diffusion, dans un milieu infini, sans amortissement (à cause de la structure particulière des termes de dérivée première), avec une condition initiale correspondant à une inhomogénéité locale au voisinage de l'origine. Donc, pour $\tau > 0$ dans l'espace (x,y) , l'inhomogénéité initiale tend à s'adoucir. Evidemment, de nouveaux effets associés aux grandes fluctuations modifient ce comportement au fur et à mesure que le temps s'écoule [l'équation (2.49) n'étant valable que pour des temps petits]. Les résultats obtenus sont une conséquence directe de l'hypothèse que les équations de Lotka-Volterra définissent un processus de Markov dans l'espace (x,y) . Une description dans

l'espace de phase conduit à des résultats différents. Voyons tout d'abord comment les fluctuations peuvent être décrites dans un système physique simple contenant n particules.

3.- L'équation cinétique de Boltzmann

Dans une théorie de l'équilibre local, les fluctuations quadratiques moyennes dans un système dilué sont données par une expression universelle indépendante du modèle particulier.

Dans un système dynamique, tel qu'un mélange réactif dilué, l'équilibre local est assuré par des collisions élastiques fréquentes avec un composant inerte dense. Ce dernier restaure continuellement une distribution maxwellienne moyenne qui, autrement, serait perturbée par les collisions réactives. Mais ce processus dynamique comporte deux échelles de temps très différentes : le temps de relaxation des collisions élastiques, qui est très court, et l'échelle macroscopique des changements de composition chimique résultant des collisions réactives. Les effets dus au temps de relaxation sont fondamentalement microscopiques et ne peuvent pas être corrects dans une description où les états internes (*e.g.* les valeurs de l'impulsion) des molécules sont négligés. Donc, dans un problème de cinétique chimique réaliste, les fluctuations doivent être discutées sur la base d'une équation cinétique telle que l'équation de Boltzmann contenant les collisions *réactives et élastiques*, plutôt qu'en termes d'une équation cinétique macroscopique [McQuarrie (1967); Bharucha-Reid (1960)] dans laquelle les effets dus à l'échelle de temps rapide sont des moyennes. La contraction dans la description d'un phénomène en théorie stochastique induit un changement de caractère du processus stochastique [*e.g.* Kac (1959)].

C'est seulement à la limite des *systèmes linéaires* ou des *systèmes proches de l'équilibre*, dans laquelle les fluctuations présentent une échelle de temps simple, que les deux approches deviennent compatibles [Oppenheim *et al.* (1969)]. Kac (1959) et Siegert (1949) sont partis de la densité de probabilité de Boltzmann \bar{F}_a^γ d'un composant γ correspondant à un état interne α (la barre représente une quantité moyenne).

Ils ont donné une loi d'évolution de cette fonction en supposant que l'équation de Boltzmann (contenant les collisions réactives et élastiques) définit un processus de Markov dans l'espace de phase complet.

L'application de cette théorie à la description dans l'espace de phase du modèle de Lotka-Volterra a été faite par Nicolis (1972).

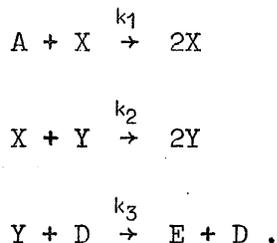
3.1.- Description dans l'espace de phase du modèle de Lotka-Volterra

Ainsi, dans cette description, les fluctuations définissent un processus de Markov dans l'espace de phase complet, en incluant les états internes. En supposant que le système est maintenu *uniforme dans l'espace*, on peut dériver les deux équations de Boltzmann couplées pour les densités moyennes des particules des constituants X et Y dans un état interne donné :

$$(2.63) \quad \frac{d\bar{F}_a^X}{dt} = - \sum_{jkl} A_{ajkl} \bar{F}_a^X \bar{F}_j^A + 2 \sum_{jkl} A_{jkal} \bar{F}_j^X \bar{F}_k^A - \sum_{jkl} B_{ajkl} \bar{F}_a^X \bar{F}_j^Y + \left(\frac{d\bar{F}_a^X}{dt}\right)_{el}$$

$$(2.64) \quad \frac{d\bar{F}_\beta^Y}{dt} = - \sum_{jkl} B_{\beta jkl} \bar{F}_j^X \bar{F}_\beta^Y + 2 \sum_{jkl} B_{jk\beta l} \bar{F}_j^X \bar{F}_k^Y - \sum_{jkl} C_{\beta jkl} \bar{F}_\beta^X \bar{F}_j^D + \left(\frac{d\bar{F}_\beta^Y}{dt}\right)_{el}$$

correspondant à l'analogie chimique du modèle de Lotka-Volterra



A_{ijkl} , B_{ijkl} , C_{ijkl} sont les probabilités de transition par unité de temps pour la diffusion entre deux molécules dans les états (ij) en deux molécules dans les états (kl) pour les réactions correspondant aux trois étapes ci-dessus. Elles satisfont un certain nombre de conditions imposées par la mécanique d'un processus de diffusion :

$$(2.65) \quad A_{ii,kl} = 0$$

$$(2.66) \quad A_{ii,kl} = A_{ji,kl} = A_{ij,lk} \geq 0 \quad \text{pour} \quad (kl) \neq (ij)$$

$$(2.67) \quad \sum_{kl} A_{ij,kl} = 0 .$$

Si on considère en plus la réversibilité microscopique, nous avons :

$$(2.68) \quad A_{ij,kl} = A_{kl,ij} .$$

Les termes $(\frac{d\bar{F}_a^X}{dt})_{el}$ et $(\frac{d\bar{F}_a^Y}{dt})_{el}$ décrivent l'effet des collisions élastiques : ces termes tombent quand le système atteint un régime d'équilibre local.

La structure de ces équations est tout à fait différente des équations de Lotka-Volterra en dépit du fait que, si on fait la moyenne sur les états internes, on obtient identiquement les équations de Lotka-Volterra.

La différence la plus frappante est que dans les équations de Lotka-Volterra, $\frac{dX}{dt}$ et $\frac{dY}{dt}$ sont proportionnels à X et Y , respectivement. D'autre part, dans les équations ci-dessus, $\frac{d\bar{F}_a^X}{dt}$ n'est pas proportionnel à \bar{F}_a^X en raison des termes exprimant, par exemple, que deux particules de X dans l'état α peuvent être créées à partir de X et Y dans des états internes différents. Donc, on ne devrait pas s'attendre à obtenir une constante de mouvement comme dans l'analyse de Volterra et de Kerner.

Etudions maintenant les fluctuations autour d'un état stationnaire. En supposant que les équations définissent un processus de Markov dans l'espace de phase complet, on obtient, à la limite des petites fluctuations [Nicolis (1972)], les deux équations suivantes, du type Fokker-Planck :

$$(2.69) \quad \frac{\partial P_1(x_a, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_a} x_a P_1(x_a, t) \left[2 \frac{1}{\bar{F}_a^X} \sum_{ijl} A_{ijal} \frac{\bar{F}_i^X}{\bar{F}_j^A} - \frac{\partial(\ln \bar{F}_a^X)}{\partial t} \right] + \frac{\partial^2 P_1(x_a, t)}{\partial x_a^2} \left[2 \sum_{ijl} A_{ijal} \frac{\bar{F}_i^X}{\bar{F}_j^A} - \frac{1}{2} \frac{\partial \bar{F}_a^X}{\partial t} \right]$$

$$\frac{\partial P_1(y_\beta, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y_\beta} y_\beta P_1(y_\beta, t) \left[2 \frac{1}{\bar{f}_\beta^Y} \sum_{ijl} B_{ij\beta l} \bar{f}_i^X \bar{f}_j^Y - \frac{\partial(\ln \bar{f}_\beta^Y)}{\partial t} \right] \\ + \frac{\partial^2 P_1(y_\beta, t)}{\partial y_\beta^2} \left[2 \sum_{ijl} B_{ij\beta l} \bar{f}_i^X \bar{f}_j^Y - \frac{1}{2} \frac{\partial \bar{f}_\beta^Y}{\partial t} \right]$$

avec

$$(2.71) \quad f_a^X = \bar{f}_a^X + x_a$$

$$\text{où} \quad \bar{f}_a = \bar{F}_a(\Delta r \Delta p)$$

représente le nombre moyen de particules dans le volume de l'espace phase $(\Delta r \Delta p)_a$ autour de (r_a, p_a) .

Afin de calculer la distribution de probabilité autour de la solution stationnaire (qui est stable par rapport aux petites fluctuations), il est suffisant de prendre $\frac{\partial P_1}{\partial t} = 0$. On obtient :

$$(2.72) \quad \frac{\partial}{\partial x_a} x_a P_1(x_a) + \bar{f}_a^X \frac{\partial^2 P_1}{\partial x_a^2} = 0$$

$$(2.73) \quad \frac{\partial}{\partial y_\beta} y_\beta P_1(y_\beta) + \bar{f}_\beta^Y \frac{\partial^2 P_1}{\partial y_\beta^2} = 0.$$

On remarque que les probabilités de transitions A_{ijkl} et B_{ijkl} n'apparaissent plus dans ces équations et la solution s'écrit, pour la première équation,

$$(2.74) \quad P_1(x_a) = (2\pi \bar{f}_a^X)^{-1} \exp\left(-\frac{x_a^2}{2 \bar{f}_a^X}\right)$$

$$\text{avec} \quad \overline{(\delta f_a^X)^2} = \bar{f}_a^X$$

et une expression similaire pour la seconde.

δf_a représente les fluctuations du nombre de particules dans l'état α et nous voyons que la distribution est poissonnienne. Donc, une analyse basée sur une formulation stochastique du type naissance et mort est incompatible avec la description dans l'espace de phase. Cela est dû au fait que, par exemple, dans la première étape "chimique", deux particules de X sont produites dans le même état que la particule de X qui se combine avec A.

Donc, toute la difficulté provient de la façon dont on doit faire les moyennes sur les variables du système microscopique pour obtenir les équations macroscopiques correctes.

Les deux niveaux de description correspondent à deux situations écologiques très différentes.

A côté de ces modèles stochastiques du système proie-prédateur, un certain nombre de modèles ont été construits pour des systèmes écologiques constitués d'un grand nombre d'espèces. Nous allons voir en quoi consistent ces modèles qui sont dus à Kerner (1971) et Goel, Maitra et Montroll (1971) et qui sont essentiellement basés sur les méthodes de la mécanique statistique.

4.- La théorie de Kerner

La théorie de Kerner (1971) est basée sur l'existence d'une constante de mouvement des équations de Lotka-Volterra.

Comme on l'a vu au chapitre I, cette constante de mouvement est donnée sous la forme d'une somme de termes individuels, chacun d'eux se référant à une espèce séparée. Ce fait est très important car il permet une spécification naturelle des "composants" du système au sens habituel de la mécanique statistique. A partir de cette constatation, Kerner a construit une mécanique statistique du modèle de Volterra en définissant un ensemble de Gibbs dont chaque élément possède un ensemble de valeurs initiales des $\{v_i\}$ compatibles avec la constante K . L'état de chaque élément de l'ensemble est représenté par un point dans l'espace v_1, \dots, v_n et l'ensemble par la collection des points dans l'espace de phase. Comme cet ensemble évolue avec le temps, cette collection de points se meut dans l'espace de phase. Si $\rho(v_1, \dots, v_n)$ représente la densité de cette collection de points, l'équation de continuité peut s'écrire :

$$(2.75) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial(\rho \dot{v}_i)}{\partial v_i} = 0 .$$

Or, comme

$$(2.76) \quad \frac{\partial \dot{v}_i}{\partial v_i} = 0 .$$

L'équation (2.75) devient

$$(2.77) \quad \frac{D\rho}{Dt} \equiv \frac{\partial \rho}{\partial t} + \Sigma \dot{v}_i \frac{\partial \rho}{\partial v_i} = 0$$

qui est le *théorème de Liouville* de la conservation de la densité dans l'espace de phase.

Afin de pouvoir construire une mécanique statistique du système, on fait les deux hypothèses suivantes :

i) on considère toutes les copies possibles d'un système compatible avec toute l'information qu'on a à son sujet (*e.g.* K) et on pondère chaque copie de manière égale, c'est-à-dire qu'on considère les *probabilités* de chaque événement *a priori égales*;

ii) les moyennes temporelles sur un système simple sont les mêmes que les moyennes sur un ensemble approprié, c'est-à-dire qu'on applique le *théorème ergodique*.

A partir de ces hypothèses, Kerner calcule les moyennes micro-canoniques de différentes fonctions de N_i . En particulier, il montre que :

$$(2.78) \quad E \{N_i\} = N_{i0}$$

$$(2.79) \quad E \{N_i N_j\} = N_{i0} N_{j0} .$$

Pour étudier le comportement d'une partie de l'ensemble, c'est-à-dire seulement v espèces du total n , Kerner définit l'ensemble canonique de Gibbs qui représente la loi de distribution des éléments des points de phase

$$(2.80) \quad \rho_v \sim \exp\left(-\frac{K_v}{\theta}\right)$$

où θ est une constante caractérisant la distribution.

A cause de l'additivité de K sur les espèces, ρ_v peut être mis sous forme factorielle. De plus, à la limite des petites perturbations de l'état stationnaire, on peut montrer que

$$(2.81) \quad \overline{\delta N_i^2} = \bar{N}_i = N_{i0}$$

c'est-à-dire que les fluctuations quadratiques moyennes sont égales à la moyenne (qui est égale à la valeur stationnaire, comme on l'a déjà vu).

S'il y a une constante de mouvement du système, elle est due uniquement à la forme particulière des équations de Lotka-Volterra. En ajoutant d'autres termes aux équations, afin d'y inclure d'autres aspects de la population, il n'y a plus, en général, de constante de mouvement.

Des modèles stochastiques ont été construits afin de voir dans quelles conditions les hypothèses de Kerner pouvaient être justifiées.

5.- La théorie de Goel, Maitra et Montroll

Dans l'analyse stochastique de Goel, Maitra et Montroll (1971), un résultat similaire à celui de Kerner est obtenu en additionnant une force fluctuante dans les équations de Lotka-Volterra et en supposant que, pour de petites fluctuations autour de l'état stationnaire, les corrélations entre ces forces satisfassent la même condition que dans la théorie du mouvement brownien.

Goel, Maitra et Montroll supposent que les espèces ne sont pas seulement influencées par les espèces spécifiques de l'ensemble des espèces mais également par d'autres espèces (des bactéries, d'autres parasites, la vie des plantes qui varie en intensité, de saison en saison, et d'espèces migrantes non spécifiques, etc.) qui affectent l'ensemble des espèces d'une façon aléatoire. Les équations de base décrivant l'accroissement des différentes espèces sont alors données par

$$(2.82) \quad \frac{dN_j}{dt} = k_j N_j G\left(\frac{N_j}{\theta_j}\right) + N_j \{U_j(t) + \beta_j^{-1} \sum_{i=j}^n a_{ji} N_i\} \quad (j = 1, 2, \dots, n)$$

où $G(x)$ est un terme tenant compte de la saturation (dans le cas de l'équation de Verhulst,

$$G\left(\frac{N_j}{\theta_j}\right) = 1 - \frac{N_j}{\theta_j}$$

où θ_j est le niveau de saturation) et $U_j(t)$ représente les influences aléatoires non spécifiées. Quand le nombre total d'espèces n est grand,

et quand chaque espèce interagit avec un nombre suffisamment grand d'espèces, ils font l'hypothèse que les coefficients sont de signes contraires dans l'équation (2.82) pour la plupart des j . Dans ce cas, la somme dans l'équation (2.82) peut également être considérée comme étant une fonction aléatoire du temps. La combinaison de $U_j(t)$ et de la somme peut être alors être considérée comme une fonction aléatoire du temps, $F_j(t)$.

Puisque les termes apparaissent avec seulement l'indice j , on peut supprimer cet indice et l'équation (2.82) devient alors :

$$(2.83) \quad \frac{dN}{dt} = kN G\left(\frac{N}{\theta}\right) + N F(t) .$$

En supposant que la valeur moyenne de $F(t)$ s'annule, c'est-à-dire

$$(2.84) \quad \langle F(t) \rangle = 0$$

l'équation de Fokker-Planck de ce processus se déduit en tenant compte de l'hypothèse classique faite en théorie du mouvement brownien et des processus aléatoires :

$$(2.85) \quad \langle F(t_1) F(t_2) \rangle = \sigma^2 \delta(t_1 - t_2) .$$

Au lieu de considérer l'équation de Fokker-Planck pour la variable N , il est plus facile d'étudier le processus pour la variable V définie par

$$(2.86) \quad V = \ln \frac{N}{\theta} .$$

Dans ce cas, l'équation de Fokker-Planck se déduira à partir de l'équation suivante :

$$(2.87) \quad \frac{dV}{dt} = kG[\exp(V)] + F(t) .$$

Si on fait l'hypothèse que $F(t)$ est engendrée par un processus aléatoire gaussien, la forme standard de l'équation de Fokker-Planck, pour la probabilité P pour que $V(t)$ ait une valeur V au temps t , est [Wang et Uhlenbeck (1945)] :

$$(2.88) \quad \frac{\partial P}{\partial t} = -k \frac{\partial}{\partial V} PG(\exp V) + \frac{1}{2} \sigma^2 \frac{\partial^2 P}{\partial V^2} .$$

La fonction de distribution stationnaire en est déduite :

$$(2.89) \quad P = P_0 \exp\left[2 \sigma^{-2} \int_0^V G(\exp V) dV\right]$$

où P_0 est une constante de normalisation.

Une autre forme de l'équation de Fokker-Planck du processus est obtenue en prenant

$$(2.90) \quad P(V,t) = \psi(V,t) \exp\left[k \sigma^{-2} \int_0^V G(\exp V) dV\right] .$$

On trouve alors

$$(2.91) \quad \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = \sigma^2 k^{-1} \psi_{VV} - \left\{ \frac{\partial G(\exp V)}{\partial V} + k \sigma^{-2} [G(\exp V)]^2 \right\} \psi .$$

Cette équation doit être comparée à l'équation de Schrödinger

$$(2.92) \quad \hbar i \psi_t = \frac{\hbar^2}{2m} \psi_{xx} - U(x) \psi$$

et à l'équation de Bloch (en mécanique statistique), dans laquelle $-\frac{i\hbar}{\hbar}$ est remplacé par

$$\beta = \frac{1}{k_B} T$$

$$(2.93) \quad \psi_\beta = \frac{\hbar^2}{2m} \psi_{xx} - U(x) \psi .$$

Si, dans l'équation de Bloch, nous choisissons la masse égale à $\frac{1}{2}$ et identifions β avec $\frac{kt}{2}$, \hbar^2 avec $\frac{\sigma^2}{k}$ et $U(x)$ avec

$$(2.94) \quad W(V) \equiv k \sigma^{-2} [G(\exp V)]^2 + \frac{\partial G(\exp V)}{\partial V}$$

nous avons la même forme que l'équation (2.93). Comme les équations de Schrödinger et de Bloch ont été beaucoup étudiées, toutes les techniques mathématiques de résolution sont directement applicables. L'équation a été résolue pour les deux cas suivants :

i) le modèle de Gompertz (1825)

$$(2.95) \quad G(x) = - \ln x ,$$

ii) le modèle de Verhulst

$$G(x) = 1 - x .$$

5.1.- Le modèle Gompertz

En remplaçant (2.95) dans (2.94), le potentiel $W(V)$ s'écrit :

$$(2.97) \quad W(V) \equiv k \sigma^{-2} V^2 - 1$$

où l'on reconnaît le potentiel de l'oscillateur harmonique.

En prenant

$$(2.98) \quad \psi(V,t) = \psi(V) \exp\left[-\frac{1}{2} (\lambda - 1) kt\right]$$

et

$$(2.99) \quad V k^{\frac{1}{2}} \sigma^{-1} = \xi ,$$

alors $\psi(V)$ est une fonction propre de l'équation d'Hermite

$$(2.100); \quad \frac{d^2 \psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2) \psi = 0 .$$

Tous calculs faits, la fonction de distribution s'écrit :

$$(2.101) \quad P(V,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(V, V_0; t) P(V_0, 0) dV_0$$

avec

$$(2.102) \quad P(V, V_0; t) = k^{\frac{1}{2}} \{\pi \sigma^2 [1 - \exp(-2kt)]\}^{-\frac{1}{2}} \\ \times \exp\{-[V - V_0 \exp(-kt)]^2 k \{\sigma^2 [1 - \exp(-2kt)]\}^{-1}\}$$

5.2.- Le modèle Verhulst

En remplaçant (2.96) dans (2.94), on obtient le potentiel $W(V)$

$$(2.103) \quad W(V) = k \sigma^{-2} (1 - \exp V)^2 - \exp V .$$

En faisant plusieurs changements de variables, on obtient une équation d'évolution du système qui est l'équation de Schrödinger pour une molécule diatomique avec un potentiel de Morse.

Examinons plusieurs régimes dans le processus de croissance de la population.

Tout d'abord, considérons le régime malthusien pour lequel $\theta \rightarrow \infty$. Dans ce cas, les deux premiers moments de la distribution sont

$$(2.104) \quad \bar{N} = N_0 \exp\left[\left(k + \frac{1}{2} \sigma^2\right) t\right]$$

$$(2.105) \quad \frac{\langle (N - \bar{N})^2 \rangle}{\bar{N}^2} = -1 + \exp(t\sigma^2)$$

c'est-à-dire que la population croît librement sans interférence.

Ensuite, considérons le cas où V est petit, ce qui correspond à une population qui ne s'écarte que légèrement de la saturation

$$\frac{N}{\theta} \approx 1 .$$

La population fluctue autour de sa valeur moyenne avec une statistique caractérisée par sa distribution d'équilibre

$$(2.106) \quad P = P_0 \exp\left[2k \frac{V - \exp(V)}{\sigma^2}\right] .$$

Enfin, dans le cas intermédiaire, la population croît jusqu'au point où elle est affectée par d'autres influences telles que les autres populations. Ce cas est le plus complexe car le système est alors très sensible aux perturbations.

Tous les calculs précédents ont été faits en considérant les taux d'interactions constants. Mais, on doit s'attendre à ce que ces taux soient affectés par des changements de température, d'humidité, de distribution d'âge des diverses espèces, de l'époque de l'année, et d'autres facteurs écologiques. Partant de cette constatation, Goel, Maitra et Montroll (1971) ont supposé que coefficients a_{ij} sont des variables aléatoires. Les N_j sont alors caractérisés par une distribution de probabilités. A partir de l'équation maîtresse pour cette distribution, on peut montrer qu'à l'équilibre, sous certaines conditions, cette distribution est du type Poisson comme l'avait supposé Kerner.

Ils partent de l'équation

$$(2.107) \quad \beta_i \frac{d}{dt} \ln N_i = k_i \beta_i + \sum_{j=i} a_{ij} N_j$$

en considérant les a_{ij} comme étant des variables aléatoires de valeurs moyennes a_{ij} . Les résultats en sont les suivants. D'une part, si les coefficients d'interaction sont considérés comme des variables aléatoires, la distribution de la population stationnaire est du type Poisson si la variation des coefficients n'est pas trop rapide. D'autre part, si cette

variation a une fonction d'autocorrélation sous la forme d'une fonction delta de Dirac (comme il est postulé dans la théorie classique du mouvement brownien), alors la distribution à l'équilibre n'est plus du type Poisson.

Références

- BAILEY, N.T.J., (1964). *The Elements of Stochastic Processes*, Wiley, London.
- BAILEY, N.T.J., (1967). *The Mathematical Approach to Biology and Medicine*, Wiley, London.
- BARTLETT, M.S., (1957). On theoretical models for competitive and predatory biological systems, *Biometrika*, 44, 27-42.
- BHARUCHA-REID, A.T., (1960). *Elements of the Theory of Markov Processes and their Applications*, McGraw-Hill, New York.
- CHANDRASEKHAR, S., (1961). *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*, Clarendon Press, Oxford.
- CHAPMAN, D.G., (1967). *Stochastic models in animal population ecology*, Proc. 5th Berkeley Symp. Math. Statist. Prob., Univ. California Press, Berkeley, Vol. IV, 147-162.
- CHIANG, C.L., (1954), in *Statistics and Mathematics in Biology*, ed. O. Kempthorne, T.A. Bancroft, J.W. Gowen and J.L. Lush (Iowa State College Press, Ames, Iowa), 197.
- FELLER, W., (1939). Die Grundlagen der volterraschen Theorie des Kampfes ums Dasein in wahrscheinlichkeits-theoretischer Behandlung, *Acta Biotheoret.*, 5, 11-40.
- GOEL, N., MAITRA, S. and MONTROLL, E., (1971). On the Volterra and other non-linear models of interacting populations, *Rev. Mod. Phys.*, 43, 231.
- GOMPERTZ, B., (1825). *Phil. Trans. Roy. Soc.*, 115, 513.
- IOSIFESCU, M. and TAUTU, P., (1973). *Stochastic processes and applications in biology and medicine*, Biomathematics, vol. 3 and 4, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York.
- KAC, M., (1959). *Probability and related topics in physical sciences*, Interscience, New York.

KENDALL, D.G., (1952). Les processus stochastiques de croissance en biologie, *Ann. Inst. H. Poincaré*, **13**, 43-108.

KERNER, E.H., (1971). *Gibbs ensemble; Biological ensemble*, Gordon and Breach, New York.

McQUARRIE, D., (1967). *Stochastic approach to chemical kinetics*, in Suppl. Series in Appl. Probab., Methuen and Co., London.

NICOLIS, G., (1972). Fluctuations around non-equilibrium states in open non-linear systems, *J. of Stat. Phys.*, **6**, 2/3, 195.

OPPENHEIM, I., SHULER, K.E. and WEISS, G.H., (1969). *J. Chem. Phys.*, **50**, 460.

SIEGERT, A.J., (1949). *Phys. Rev.*, **76**, 1708.

van KAMPEN, N.G., (1969). *Adv. Chem. Phys.*, **15**, 65.

WANG, M.C. and UHLENBECK, G.E., (1945). *Rev. Mod. Phys.*, **17**, 323.

Chapitre III

Structuration spatio-temporelle de population planctonique proie-prédateur

Introduction

L'analyse spectrale de l'organisation spatiale des populations de plancton présente deux classes principales de comportement dépendant de l'échelle spatiale considérée.

En dessous de 5 km , le phytoplancton se comporte comme un scalaire passif [*e.g.* Platt et Denman (1975)].

i) De zéro à 100 m , le phytoplancton est contrôlé par la turbulence et son spectre est similaire au spectre de la turbulence homogène et spatialement isotrope, selon la théorie de Kolmogorov.

ii) De 100 m à 5 km , il y a des corrélations entre la chlorophylle et la température.

Au-delà de 5 km et jusqu'à 100 km , il n'est plus possible d'obtenir des corrélations entre la structuration horizontale des populations de plancton et des phénomènes physiques ou chimiques.

Un certain nombre de tentatives ont été faites afin d'expliquer les mécanismes de cette *patchiness* s'étendant sur des distances d'échelle moyenne. Il y a essentiellement deux catégories d'explications suivant les hypothèses de départ.

D'une part, un certain nombre d'auteurs sont partis d'une seule équation reflétant le comportement du phytoplancton. Un excellent article au sujet de l'organisation dans les populations de phytoplancton est celui de Margalef (1967). Des données expérimentales récentes sur la structuration dans la distribution spatiale de phytoplancton ont été faites [Platt *et al.* (1971b)].

Kierstead et Slobodkin ont été les premiers, en 1953, à proposer d'ajouter un terme de diffusion à l'équation de croissance malthusienne [équation (3.2)] pour expliquer la dynamique d'un amas phytoplantonique. Ils en ont déduit un volume critique d'eau en dessous duquel la population est condamnée à disparaître tandis qu'au-delà on assiste à sa croissance "explosive". A côté du terme de diffusion, reflétant la partie aléatoire des courants marins, Walsh et Dugdale (1971a) et O'Brien et Wroblewski (1973) proposent d'inclure un terme d'advection pour tenir compte de la partie structurée du mouvement de l'eau. Tout récemment, une extension de l'équation de Kierstead et Slobodkin a été proposée [Platt (1975); Platt and Denman (1975); Wroblewski *et al.* (1975)] afin de tenir compte de l'effet de broutage du phytoplancton par les herbivores. Une correction est donnée au volume critique d'eau mais les conclusions restent les mêmes : en dessous de ce volume, la population disparaît et au-dessus, elle s'accroît indéfiniment.

D'autre part, il y a les modèles représentés par *un système de deux équations* qui tient compte des comportements spatio-temporels du phytoplancton et du zooplancton herbivore qui interagissent de façon non-linéaire. Pour ce faire, une généralisation du modèle proie-prédateur de Lotka-Volterra a été faite en ajoutant des termes de diffusion. Steele (1974) propose d'en exprimer les solutions sous forme de série de Fourier et de considérer les coefficients de cette série comme étant des variables aléatoires.

Par une analyse linéaire de ces équations, nous mettons en évidence une longueur d'onde caractéristique λ_c en relation avec le coefficient de diffusion et de l'échelle de temps ω^{-1} de la réponse écologique.

A partir de simulations des équations non-linéaires, nous montrons que le comportement spatio-temporel des populations proie-prédateur peut se résumer sous la forme de trois "lois" :

- i) la création d'ondes "proie-prédateur",
- ii) la propagation de ces ondes à vitesse et intensité constante,
- iii) l'annihilation de deux ondes interagissantes.

Une propriété remarquable de ces ondes est qu'elles se présentent comme une réponse tout ou rien. Dans ces ondes actives, la proie joue le rôle d'activateur et le prédateur le rôle d'inhibiteur. Il y correspond une période réfractaire durant laquelle la génération d'une nouvelle onde est interdite.

Enfin, en tenant compte des courants en mer du Nord, nous simulons la structuration spatio-temporelle du plancton.

1.- Modèle de Kierstead-Slobodkin

Les populations de plancton (phytoplancton par exemple) peuvent être considérées comme vivant dans une masse d'eau ayant des valeurs optimales quant à leurs propriétés (température, salinité, oxygène dissous et nutriments dissous).

Si cette masse d'eau est entourée d'eau physiologiquement non-optimale pour le plancton, il y aura un mélange de ces eaux à la frontière. Kierstead et Slobodkin (1953) ont déterminé le volume de la masse d'eau minimum nécessaire à la croissance du plancton.

Pour la simplicité, considérons le problème à une dimension d'un volume d'eau étroit et long dont les extrémités sont limitées des deux côtés par des frontières naturelles. Faisons l'hypothèse que la région de longueur L a une section transversale dont la surface vaut A et dans laquelle la diffusivité effective K reste constante.

Supposons alors qu'à l'extérieur de cette région, la diffusivité devient grande ou que l'eau n'est plus physiologiquement optimale. Ces conditions sont identiques au fait de considérer la concentration des organismes comme étant égale à zéro aux extrémités de la région. On peut négliger la diffusion transversale et considérer la concentration N comme étant une fonction de la position longitudinale seulement. Si l'organisme ne se multiplie pas, le phénomène sera régi simplement par l'équation de diffusion :

$$(3.1) \quad \frac{\partial N}{\partial t} = K \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} .$$

On peut y ajouter un terme de reproduction sous la forme :

$$(3.2) \quad \frac{\partial N}{\partial t} = kN + K \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} .$$

Kierstead et Slobodkin en ont alors cherché des solutions qui s'annulent en $x = 0$ et $x = L$

$$(3.3) \quad N(0,t) = 0$$

$$(3.4) \quad N(L,t) = 0$$

avec comme distribution initiale des organismes :

$$(3.5) \quad N(x,0) = g(x) .$$

En introduisant le changement de variables suivants,

$$(3.6) \quad f = N \exp(- kt)$$

on trouve, par substitution dans l'équation (3.2), que f doit satisfaire l'équation

$$(3.7) \quad \frac{\partial f}{\partial t} = K \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

qui est identique à l'équation de diffusion ordinaire (3.1). De plus, f satisfait aux mêmes conditions initiales et aux limites que N .

La solution de l'équation (3.7) pour ces conditions est donnée par

$$(3.8) \quad f = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \exp\left(- n^2 \pi^2 \frac{Kt}{L^2}\right)$$

où

$$(3.9) \quad B_n = \frac{2}{L} \int_0^L dx g(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) .$$

On voit que les constantes B_n ($n = 1, 2, 3, \dots$) dépendent de la distribution initiale. Dus aux propriétés de symétrie des fonctions sinus dans l'équation (3.9), les termes pairs dans l'équation (3.8) sont inexistants si la distribution initiale est symétrique par rapport au plan $x = \frac{L}{2}$. Substituant l'équation (3.6) dans l'équation (3.7), on obtient une expression pour la concentration en fonction du temps et de la position :

$$(3.10) \quad N = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \exp\left[\left(k - n^2 \pi^2 \frac{K}{L^2}\right) t\right]$$

où les différents termes dans la série ont une dépendance différente par rapport au temps. En particulier, les termes pour lesquels $\left(k - n^2 \pi^2 \frac{K}{L^2}\right)$ est négatif, décroîtront et éventuellement deviendront négligeables.

La population sera alors incapable de combattre le phénomène de diffusion à moins qu'il n'y ait au moins un terme de la série pour lequel

$$(3.11) \quad k - n^2 \pi^2 \frac{K}{L^2} \geq 0 .$$

Puisque la plus petite valeur de n est un, une condition nécessaire pour maintenir la population est

$$(3.12) \quad k \geq \pi^2 \frac{K}{L^2} .$$

Pour des valeurs données de K et k , il y a une longueur critique donnée par

$$(3.13) \quad L_c = \pi \left(\frac{K}{k}\right)^{\frac{1}{2}}$$

de telle façon que la population croîtra si $L > L_c$, décroîtra si $L < L_c$ et restera statique si $L = L_c$.

2.- Modèle de Steele

Steele (1974) a étudié le rôle des fluctuations aléatoires sur la stabilité des variations spatiales de populations de plancton proie-prédateur. Il part des équations de Lotka-Volterra en y incluant un terme de diffusion, *i.e.*

$$(3.14) \quad \frac{\partial C_1}{\partial t} = k_1 C_1 - k_2 C_1 C_2 + \nabla \cdot (\tilde{K} \nabla C_1)$$

$$(3.15) \quad \frac{\partial C_2}{\partial t} = -k_3 C_2 + k_4 C_1 C_2 + \nabla \cdot (\tilde{K} \nabla C_2)$$

où \tilde{K} est le coefficient de diffusion turbulente. Il considère le problème à une dimension ($\nabla \equiv e_x \frac{\partial}{\partial x}$) et suppose le système limité à un

domaine L . Dans ces conditions, il est possible de développer la solution en série de Fourier sous la forme

$$(3.16) \quad C_1 = \sum_{n=0}^{\infty} C_{1n} \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)$$

$$(3.17) \quad C_2 = \sum_{n=0}^{\infty} C_{2n} \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) .$$

A l'aide des équations (3.16) et (3.17), les équations (3.14) et (3.15) s'écrivent :

$$(3.18) \quad \frac{dC_{1n}}{dt} = (k_1 - k_n) C_{1n} - k_2 C_{12n}$$

$$(3.19) \quad \frac{dC_{2n}}{dt} = - (k_3 + k_n) C_{2n} + k_4 C_{12n}$$

où

$$(3.20) \quad k_n = \tilde{K} \left(\frac{2n\pi}{L}\right)^2$$

et

$$(3.21) \quad C_{12n} = \frac{1}{2} \left(\sum_{p+q=n} C_{1p} C_{2q} + \sum_{|p-q|=n} C_{1p} C_{2q} \right) .$$

Les coefficients C_{1n} et C_{2n} décroissent avec un temps de relaxation proportionnel à

$$\tau_n \sim \frac{L^2}{n^2 \tilde{K}} ,$$

c'est-à-dire que ce sont les inhomogénéités spatiales de grande longueur d'onde qui sont les moins vite atténuées.

De plus, pour $n = 0$, on obtient les équations pour la valeur moyenne des populations, c'est-à-dire ($N_1 \equiv C_{10}$, $N_2 \equiv C_{20}$)

$$(3.22) \quad \frac{dN_1}{dt} = k_1 N_1 - k_2 N_1 N_2 - k_2 \frac{1}{2} \sum_{p=1}^{\infty} C_{1p} C_{2p}$$

$$(3.23) \quad \frac{dN_2}{dt} = - k_3 N_2 + k_4 N_1 N_2 + k_4 \frac{1}{2} \sum_{p=1}^{\infty} C_{1p} C_{2p} .$$

Steele considère alors les coefficients de la série de Fourier comme étant des variables aléatoires définies dans un domaine spatial de longueur L et *small-scale spatial variability in the population which, on the linearised theory, would be damped out could, by directly displacing*

the mean, lead to a random walk to extinction as happens with stochastic effects on the ordinary Lotka-Volterra equations without diffusion. As it would seem that diffusion or dispersal can never be sufficient to damp out fluctuations, these theoretical effects emphasize the need for positive stabilising factors, such as functional responses acting at the average population levels.

3.1.- Vers un modèle plus général

En ajoutant un terme d'advection au modèle de Steele [équations (3.14) et (3.15)], nous obtenons, pour un fluide incompressible ($\nabla \cdot V = 0$), le système d'équations

$$(3.24) \quad \frac{\partial C_1}{\partial t} + V \cdot \nabla C_1 = k_1 C_1 - k_2 C_1 C_2 + \nabla \cdot (\tilde{K} \nabla C_1)$$

$$(3.25) \quad \frac{\partial C_2}{\partial t} + V \cdot \nabla C_2 = -k_3 C_2 - k_4 C_1 C_2 + \nabla \cdot (\tilde{K} \nabla C_2)$$

où

$$(3.26) \quad \nabla = e_x \frac{\partial}{\partial x} + e_y \frac{\partial}{\partial y} .$$

Ainsi nous considérons les variations horizontales des concentrations C_1 et C_2 et de la vitesse V (qui peuvent être considérées comme des moyennes sur la profondeur).

Comme nous l'avons vu au chapitre I, le temps caractéristique de réponse écologique d'un système proie-prédateur est de l'ordre de

$$\omega^{-1} = (k_1 k_3)^{-\frac{1}{2}}$$

où k_1 et k_3 sont respectivement les taux de croissance du phytoplancton et de décroissance du zooplancton.

A partir de valeurs expérimentales, on trouve que ce temps caractéristique est de l'ordre de quelques jours. Donc, si nous faisons une moyenne des équations d'évolution sur un temps qui est court comparé au temps caractéristique de la réponse écologique mais couvrant encore plusieurs périodes de marées, nous supprimons les effets des oscillations et des fluctuations de la mer sans affecter de façon significative le processus que nous étudions, *i.e.* la patchiness.

Divisons les quantités aléatoires entre la moyenne et une fluctuation autour de cette moyenne

$$(3.27) \quad V = U + w$$

$$(3.28) \quad C_1 = N_1 + c_1$$

$$(3.29) \quad C_2 = N_2 + c_2$$

avec $\langle w \rangle = 0$, $\langle c_1 \rangle = 0$ et $\langle c_2 \rangle = 0$, où les crochets sont des moyennes temporelles (sur quelques cycles de marées).

La substitution des équations (3.27) à (3.29) dans les équations (3.24) et (3.25) nous conduit, après avoir pris la moyenne :

$$(3.30) \quad \frac{\partial N_1}{\partial t} + U \cdot \nabla N_1 + \langle w \cdot \nabla c_1 \rangle = k_1 N_1 - k_2 N_1 N_2 - k_2 \langle c_1 c_2 \rangle + \nabla \cdot (\tilde{K} \nabla N_1)$$

$$(3.31) \quad \frac{\partial N_2}{\partial t} + U \cdot \nabla N_2 + \langle w \cdot \nabla c_2 \rangle = -k_3 N_2 + k_4 N_1 N_2 + k_4 \langle c_1 c_2 \rangle + \nabla \cdot (\tilde{K} \nabla N_2) .$$

Discutons brièvement les termes nouveaux par rapport au modèle de Steele.

i) La vitesse moyenne U peut être considérée comme représentant le courant résiduel u . On a montré que ce courant pouvait être considéré comme indépendant du temps [Ronday (1975)], d'où

$$(3.32) \quad U \approx u(x,y) .$$

La figure 4 donne les lignes de courant de la circulation résiduelle pour la baie sud de la mer du Nord.

ii) Les termes $\langle w \cdot \nabla c_i \rangle$ ($i = 1,2$) sont beaucoup plus difficiles à évaluer. La technique classique en turbulence consiste à utiliser l'hypothèse d'une diffusion du type gradient :

$$(3.33) \quad \langle w \cdot \nabla c_i \rangle \approx - \nabla \cdot (K \nabla N_i)$$

où K représente une diffusion latérale turbulente (*eddy diffusivity*) ($K \gg \tilde{K}$).

En général le coefficient K n'est pas constant et est une fonction du diamètre du volume d'eau considéré (des estimations numériques sont faites expérimentalement au moyen de colorant que l'on jette dans la mer et dont on étudie la dispersion). Le coefficient croît en fonction du diamètre de la tâche.

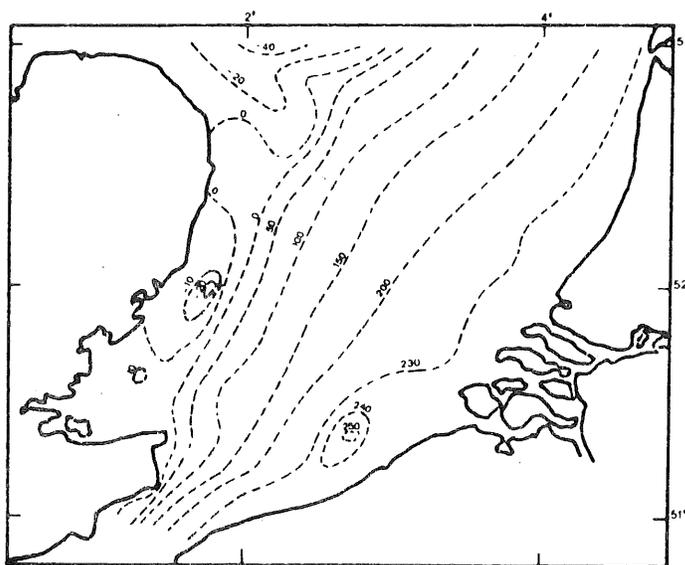


fig. 4.

Lignes de courant (en $10^3 \text{ m}^3/\text{s}$) de la circulation résiduelle pour la baie sud de la mer du Nord (d'après Runday, 1975).

Ici, le coefficient K devrait être une fonction des diamètres ϕ_i des *patches* de plancton proie ($i = 1$) et prédateur ($i = 2$).

$$(3.34) \quad K_i = K(\phi_i) \quad i = 1, 2 .$$

Ce coefficient de diffusion varie spatialement et temporellement et, de plus, va dépendre de la répartition spatiale des populations planctoniques. Pour les simulations numériques, une valeur moyenne du coefficient de diffusion sera considérée en fonction du diamètre moyen des *patches* $\bar{\phi}$:

$$(3.35) \quad K = K(\bar{\phi}) .$$

Une analyse plus complète tenant compte de la variation du coefficient de diffusion peut être trouvée ailleurs [Dubois (1976)].

iii) La moyenne du produit des fluctuations temporelles des populations $\langle c_1 c_2 \rangle$ est un terme encore plus difficile à évaluer.

En général ce terme déstabilise l'état d'équilibre des populations "proie-prédateur". En effet, comme nous l'avons vu au chapitre II, l'analogie stochastique du modèle proie-prédateur de Lotka-Volterra donne une solution d'équilibre instable.

Mais il faut se rendre compte que le modèle proie-prédateur de Lotka-Volterra est structurellement instable. Cela signifie que si nous modifions même légèrement les termes de croissance-décroissance et/ou d'interaction, le système peut redevenir stable ou présenter des cycles limites. Par exemple en prenant

$$(3.36) \quad k_1 = k'_1 (1 - \gamma_1 N_1)$$

et

$$(3.37) \quad k_3 = k'_3 (1 + \gamma_2 N_2)$$

la solution déterministe est asymptotiquement stable tandis que la solution stochastique présente un cycle limite [Jeffires (1973)].

Comme, jusqu'à présent, il n'a pas été encore possible de construire un modèle satisfaisant de l'écosystème planctonique, nous considérons que le modèle de Lotka-Volterra est une assez bonne approximation lorsque l'évolution temporelle de l'écosystème est simulée sur seulement quelques semaines (le *bloom* du printemps). Les figures 5a et 5b montrent

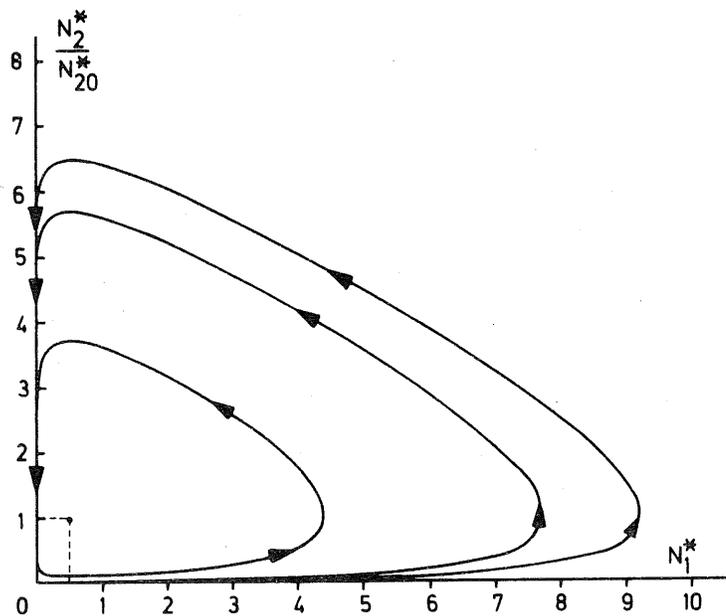


fig. 5a.

Evolution dans le plan de phase de solutions du modèle de Lotka-Volterra ($\sigma = 3$)

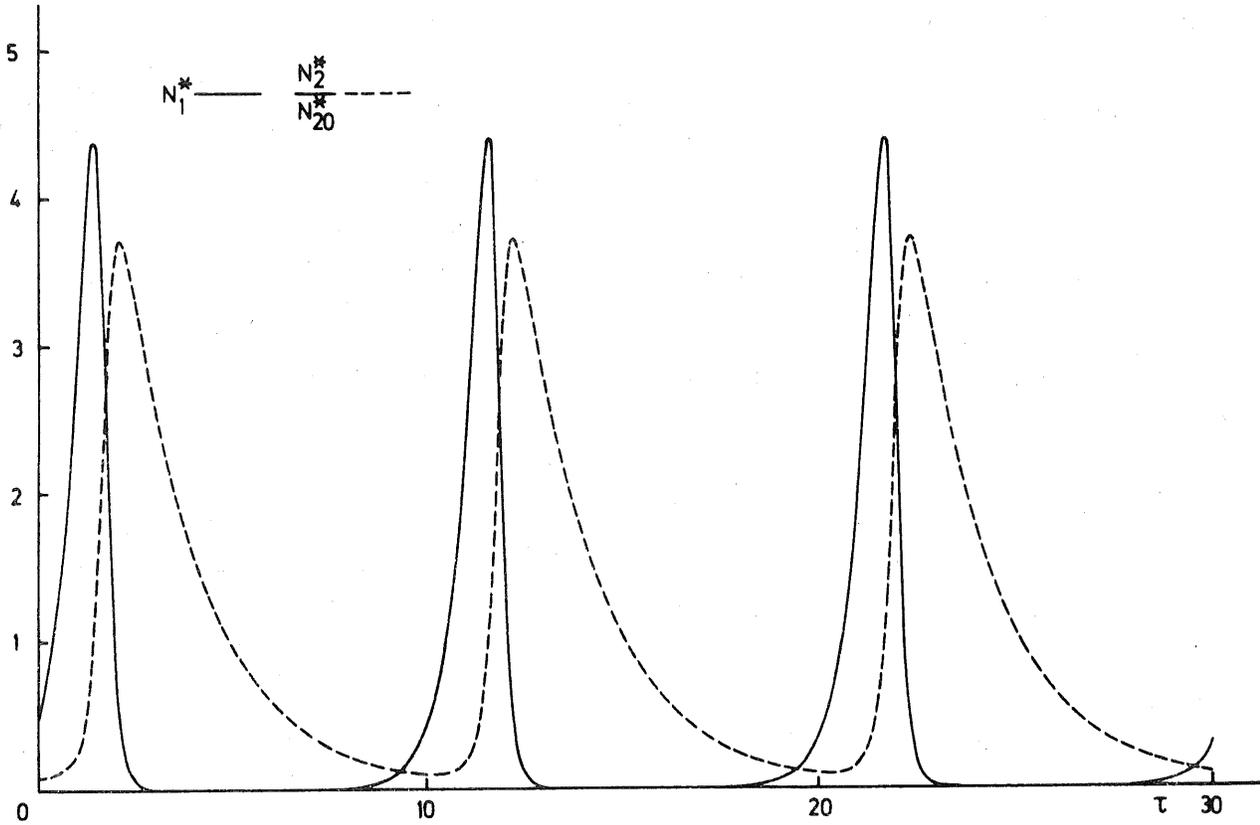


fig. 5b.

Evolution dans le temps d'une solution du modèle de Lotka-Volterra ($\sigma = 3$)

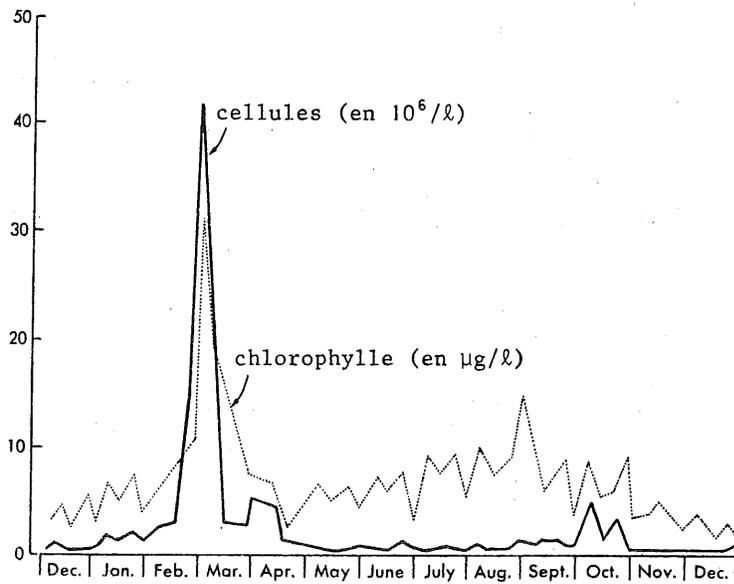


fig. 5c.

Changement saisonnier en phytoplancton (d'après Riley, 1955)

l'évolution dans le plan de phase (N_1^*, N_2^*) et dans le temps τ respectivement du modèle de Lotka-Volterra [équations (3.47) et (3.48)].

A la figure 5c nous montrons le changement saisonnier de la concentration en phytoplancton [d'après Riley (1955)]. On peut remarquer le *bloom* durant la période février-mars. La simulation numérique de la solution du modèle de Lotka-Volterra donnée à la figure 5b est très semblable et constitue donc une bonne approximation pour cette période de l'année.

Le système d'équations (3.30) et (3.31) devient, en tenant compte de l'équation (3.33) et en négligeant la moyenne du produit des fluctuations des populations $\langle c_1 c_2 \rangle$,

$$(3.38) \quad \frac{\partial N_1}{\partial t} + U \cdot \nabla N_1 = k_1 N_1 - k_2 N_1 N_2 + \nabla \cdot (K \nabla N_1)$$

$$(3.39) \quad \frac{\partial N_2}{\partial t} + U \cdot \nabla N_2 = -k_3 N_2 + k_4 N_1 N_2 + \nabla \cdot (K \nabla N_2) .$$

Ce système d'équations étant du type déterministe, nous allons en étudier les propriétés.

3.2.- Les équations réduites

Les équations (3.38) et (3.39) dépendent de cinq coefficients, k_i ($i = 1, \dots, 4$) et K , mais en variables naturelles sans dimension seul un coefficient subsiste.

Une unité naturelle de temps est la fréquence caractéristique de la réponse écologique, *i.e.* ω . Définissons une variable temporelle sans dimension τ

$$(3.40) \quad \tau = \omega t .$$

La racine carrée du rapport entre le coefficient de diffusion K et l'unité de temps ω , est une unité de l'échelle de longueur. La variable spatiale sans dimension r^* sera :

$$(3.41) \quad r^* = \frac{r}{L^*}$$

où

$$(3.42) \quad L^* = \left(\frac{K}{\omega}\right)^{\frac{1}{2}} .$$

On peut exprimer la diffusivité [Joseph et Sendner (1958)] K comme étant égale au produit de la vitesse de diffusion P et de la longueur caractéristique des variations horizontales des populations L , *i.e.* $K = PL$. Si les interactions écologiques et la dispersion doivent être compétitives, la longueur caractéristique doit être égale à L^* . A partir de l'équation (3.42), on peut exprimer la vitesse de diffusion sous la forme $P = \omega L^*$ qui est de l'ordre de 5 km.jour^{-1} . Dans ces conditions, nous voyons que P est du même ordre de grandeur que les courants résiduels :

$$\|U\| \sim P .$$

En définissant

$$(3.43) \quad N_1^* = N_1 \beta k_2 \omega^{-1}$$

$$(3.44) \quad N_2^* = N_2 k_2 \omega^{-1}$$

$$(3.45) \quad v = UP^{-1}$$

$$(3.46) \quad \sigma = \left(\frac{k_1}{k_3}\right)^{\frac{1}{2}},$$

les équations (3.38) et (3.39) deviennent :

$$(3.47) \quad \frac{\partial N_1^*}{\partial \tau} + v \cdot \nabla^* N_1^* = \sigma N_1^* - N_1^* N_2^* + \nabla^{*2} N_1^*$$

$$(3.48) \quad \frac{\partial N_2^*}{\partial \tau} + v \cdot \nabla^* N_2^* = -\sigma^{-1} N_2^* + N_1^* N_2^* + \nabla^{*2} N_2^*$$

qui ne dépendent plus que du coefficient σ . Dans la mer du Nord, le coefficient σ peut être estimé avoir une valeur comprise entre 1 et 3.

A partir de ces équations réduites, nous voyons que tous les termes sont du même ordre de grandeur et que, en conséquence, le terme d'advection sera un des "initiateurs" de la structuration spatio-temporelle des populations de plancton proie-prédateur.

Afin de bien voir les contributions des termes d'interaction et de diffusion par rapport au terme d'advection, nous allons simuler numériquement un certain nombre de cas.

3.3.- Création, propagation et annihilation d'"ondes proie-prédateur"

La figure 6 donne la simulation numérique, à une dimension, de la solution stationnaire, des équations (3.47) et (3.48), sans advection pour une valeur de $\sigma = 1$, en maintenant à zéro les concentrations N_1^* et N_2^* aux frontières.

La structuration spatiale stationnaire obtenue est caractérisée par une longueur d'onde λ_c^* , obtenue à partir de la solution analytique des équations linéarisées [Dubois (1975b)] :

$$(3.49) \quad \lambda_c = 2\pi \left(\frac{K}{\omega}\right)^{\frac{1}{2}}$$

ou, sans dimension,

$$(3.50) \quad \lambda_c^* = 2\pi .$$

Les solutions transitoires des équations (3.47) et (3.48), sans advection, sont simulées numériquement après perturbation de la solution stationnaire. Comme conditions initiales, on a maintenu la distribution spatiale stationnaire du prédateur ($N_2 \sim 1$) et on a perturbé la distribution spatiale stationnaire de la proie en réduisant son amplitude par un facteur 10 ($N_1 \sim 0,1$). On observe alors la formation d'une structuration spatio-temporelle quasi-périodique de période $T^* \sim 7 < \frac{2\pi}{\omega^*}$ (avec $\omega^* < 1$). Au cours de cette quasi-période (qui diminue au fur et à mesure que l'amplitude des fluctuations diminue), on assiste à une succession de structures. Les figures 7a,b,c,d donnent l'évolution spatio-temporelle des deux populations à partir de $\tau_0 = 43$ jusqu'en $\tau = \tau_0 + 3\tau_1$ avec $\tau_1 = 2$. La constante de relaxation de ces fluctuations autour de l'état stationnaire est très grande comparée à la constante de relaxation obtenue à partir des équations linéarisées. A la figure 7d, il faut noter quatre maxima dans la distribution des proies et, à la figure 7e, il n'y a plus que trois maxima à cause de la réduction de la région étudiée.

A deux dimensions (un rectangle $L_1 \times L_2$), en partant d'une distribution horizontale homogène (loin de la solution stationnaire) pour les proies et les prédateurs, les simulations numériques montrent la

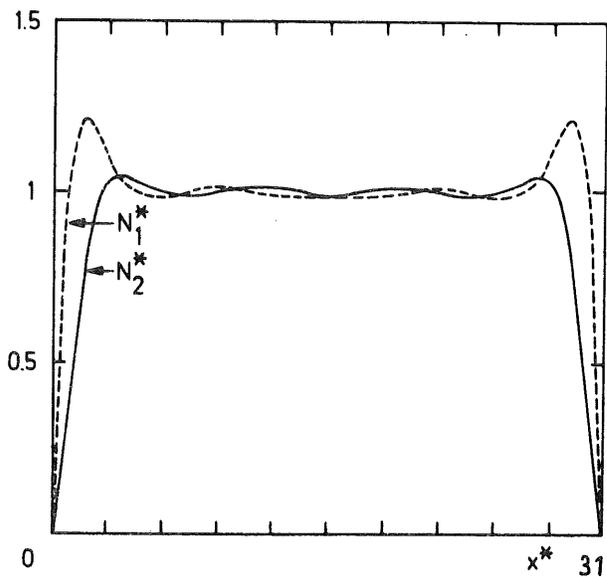


fig. 6.

Solution stationnaire des équations (3.47) et (3.48) sans advection. La solution stationnaire est caractérisée par la longueur d'onde λ_c (obtenue à partir des équations linéarisées).

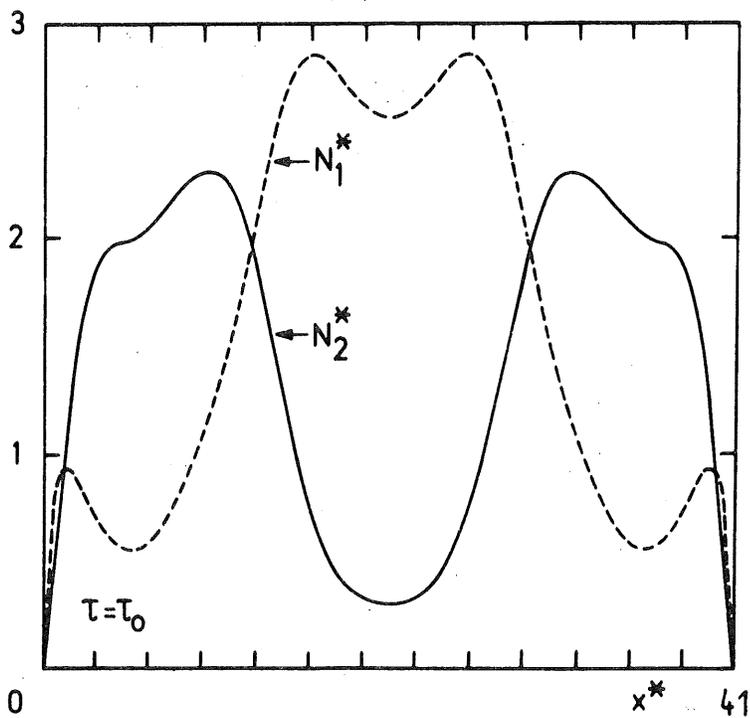


fig. 7a.

Simulation numérique des équations (3.47) et (3.48), sans advection, avec $\sigma = 1$, $\tau = 43$

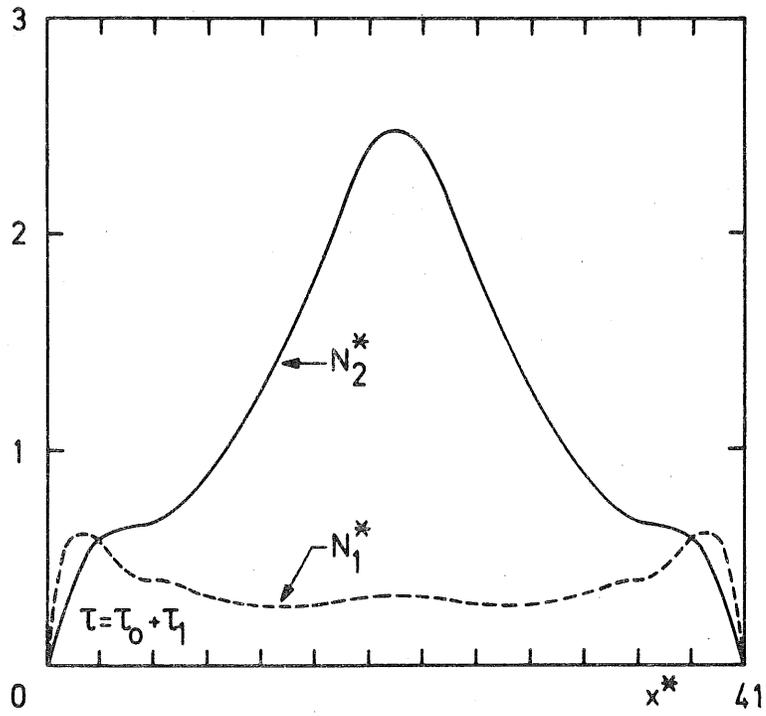


fig. 7b.

Evolution ultérieure : $\tau = 45$

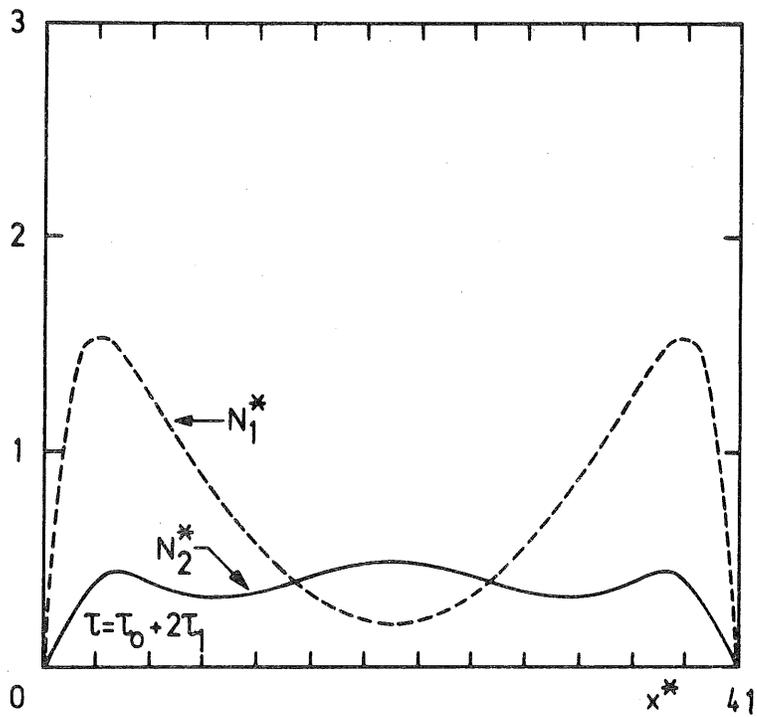


fig. 7c.

Evolution ultérieure : $\tau = 47$

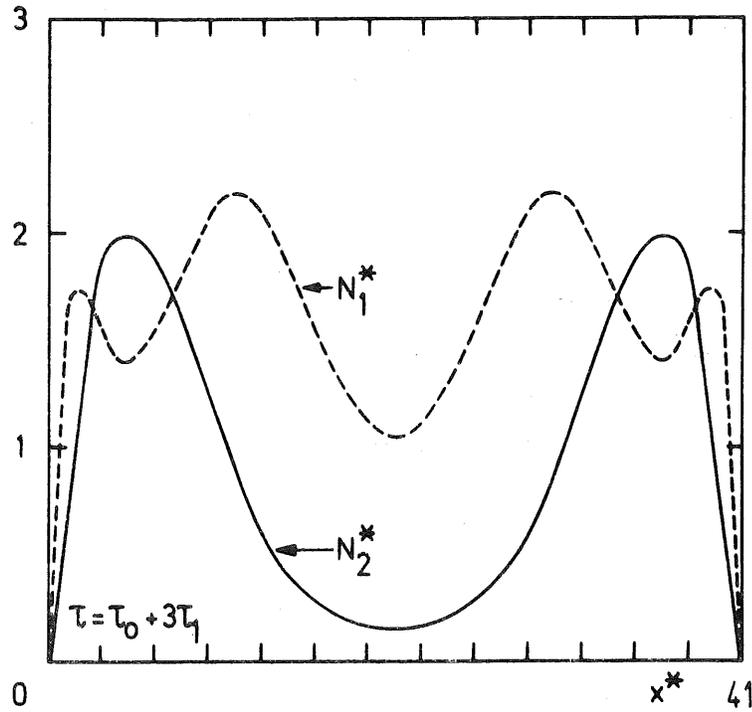


fig. 7d.

Evolution ultérieure : $\tau = 49$. Notez quatre maxima dans la distribution des proies.

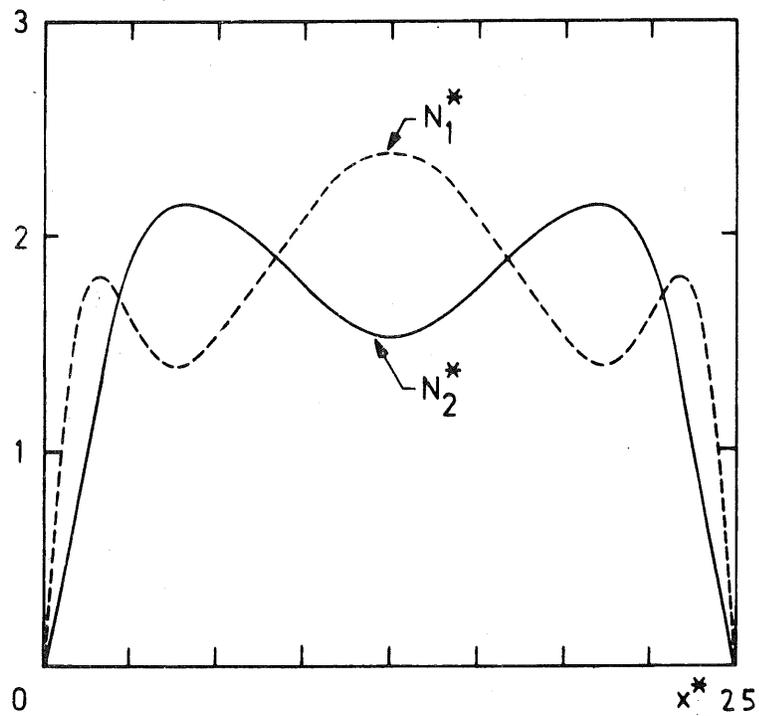


fig. 7e.

Même simulation que précédemment mais dans une région spatiale plus petite. En $\tau = 49$, il n'y a plus que trois maxima dans la distribution des proies.

création d'inhomogénéités importantes ayant les mêmes caractéristiques qu'à une dimension.

On observe également que le nombre de maxima est pratiquement constant par unité de surface et que le même genre de structures apparaît quasi-périodiquement.

Si, au lieu de partir de concentrations homogènes, on part d'une distribution aléatoire horizontale, après une période transitoire, il apparaît la même succession de structure que dans le cas précédent.

En analysant les résultats de toutes ces simulations, on se rend compte que la structuration spatio-temporelle des deux populations est caractérisée par un ensemble d'ondes qui se créent, se propagent et s'annihilent, conduisant à la formation de figures géométriques, le même type de structures apparaissant quasi-périodiquement. Il est possible de mettre clairement en évidence ces ondes en simulant les équations (3.47) et (3.48), sans advection, à une dimension avec $\sigma = 3$ en prenant comme conditions initiales un amas planctonique proie-prédateur de dimension égale à 2 (l'unité de longueur est L^*) et situé au milieu ($x^* = 50$) de la région étudiée.

$$(3.51) \quad N_1(x^*, 0) = N_2(x^*, 0) = 0, 1 \quad x^* \in (49, 51)$$

et

$$(3.52) \quad N_1(x^*, 0) = N_2(x^*, 0) = 0 \quad x^* \in (0, 49) \text{ et } x^* \in (51, 100) .$$

Les figures 8a,b donnent le résultat de la simulation numérique.

La figure 8a montre la croissance explosive de la population des proies tandis que celle des prédateurs apparaît avec un certain temps de retard et on assiste alors à la structuration spatiale des deux populations au sein de l'amas. Au centre de cet amas, la concentration des prédateurs augmente tandis qu'au bord, c'est la concentration des proies qui prédomine. Ainsi, l'ensemble de la population de proies s'est séparé en deux pics symétriques. Ce phénomène sera appelé la "création d'ondes proie-prédateur".

A la figure 8b, nous voyons la propagation des deux pics dans des directions opposées avec une vitesse et une intensité constantes. Cet effet remarquable est essentiellement dû aux propriétés de non-linéarité du modèle et sera appelé la "propagation d'ondes

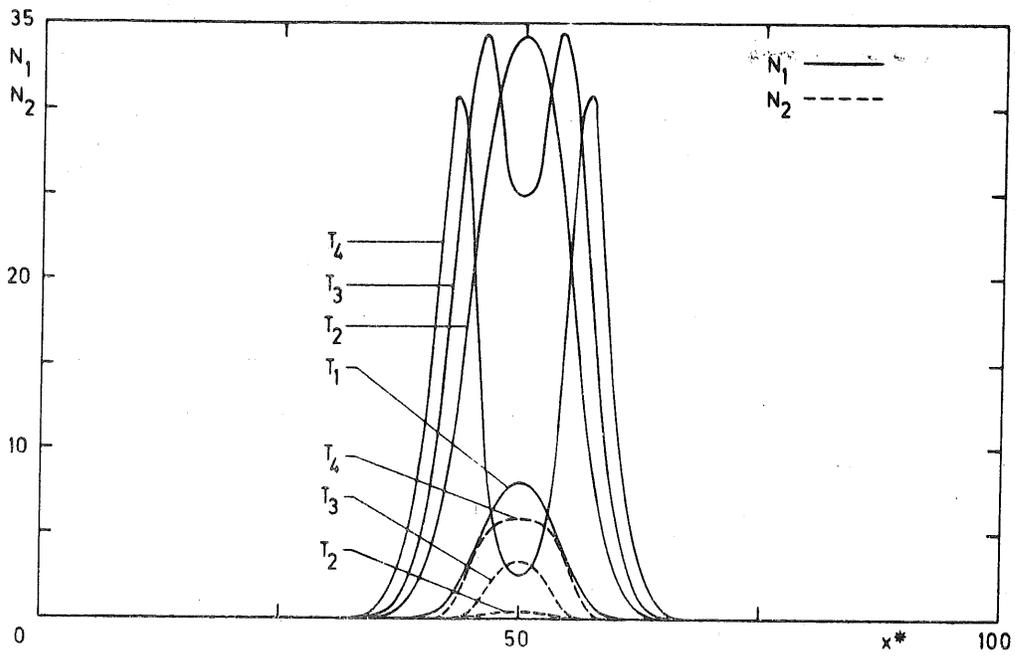


fig. 8a.

Création d'une "onde proie-prédateur" à partir d'un amas planctonique initial (équations 3.47 et 3.48). La succession des structures est donnée aux temps $\tau_1 = 6,0$; $\tau_2 = 7,8$; $\tau_3 = 8,4$ et $\tau_4 = 9,0$. Le facteur d'utilisation β est égal à 0,1.

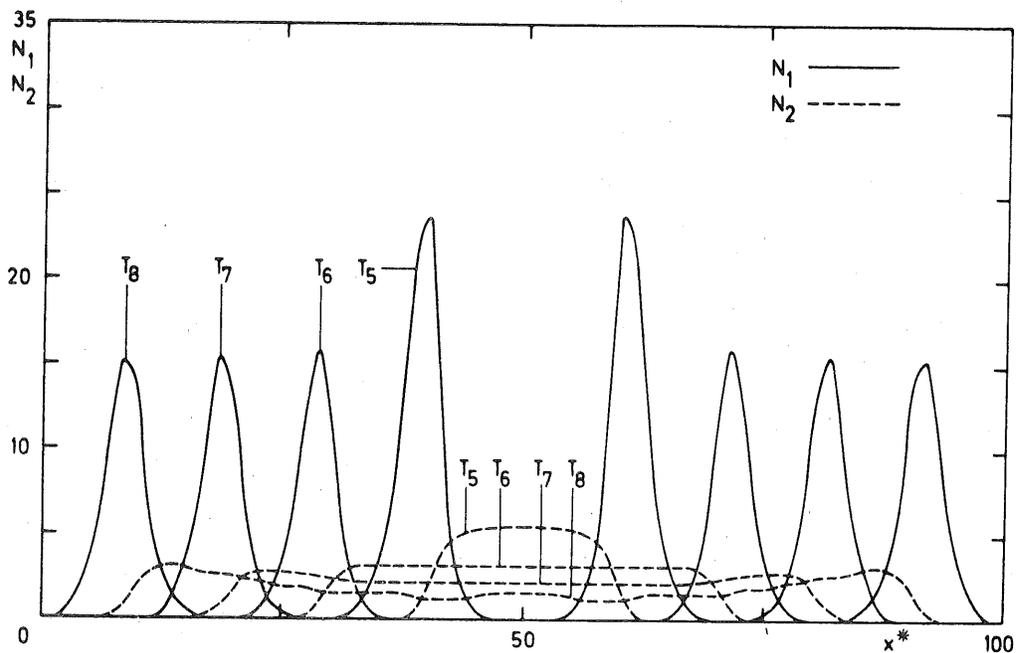


fig. 8b.

Propagation de l'onde proie-prédateur. Cette figure est la continuation de la figure 8a et donne le comportement de l'onde aux temps $\tau_5 = 10,2$; $\tau_6 = 15,0$; $\tau_7 = 19,8$ et $\tau_8 = 24,6$. Notez la constance de la vitesse et de l'intensité de l'onde.

proie-prédateur". Dans ce phénomène, la population des proies se comporte comme un "activateur" et la population des prédateurs comme un "inhibiteur". C'est leur équilibre dynamique qui est à la base de la formation d'une structure spatiale stable qui se propage.

Maintenant, considérons les conditions initiales suivantes. Au lieu d'un seul amas planctonique, nous prenons deux amas, séparés spatialement, de même dimension (égale à 2) et caractérisés par

$$(3.53) \quad N_1(x^*, 0) = N_2(x^*, 0) = 0,1 \quad x^* \in (39, 40) \quad \text{et} \quad x^* \in (60, 61)$$

et

$$(3.54) \quad N_1(x^*, 0) = N_2(x^*, 0) = 0 \\ x^* \in (0, 39) , \quad x^* \in (40, 60) , \quad x^* \in (61, 100) .$$

Les figures 9a,b donnent la succession des événements.

La figure 9a montre que l'évolution initiale des deux amas de plancton est identique au cas précédent : une croissance explosive des proies suivie de leur séparation en deux pics symétriques se propageant dans des directions opposées. Après un certain temps, dépendant de la distance initiale entre les deux amas planctoniques, les deux pics les plus proches se rencontrent et on assiste alors à leur annihilation. Ce phénomène sera appelé l'"annihilation d'ondes proie-prédateur".

La figure 9b donne l'évolution spatio-temporelle des deux autres pics qui se propagent, leur intensité et leur vitesse tendant alors vers une valeur constante comme dans le cas précédent (fig. 8b).

Considérons maintenant le problème de l'évolution spatio-temporelle des populations N_1 et N_2 dépendant de la position dans un plan horizontal (x^*, y^*) et du temps τ , *i.e.* $N(x^*, y^*, \tau)$. La région étudiée est constituée par un carré de 100×100 .

La répartition initiale des populations proie-prédateur est donnée par un amas planctonique d'intensité égal à 0,1 et de surface égale à 2×2 situé au milieu de la région considérée. Cette simulation correspond à une généralisation à deux dimensions du premier cas étudié. Le coefficient σ est égal à 2,24 et $\beta = 1$.

Les figures 10a,b donnent la structuration spatiale caractéristique des proies et des prédateurs respectivement à un temps donné de

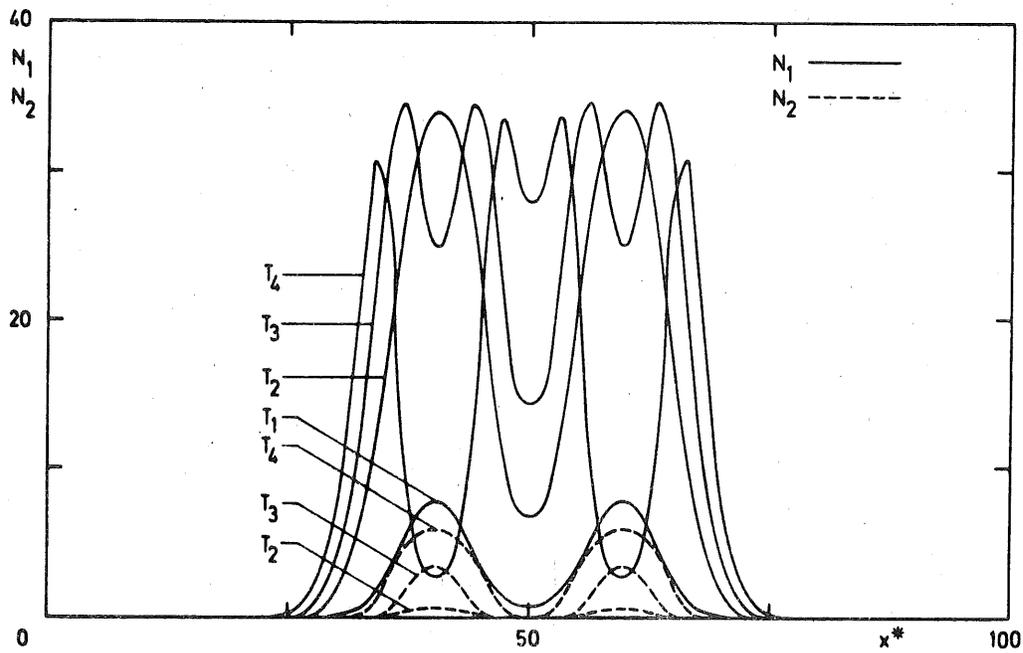


fig. 9a.

Création d'ondes proie-prédateur à partir de deux amas initiaux de plancton (équations 3.47 et 3.48). La succession des structures spatiales est donnée aux temps $\tau_1 = 6,0$; $\tau_2 = 7,8$; $\tau_3 = 8,4$ et $\tau_4 = 9,0$.

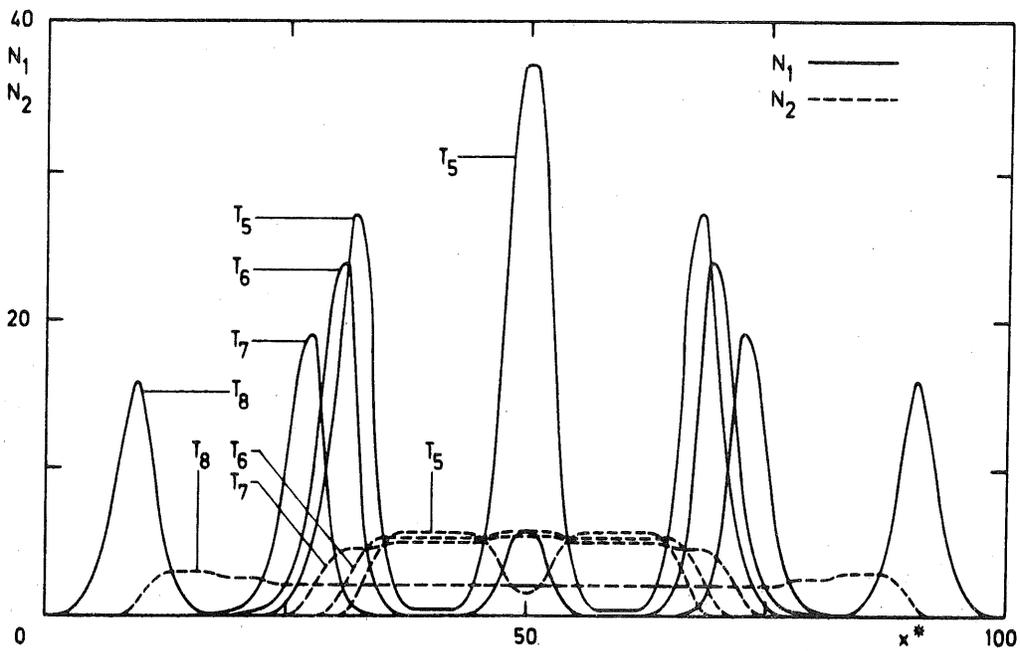


fig. 9b.

Annihilation de deux ondes proie-prédateur et propagation des deux autres. Cette figure est la continuation de la figure 9a et donne le comportement des ondes aux temps $\tau_5 = 9,6$; $\tau_6 = 10,2$; $\tau_7 = 11,4$ et $\tau_8 = 19,8$.

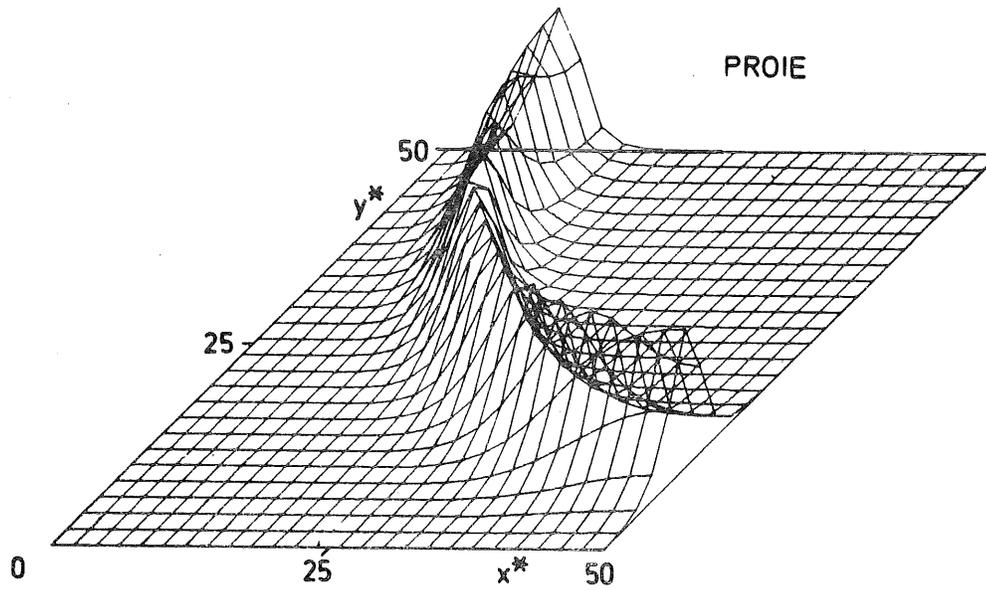


fig. 10a.

Structuration horizontale des proies sous la forme d'un anneau dont le rayon augmente avec le temps. Cette onde circulaire a les caractéristiques d'une réponse tout ou rien : la proie se comporte comme un activateur et le prédateur (fig. 10b) comme un inhibiteur.

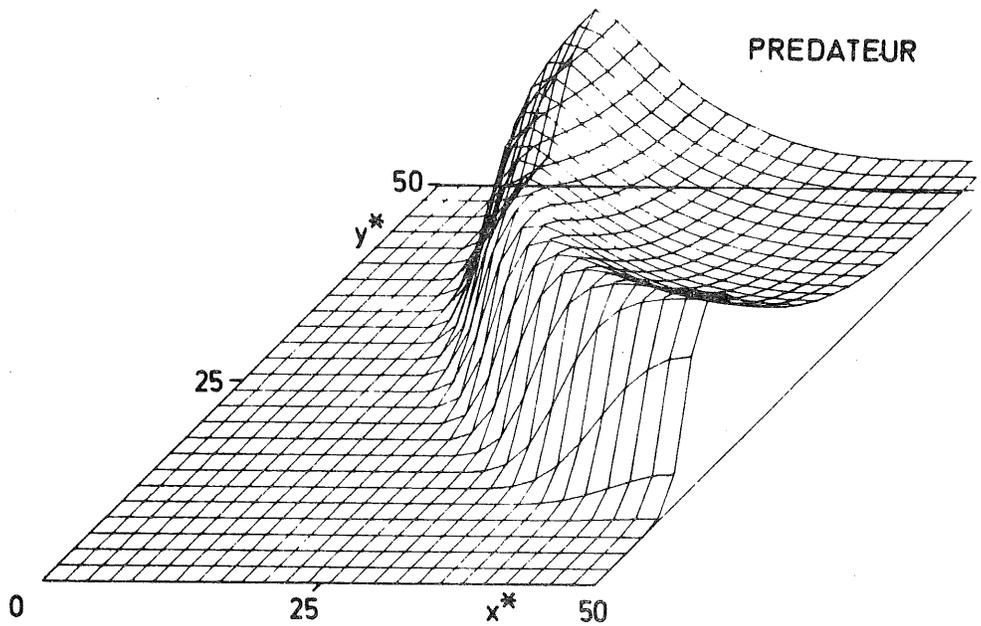


fig. 10b.

Structuration horizontale des prédateurs sous la forme d'une onde circulaire mais dont le rayon est plus petit que celui des proies. On voit un amortissement spatial plus grand d0 au temps de vie des prédateurs. Il y correspond une période réfractaire durant laquelle la génération d'une nouvelle onde ne peut avoir lieu.

leur évolution. Seul un quart de la région est dessiné à cause des propriétés de symétrie du système. La structuration horizontale de l'amas planctonique est d'abord donné par un disque circulaire croissant, la concentration de phytoplancton augmentant rapidement au centre (et correspondant ainsi à un *bloom* de phytoplancton).

Suite à l'augmentation de zooplancton herbivore, avec un temps de retard, au centre de cet amas, la quantité de phytoplancton y décroît rapidement et la structure horizontale des proies devient celle d'un anneau dont le rayon augmente avec le temps (fig. 10a).

La figure 10b montre la structure horizontale de zooplancton correspondante sous forme d'anneaux également et dont le rayon est plus petit que celui de la proie.

La séquence des événements est donc identique au cas unidimensionnel. L'anneau est constitué d'une onde circulaire active de vitesse et d'intensité constantes. Ici aussi la proie joue le rôle d'activateur et le prédateur d'inhibiteur.

L'amortissement spatial de l'onde des prédateurs (dû au temps de vie assez grand de la population des prédateurs) correspond à une période réfractaire durant laquelle la génération d'une nouvelle onde ne peut se faire. En effet, après un temps suffisant (correspondant à la période réfractaire) la simulation donne une succession de phases "explosives" conduisant à une succession d'ondes circulaires, chaque onde successive montrant une amplitude de plus en plus faible et un étalement spatial de plus en plus important conduisant finalement à une quasi-homogénéisation du centre de génération des ondes.

Une simulation à deux dimensions d'une répartition initiale de populations proie-prédateur représentée par deux amas voisins conduit à la même conclusion que dans le cas unidimensionnel. Chaque amas initial crée une onde circulaire; elles se rencontrent et on assiste à une annihilation des parties communes et ne subsiste alors qu'une seule onde qui se propage. Après un temps correspondant à la période réfractaire, deux nouvelles ondes se créent aux mêmes endroits que les premières.

Afin de voir l'effet du transport par advection sur la structuration spatio-temporelle des populations de plancton, simulons numériquement les équations (3.38) et (3.39), en tenant compte des courants d'advection dans le cas de la mer du Nord.

3.4.- Simulation de la structuration horizontale d'un amas planctonique en mer du Nord

Les équations différentielles partielles non-linéaires (équations 3.38 et 3.39) sont intégrées numériquement dans le cas de la baie sud de la mer du Nord. A partir d'un modèle mathématique de la circulation des masses d'eau dans la mer du Nord [Ronday (1975); Nihoul et Ronday (1975)], nous pouvons simuler les équations (3.38) et (3.39) en tenant compte des courants résiduels :

$$U = u(x,y) .$$

Le problème à deux dimensions a été résolu sur une grille numérique couvrant la baie sud de la mer du Nord (fig. 11). Les deux

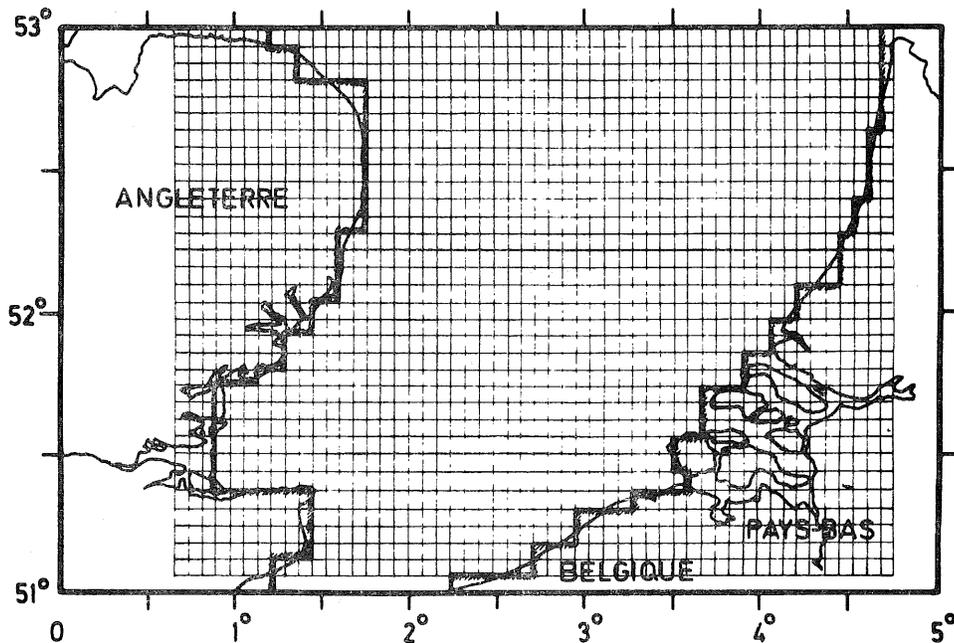


fig. 11.

Grille numérique (33 x 53 points) utilisée pour simuler le modèle théorique dans la baie sud de la mer du Nord.

populations sont supposées se dissiper à toutes les frontières (les côtes et la mer ouverte). Ces conditions ne sont pas valables quand les amas planctoniques atteignent (à cause des courants d'advection) la frontière nord. La simulation est donc limitée au temps de résidence des masses d'eau dans la baie sud.

En faisant intervenir le transport par advection dû à la circulation résiduelle, une solution hétérogène stable peut être calculée numériquement, dans le cas de la baie sud de la mer du Nord. La figure 12 montre la solution stationnaire hétérogène de populations de plancton proie-prédateur, les concentrations des deux populations étant maintenues, aux valeurs N_{10} et N_{20} respectivement, aux frontières nord et sud (N_{10} et N_{20} correspondent aux solutions homogènes des équations en négligeant l'advection). Cette situation, bien qu'artificielle en pratique, nous permet de montrer l'influence du terme d'advection sur la solution stationnaire homogène.

Une accumulation de plancton près de la Belgique et des Pays-Bas a pour origine le grand tourbillon créé par la "tension de marée" [Nihoul et Runday (1975)] dans la région de l'estuaire de l'Escaut. Une seconde région de grande accumulation de plancton peut également se voir sur la figure. Dans cette expérience de simulation, nous voyons nettement l'effet perturbateur de l'advection sur la solution stationnaire homogène.

A partir des données expérimentales *in situ* de la répartition de plancton dans la baie sud de la mer du Nord, on sait que les amas planctoniques, en provenance de la Manche, circulent plus ou moins à la suite les uns des autres [*e.g.* Wyatt (1973)]. Il semble donc réaliste de considérer, comme conditions initiales de la simulation numérique, un amas de plancton proche de la frontière sud comme s'il provenait de la Manche.

Les figures 13a à 13c montrent la structuration spatio-temporelle de l'amas de plancton à quatre moments différents de son évolution à partir des résultats numériques.

Sous l'influence des courants résiduels, l'amas planctonique se déplace dans la direction nord-est. La structuration spatio-temporelle

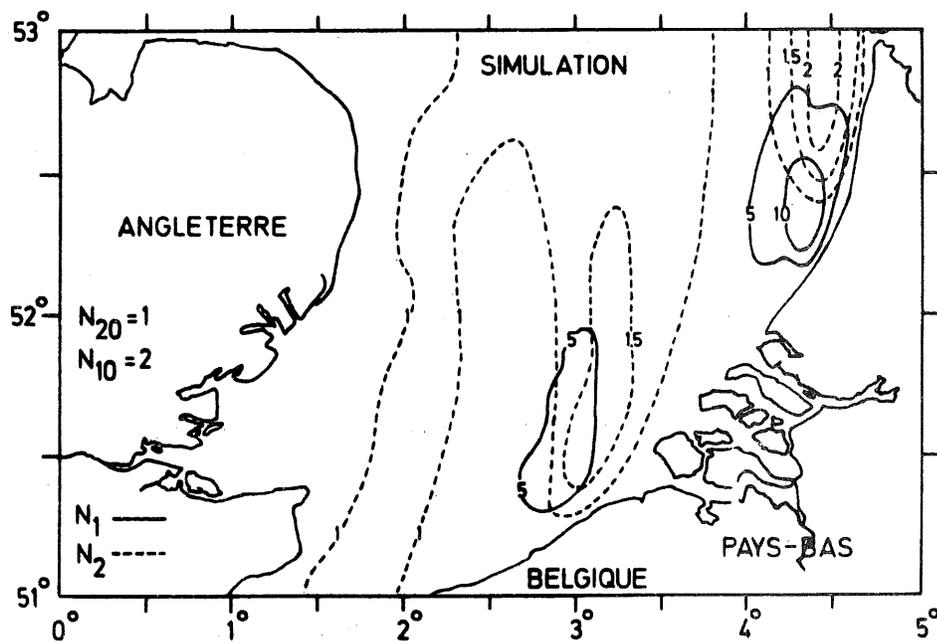


fig. 12.

Solution stationnaire hétérogène des populations de phytoplancton (N_1) et zooplancton (N_2) dans la baie sud de la mer du Nord par simulation des équations (3.25) et (3.26). Notez les deux zones d'accumulation naturelle de plancton. Les valeurs des paramètres sont : $\sigma = 2,24$ et $\omega = 0,134 \text{ j}^{-1}$. Une unité de N_1 vaut $0,1/0,004 \text{ mg C m}^{-3}$ et une unité de N_2 vaut $0,4/0,003 \text{ mg C m}^{-3}$.

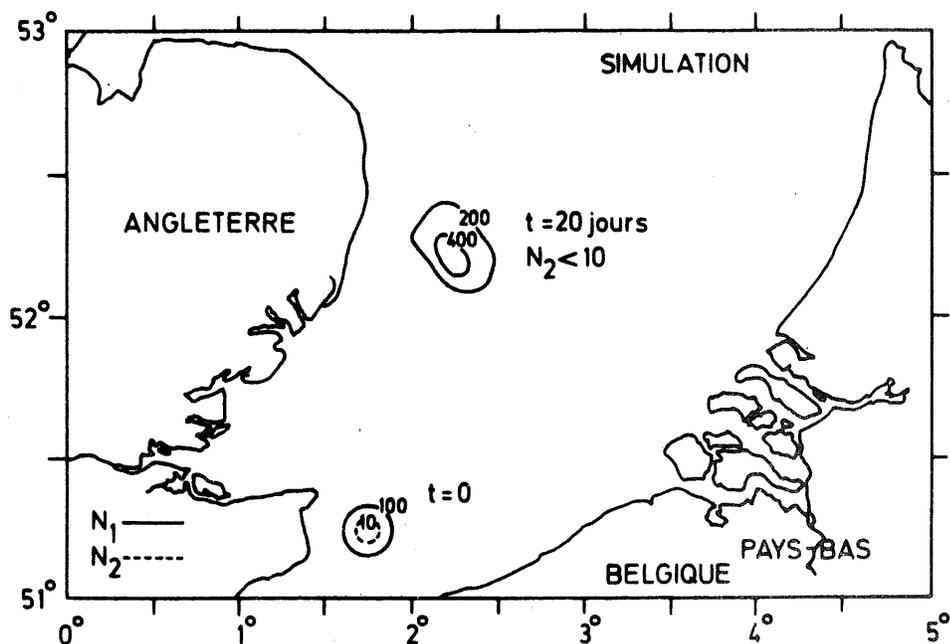


fig. 13a.

Répartition initiale, $t = 0$, de la proie N_1 et du prédateur N_2 pour la simulation numérique du modèle non-linéaire. Les concentrations sont données en mg C m^{-3} . Les valeurs des paramètres sont : $\sigma = 2$ et $\omega = 0,2 \text{ j}^{-1}$. Après 20 jours, on observe un accroissement en phytoplancton et une décroissance en zooplancton herbivore.

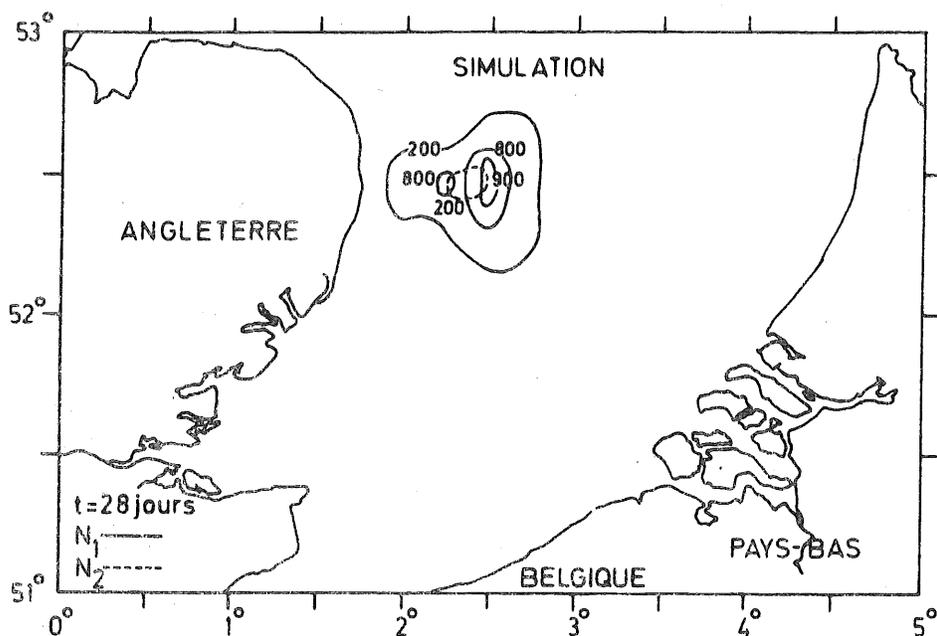


fig. 13b.

Evolution ultérieure en $t = 28$ jours. Notez la formation de deux amas dans la distribution des proies et la croissance de la population de prédateurs entre ces deux amas.

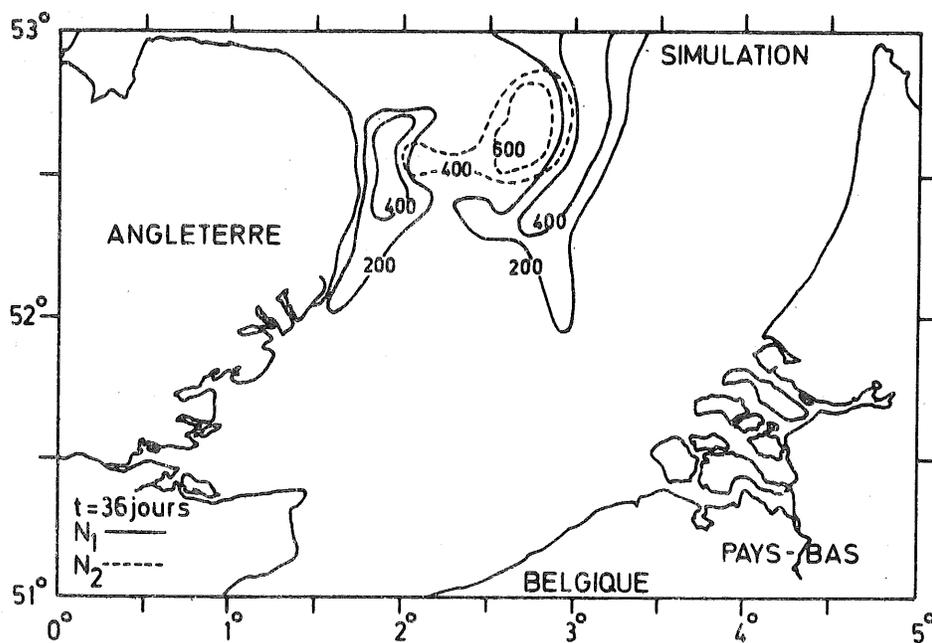


fig. 13c.

Evolution ultérieure en $t = 36$ jours. L'amas initial s'est transformé en deux amas isolés l'un de l'autre. Notez le remplacement de la population des proies au centre de l'amas par la population des prédateurs. Cette figure montre clairement le mécanisme physique de l'initiation de la "patchiness" par les courants d'advection.

des populations de phytoplancton et de zooplancton herbivore au sein de l'amas planctonique se fait comme suit.

D'abord, on observe une croissance de la population de phytoplancton ainsi qu'une augmentation du diamètre de l'amas. Ensuite, la quantité de phytoplancton décroît brusquement au centre à cause de l'accroissement du zooplancton herbivore à cet endroit.

Ainsi, au cours de cette structuration spatio-temporelle, la structure "en anneau" est due, comme nous l'avions vu précédemment, à la compétition entre les interactions non-linéaires proie-prédateur et la diffusion, tandis que la déformation de cet anneau a pour origine les courants d'advection. Le transport par advection est donc responsable de l'accroissement des inhomogénéités au sein de l'amas.

Le même type d'évolution spatio-temporelle a été mis en évidence expérimentalement *in situ* dans la baie sud de la mer du Nord par Wyatt (1973). Wyatt donne l'évolution temporelle de la concentration en *Oikopleura dioica*.

Il a observé que la structure de l'amas est un disque circulaire qui se transforme en une structure en anneau comme nous le prévoyons. Wyatt a attribué cette structure en anneau à la mortalité différente dans les populations biologiques. Notre modèle suggère que c'est un résultat de la compétition entre des processus de diffusion et des interactions écologiques. De plus, comme prédit par notre modèle, "*the main part of the patch was seen to have two regions of very high density, separated by an area with lower numbers. One may perhaps imagine the regions of maximum concentration as having formed a circular disc which had now lost its centre and broken into segments*" [Wyatt (1973)].

Une comparaison entre les résultats numériques et expérimentaux peut être trouvée ailleurs [Dubois (1975a)].

Références

- DUBOIS, D.M., (1975a). Simulation of the spatial structuration of a patch of prey-predator plankton populations in the Southern Bight of the North Sea, *Mém. Soc. Roy. Sci. Liège*, 6ème série, VII, 75-82.
- DUBOIS, D.M., (1975b). Hydrodynamic aspects in environmental and ecological enhancement, *Proceedings Second World Congress, International Water Resources Association*, New Delhi, December 1975, Volume V, 413-419.
- DUBOIS, D.M., (1976). On temporal and spatial structure in model systems and application to ecological patchiness, *Proceedings "Colloques IRIA" on "New trends in systems analysis"*, Versailles-Rocquencourt 13-17 décembre 1976, 599-613.
- JEFFRIES, C., (1973). Probabilistic limit cycles, *Lecture notes in Biomathematics*, Springer-Verlag, 2, 123-131.
- JOSEPH, J. and SENDNER, H., (1958). Über die horizontale diffusion in Meere, *Dtsch. Hydrogr., Z.*, 11, 49-77.
- KIERSTEAD, H. and SLOBODKIN, L.B., (1953). The size of water masses containing plankton blooms, *J. of Marine Research*, XII, 1, 141.
- MARGALEF, R., (1967). Some concepts relative to the organization of plankton, *Oceanogr. Mar. Biol. Ann. Rev.*, 5, 257-289.
- MARGALEF, R. and ESTRADA, M., (1971). Simple approaches to a pattern analysis of phytoplankton, *Investigation Pesquera*, 35 (1), 269-297.
- NIHOUL, J.C.J. and RONDAY, F., (1975). The influence of the tidal stress on the residual circulation, *Tellus*, 27, 5.
- O'BRIEN, J.J. and WROBLEWSKI, J.S., (1973). On advection in phytoplankton models, *J. Theor. Biol.*, 38, 197-202.
- PATTEN, B.C., (1968). Mathematical models of plankton production, *Int. Revue ges. Hydrobiol.*, 53, 357-408.
- PLATT, T., DICKIE, L.M. and TRITES, R.W., (1970). Spatial heterogeneity of phytoplankton in a near-shore environment, *J. Fish. Res. Bd. Canada*, 27, 1453-1473.
- PLATT, T., (1975). The physical environment and spatial structure of phytoplankton populations, Proc. of the Sixth Liège Colloquium on Ocean Hydrodynamics, edited by J.C.J. Nihoul, *Mém. Soc. Roy. Sci. Liège*, 6ème série, VII, 43-57.

- PLATT, T. and DENMAN, K.L., (1975). Spectral analysis in ecology, *Ann. Rev. of Ecol. and Syst.*, 6, (in press).
- RILEY, G.A., (1955), in *Pap. Mar. Biol. Oceanogr., Deep Sea Res. Suppl.*, 3, 224-238.
- RONDAY, F., (1975). Mesoscale effects of the tidal stress on the residual circulation of the North Sea, *Proc. of the Sixth Liège Colloquium on Ocean Hydrodynamics*, edited by J.C.J. Nihoul, *Mém. Soc. Roy. Sci. Liège*, 6ème série, VII, 273-287.
- STEELE, J.H., (1974). Spatial heterogeneity and population stability, *Nature*, 248, 83.
- WALSH, J.J., DUGDALE, R.C., (1971a). *Invest. Pesq.*, 35, 309.
- WALSH, J.J., KELLEY, J.C., DUGDALE, R.C. and FROST, B.W., (1971b). Gross features of the Peruvian upwelling system with special references to possible diel variation, *Investigation Pesquera*, 35 (1), 25-42.
- WROBLEWSKI, J.S., O'BRIEN, J.J. and PLATT, T., (1975). On the physical and biological scales of phytoplankton patchiness in the ocean, *Proc. of the Sixth Liège Colloquium on Ocean Hydrodynamics*, edited by J.C.J. Nihoul, *Mém. Soc. Roy. Sci. Liège*, 6ème série, VII, 43-57.
- WYATT, T., (1973). The biology of *Oikopleura dioica* and *Fritillaria borealis* in the Southern Bight, *Marine Biology*, 22, 137.

Achévé d'imprimer le 15 juillet 1977
sur le duplicateur et la presse offset
d'é.t.a.b.é.t.y.p.
72, quai de Longdoz - 4020 LIEGE
Tél.: 041/42.59.21

