

Modélisation et dynamique des interfaces dans le cycle de l'eau

Contribution : Journée IHP, organisée par Jean-Raynald De Dreuzy et Antoine Rousseau

Ce document présente les résultats de la prospective ayant réuni une vingtaine de chercheurs des deux communautés mathématique et environnementale à l'Institut Henry Poincaré le 17 avril 2013 dans le cadre de l'Atelier de Recherche Prospective MathsInTerre. Suivant une mise en perspective de la problématique et un état de l'art succincts, le document est organisé autour de trois thèmes fédérateurs transversaux à la fois aux applications environnementales et aux problématiques mathématiques. Enfin il propose des pistes d'actions concrètes pour développer cette thématique et favoriser les interactions entre communautés scientifiques.

Contexte

La pression sur les ressources autant que la préservation du milieu naturel demandent de plus en plus une compréhension globale des systèmes environnementaux. Il s'agit par exemple de considérer simultanément les circulations atmosphériques et océaniques pour fournir des prédictions météorologiques fiables. Il s'agit également de prendre en compte les interactions entre les différents compartiments hydrologiques et hydrogéologiques pour gérer les ressources en eau. Les domaines couvrent une large gamme d'échelles spatiales de l'échelle de la rivière à l'échelle continentale par exemple. Les processus impliquent aussi une large gamme de temps caractéristiques entre des temps rapides de l'ordre de la seconde dans l'atmosphère et des temps longs de l'ordre du mois voire de l'année dans les milieux souterrains.

Très généralement, les systèmes environnementaux doivent intégrer un spectre de plus en plus large de processus et d'échelles spatiales et temporelles. C'est un enjeu fort pour les recherches sur l'environnement avec une croissance rapide de la quantité de données et d'informations à intégrer. C'est aussi un défi important pour les méthodes mathématiques qui doivent coupler un nombre croissant de compartiments à travers de multiples interfaces. Les discussions ont fait ressortir à la fois l'ubiquité et la diversité des interfaces. Les interfaces diffèrent dans leur statut entre des interfaces réelles entre des domaines physiquement ou chimiquement bien séparés, ou des interfaces virtuelles introduites pour permettre la modélisation. Elles diffèrent aussi par leur nature, soit franches entre deux domaines bien identifiées, soit diffuses ou épaisses notamment pour prendre en compte des phénomènes de couches limites. Elles diffèrent enfin dans leur fonction et par la nature des échanges entre les domaines de part et d'autre. Les interfaces apparaissent comme un élément crucial de la modélisation des systèmes environnementaux.

État de l'art

Dans ce document, nous nous intéressons aux interfaces stationnaires ou quasi-stationnaires (variations lentes). La problématique importante (et mathématiquement délicate) du suivi d'interface, cruciale dans le couplage fluide-structure par exemple, ne sera pas traitée ici (elle a simplement été évoquée lors des discussions). La question des conditions de frontière ouverte est un sujet essentiel apparu avec la simulation numérique de processus physiques dans des domaines à aire limitée. Depuis les premiers travaux de [Engquist and Majda, 1977], la recherche des conditions aux limites transparentes (CLT) est devenu un sujet important, notamment pour la mécanique des fluides géophysiques. Cependant, les CLT sont généralement impossibles à traiter numériquement pour diverses raisons (elles sont en particulier non locales). Afin de contourner cette difficulté, les mathématiciens appliqués ont cherché depuis lors à approcher les conditions exactes avec le double objectif de proposer des solutions qui soient numériquement faciles à mettre en œuvre, et qui limitent la réflexion d'ondes parasites aux frontières du domaine. Une alternative bien connue à ce travail sur les conditions aux limites réside dans la mise en place de couches absorbantes (les PML de Béranger), très utilisées en électromagnétisme.

Mais les conditions de frontière ouverte ont trouvé plus récemment une utilisation différente, car elles fournissent un cadre naturel pour le couplage de modèles à travers une interface. Les exemples de couplage sont nombreux, de la décomposition de domaine (modèles identiques de part et d'autre de l'interface) au

couplage de modèles hétérogènes (océan/atmosphère ou hydrologie/hydrogéologie pour ne donner que deux exemples). Dans le cadre de tels couplages, il est essentiel de bien décrire les phénomènes qui ont cours à l'interface des deux (ou plusieurs) régions. En effet, la qualité de la connaissance de la nature des échanges entre les différents processus est indispensable à la qualité du modèle global. Mathématiquement, cela se traduit par un impact fort du choix des conditions aux limites d'interface sur la qualité du système couplé.

De façon similaire, les méthodes itératives de type Schwarz reposent principalement sur la qualité des conditions d'interfaces utilisées (les meilleures - mais aussi les plus difficile à mettre en oeuvre - étant les conditions transparentes). Pourtant, dans les codes opérationnels, les conditions d'interfaces utilisées sont trop souvent très éloignées de ce qui pourrait/devrait être mis en place afin d'améliorer les solutions couplées. Dans les modèles de géophysique par exemple, on voit encore souvent des conditions de type Dirichlet, Neumann ou Flather dans le meilleur des cas...

Thèmes fédérateurs

Thème 1 : Rôle des interfaces dans la stratégie de modélisation des systèmes environnementaux

Mots-clefs : interfaces réelles et virtuelles, suivi d'interfaces

Les interfaces donnent une opportunité d'optimiser les stratégies de modélisation des systèmes environnementaux complexes à travers la suppression d'interfaces réelles ou la création d'interfaces virtuelles.

Les interfaces « réelles » marquent des limites entre domaines physiquement séparés par des discontinuités de propriétés physiques ou des transitions de phase (e.g. interface entre océan atmosphère, interface entre zones saturée et non saturée dans les milieux souterrains). Ces interfaces peuvent être traitées en tant que telles, suivies dynamiquement avec un large panel de méthodes existants de suivi de front nécessitant pour une large part des maillages adaptatifs. Elles peuvent également être intégrées dans des systèmes d'équations généralisées. C'est le cas par exemple de l'interface fluide-sédiments dans les rivières. C'est aussi le cas des fronts de réactivité dont le caractère multi-échelle incite fortement à une certaine homogénéisation. Si les deux stratégies sont communément développées, il existe peu de critères orientant vers le choix d'une stratégie optimale.

Les interfaces « virtuelles » sont introduites dans un domaine homogène pour faciliter la modélisation des processus physiques. Par exemple, les écoulements à fort nombre de Mach et pour tout nombre de Mach peuvent être avantageusement séparées pour des traitements différenciés. De même, les fortes différences des circulations dans les domaines hauturiers et côtiers se prêtent à l'introduction d'une interface « virtuelle » permettant l'utilisation des équations intégrées les plus pertinentes dans chacun des domaines. L'identification de ces interfaces s'avère particulièrement intéressante pour décomposer les problèmes multi-physiques complexes en séparant spatialement les domaines où prévalent des couplages différents.

La création d'interfaces virtuelles comme la suppression d'interfaces réelles ouvre une large gamme de stratégies de modélisation. Comment choisir la stratégie optimale ? Peut-on trouver certains critères généraux qui dépassent les champs disciplinaires ? Où et comment introduire des interfaces virtuelles ? Comment ces interfaces virtuelles doivent-elles évoluer ? La gestion de l'existence des interfaces peut-elle être et doit-elle être dynamique ?

Thème 2: Analyse mathématique des échanges entre modèles présentant éventuellement de fortes disparités spatiales et temporelles

Mots-clefs : Multi-échelle en espace et en temps, couplage global-local, couplage entre modèles, couches limites, interface diffuse, conditions aux limites

L'impact fort du choix des conditions aux limites d'interface entre un ou plusieurs processus élémentaires est bien connu des physiciens, géophysiciens et numériciens. L'objectif des uns et des autres, quel que soit le vocabulaire employé (conditions transparentes, frontière libre, deflective boundary conditions, etc.), est bien de recourir à des conditions aux limites qui facilitent les échanges entre les modèles (conservation de vitesses, flux, énergie, etc.). Il est bien connu que, pour des modèles complexes comme ceux que l'on retrouve en géophysique, ces conditions parfaites sont inutilisables en pratique. Les mathématiques ont donc un rôle essentiel à jouer dans la recherche et la validation de conditions approchées qui soient telles que :

- ces conditions soient utilisables en pratique (dans les codes de calcul),
- le problème mathématique sous-jacent soit bien posé,
- les simulations numériques qui en découlent soient physiquement satisfaisantes.

L'une des applications les plus courantes du couplage de modèles est l'interaction entre un modèle grossier et un modèle plus fin, simulé dans une sous-partie du domaine d'origine correspondant à un "zoom" dans une zone d'intérêt : on parle alors de downscaling. La frontière de la sous-partie du domaine que l'on considère définit une interface entre deux modèles a priori distincts. Ces derniers peuvent différer uniquement du point de vue discret, ou bien encore du point de vue continu (dans ce cas les équations diffèrent en plus de la discrétisation). Mais dans les deux cas, le modèle à grande échelle doit passer, d'une façon qu'il convient d'analyser correctement, les informations pertinentes et nécessaires à la résolution du modèle à petite échelle. Ainsi, il est indispensable de pouvoir quantifier, en fonction de la qualité de l'information fournie à l'interface par le modèle à grande échelle, la qualité de la simulation fournie à petite échelle.

Cette problématique est déjà bien connue des sciences géophysiques, l'emboîtement des modèles (en météorologie, océanographie, hydrologie ou hydrogéologie) ayant émergé depuis de nombreuses années. Mais les techniques mathématiques de couplage utilisées restent encore rudimentaires et (surtout) trop peu validées. Ajoutons que cette problématique, ici décrite dans le cas de processus multi-échelle en espace, s'accompagne naturellement de phénomènes similaires en temps pour lesquels les solutions proposées (même élémentaires) sont beaucoup moins nombreuses.

Thème 3 : Stratégies numériques pour la discrétisation des conditions aux limites et le couplage de modèles

Mots-clefs : méthodes intrusives et non intrusives, méthode de Schwarz, décomposition de domaines, calcul intensif

Une fois les interfaces établies et les conditions aux limites choisies pour décrire les échanges entre les processus, reste à procéder au couplage à proprement parler. La question naturelle qui se pose alors est la suivante : faut-il faire appel à des solveurs intégrant toute la physique (utilisant le cas échéant des outils empruntés aux techniques d'homogénéisation), ou au contraire réutiliser (en les adaptant) des outils a priori dédiés à la simulation d'un unique processus ?

La réponse peut varier, suivant le degré de maturité des outils numériques existants, mais les méthodes intrusives comme non intrusives doivent être considérées, avec leurs avantages et leurs inconvénients. Parmi les méthodes non intrusives qui nous semblent avoir été prioritairement utilisées, figure la méthode de Schwarz, bien connue de la communauté DDM (Domain Decomposition Methods). Cette méthode a l'avantage d'être simple : elle utilise une boucle de convergence externe dans laquelle les codes relatifs aux différents processus peuvent être réutilisés. Son principal inconvénient réside dans son coût : la boucle externe multiplie le nombre d'appels à des algorithmes souvent gourmands en temps de calcul. D'où le besoin de limiter le nombre d'itérations nécessaires dans la boucle externe en proposant de nouvelles conditions aux limites d'interface entre les processus (la méthode est donc faiblement intrusive). Les outils

numériques considérés étant gourmands en temps de calcul, il est également possible (et assez naturel avec la méthode de Schwarz) de faire appel au calcul intensif.

Afin d'optimiser les performances sur des architectures complexes, les interactions entre les différents processeurs devraient être limitées : c'est l'objectif des méthodes globales en temps, qui ne procèdent pas systématiquement aux échanges d'informations entre les processus à chaque pas de temps du modèle. Ces méthodes pourraient être davantage développées et implémentées, car comme pour le couplage multi-physique, la communauté s'est jusqu'à maintenant davantage intéressée aux problématiques spatiales que temporelles.

Propositions d'animation

- Thème d'animation 2014 de la maison de la simulation :
La maison de la simulation propose chaque année un thème scientifique autour duquel s'organisent formation, réflexion prospective et développements. La thématique « interfaces » peut être proposée pour 2014 avec plusieurs pistes d'animation :
 - ▶ séminaire de formation et discussions avec les institutions intéressées (INRIA, CEA, EDF,...).
 - ▶ réunions ciblées sur chacun des trois thèmes précédemment identifiés
 - ▶ site web répertoriant les compétences dans les différentes thématiques concernées
 - ▶ restitution finale avec les représentants des institutions et les domaines d'application concernés

- Benchmark :
Les benchmarks apparaissent comme un moyen de collaboration potentiel. Ils peuvent servir de ponts entre communautés environnementale et mathématique. La constitution de benchmarks généraux peut s'appuyer sur les cas tests existants dont il s'agirait d'abstraire les difficultés mathématiques principales.

- Plateforme de modélisation
Les recherches en environnement s'organisent de plus en plus autour d'observatoires ou de zones ateliers. Ce sont des sites sur lesquels la communauté scientifique s'investit autour de problématiques ciblées avec un fort développement des connaissances. Ces observatoires, comme le nom l'indique, sont essentiellement dédiés à l'observation. Il serait intéressant de développer une articulation des plateformes de modélisation en relation avec les observatoires.
Les plateformes de modélisation pourraient comprendre plusieurs degrés de la définition des modèles pertinents, leur analyse mathématique, leur mise en œuvre numérique jusqu'à des « observatoires virtuels ».