



Modèles numériques directs et inverses d'écoulements de fluides

Jerome Monnier

► To cite this version:

Jerome Monnier. Modèles numériques directs et inverses d'écoulements de fluides. Mathématiques [math]. Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG, 2007. tel-00259450

HAL Id: tel-00259450

<https://theses.hal.science/tel-00259450>

Submitted on 28 Feb 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Mémoire présenté par

Jérôme Monnier

Maître de Conférences en Mathématiques Appliquées
Universités de Grenoble, INP - Ensimag, Laboratoire LJK

Pour l'obtention du

Diplôme d'Habilitation à Diriger des Recherches

**Modèles Numériques Directs et Inverses
d'Écoulements de Fluides**

Soutenu le 22 novembre 2007

devant le jury composé de :

M. T. Chacón Rebollo	Professeur des Universités (Catedrático), Sevilla	Rapporteur
M. I. Ionescu	Professeur des Universités, Paris 13	Rapporteur
M. B. Mohammadi	Professeur des Universités, Montpellier	Rapporteur
M. M. Amara	Professeur des Universités, Pau	
M. E. Barthelemy	Professeur des Universités, Grenoble	
M. G-H. Cottet	Professeur des Universités, Grenoble	
M. F-X. Le Dimet	Professeur des Universités, Grenoble	



Laboratoire Jean Kuntzmann LJK, BP 53, F-38041 Grenoble Cedex 9
ljk.imag.fr

Table des matières

Résumé	iii
1 Introduction	1
2 Résultats d'existence et unicité de solutions	4
2.1 Un modèle d'élasticité adaptative (ré-adaptation mécanique des os)	4
2.2 Un modèle de convection libre avec transferts radiatifs corps gris	7
3 Autour de l'optimisation de forme pour des écoulements	13
3.1 Un cadre mathématique pour l'optimisation de forme. Illustration avec un modèle couplé	14
3.1.1 Le modèle couplé de fluide et optimisation de forme . . .	15
3.1.2 Cadre mathématique et numérique pour l'optimisation de forme	16
3.1.3 Calcul de sensibilité de forme et processus global d'opti- misation	19
3.2 Usage de l'optimisation de forme pour un calcul de surface libre : électro-mouillage	21
3.2.1 Le processus d'électro-mouillage et sa modélisation	22
3.2.2 ElectroCap et calcul de formes de gouttelettes	23
3.2.3 Prolongements en cours	25
4 Ecoulements de micro-gouttes : surfaces libres et contacts	27
4.1 Dynamique de la ligne triple et le modèle de Shikhmurzaev . . .	28
4.1.1 Aspects qualitatifs	28
4.1.2 Modélisation mathématique et difficultés sous-jacentes . .	29
4.1.3 Le modèle de Shikhmurzaev reformulé	31
4.1.4 Analyse 1D du modèle mésoscopique de surface	34
4.2 Étalement de gouttelettes et formulation éléments finis ALE . . .	36
4.2.1 Un calcul simple mais direct de courbure	36
4.2.2 Le modèle macroscopique : hydrodynamique à surface libre avec conditions locales de glissement généralisées	37
4.2.3 Impact de gouttelettes : simulation de la phase d'étalement	40
4.3 Bilan et perspectives	41

5	Modèles numériques en hydraulique fluviale et inondations.	
	Assimilation variationnelle de données, calage, couplages	47
5.1	DassFlow : un modèle numérique direct et inverse pour l'hydraulique fluviale	49
5.1.1	Modèles directs 2D et 1D. Couplage.	49
5.1.2	Solveur direct	51
5.1.3	Principes de l'assimilation variationnelle de données . . .	54
5.1.4	Des équations adjointes au code adjoint différentié automatiquement	56
5.2	Démonstration des potentialités sur des données réelles (mais standards)	58
5.3	Données spatialement distribuées (une image satellite)	62
5.3.1	Investigation numérique sur l'apport d'une image satellite	62
5.3.2	Application à un cas réel : crue de la Moselle	65
5.4	Données lagrangiennes	68
5.4.1	Modèle de transport additionnel et vitesse de transport...	69
5.4.2	Survol et identification d'une topographie locale	70
5.4.3	Un cas réel en canal	70
5.5	Superposition locale d'un modèle de zoom et assimilation simultanée	74
5.5.1	Idée de base	75
5.5.2	L'algorithme de couplage et assimilation simultanés . . .	76
5.5.3	Cas tests	77
5.6	DassFlow : développements et applications à court terme	80
6	Vers l'hydrologie et la glaciologie. Perspectives et travaux en cours	92
6.1	Hydrologie des sols : infiltrations à l'échelle d'un bassin versant .	92
6.2	Hydrologie : vers une plate-forme intégrée commune	96
6.3	Glaciologie : modèles global et local d'écoulement de la calotte polaire	98

Résumé

Ce mémoire d'Habilitation à Diriger des Recherches (HDR) retrace dix années de recherche en tant que maître de conférences, autour de modèles d'EDP appliqués à des écoulements de fluides. On y trouve aussi bien des aspects analyse mathématique, qu'analyse numérique, algorithmique ou encore calcul et mise en oeuvre informatique. Les principaux modèles d'EDP abordés sont les équations de Navier-Stokes ou Stokes surface libre (micro-fluidique, glaciologie), les équations de St-Venant ou asymptotique "shallow" (hydraulique fluviale, glaciologie).

L'orientation de ces études vers les thématiques applicatives a conduit à élaborer des modèles numériques potentiellement applicables aux problèmes réels posés. Ainsi, les aspects calibration de modèles, optimisation, identification, analyse de sensibilité et assimilation de données (via le contrôle optimal) y sont largement représentés.

En termes de réalisation de logiciels prototypes, sont présentés un code d'hydraulique fluviale (inondations) dédié à l'analyse de sensibilité, l'assimilation variationnelle de données et le couplage, un code surface libre d'impact de gouttelettes (2D axisymétrique ALE) et un code d'optimisation de forme appliqué à l'électro-capillarité.

Le premier chapitre présente des analyses mathématiques et analyse de schémas éléments finis basées sur des troncatures. Un second chapitre décrit un cadre mathématique et algorithmique pour l'optimisation de forme, avec applications à un modèle Navier-Stokes - thermique radiative et à une gouttelette électriquée (électro-capillarité). Un troisième chapitre traite de la modélisation numérique de la dynamique d'une gouttelette sur un substrat solide. La dynamique de la ligne triple y est décrite à l'aide du modèle de Shikhmurzaev. Dans un quatrième chapitre sont présentés plusieurs travaux autour d'écoulements fluviaux et zones d'inondations (St-Venant 1.5D-2D, schémas volumes finis). Les processus de calibrage de modèles, de couplage et d'assimilation variationnelle de données constituent une grande part des travaux. Des applications à des écoulements réels avec données non standards (trajectoires lagrangiennes, image satellite) démontrent la potentialité des méthodes développées. Le dernier chapitre traite des travaux récemment initiés et tout particulièrement ceux relatifs aux calottes polaires (Stokes non-Newtonien et équations asymptotiques). Parmi les difficultés mathématiques soulevées figurent la réduction de modèles (asymptotique, réduction d'ordre), le couplage, la sensibilité des modèles aux erreurs et aux paramètres, et enfin l'assimilation de données et le calibrage.

Mots-Clefs. Calcul scientifique, modélisation mathématique et numérique.

Equations aux Dérivées Partielles (EDPs), schémas numériques, contrôle optimal, assimilation de données, couplage, écoulements surface libre, écoulements peu profonds, conception optimale de forme.

Applications : écoulements environnementaux (rivières - inondations, glaciologie, hydrologie), hydraulique, microfluidique.

Chapitre 1

Introduction

Ce document retrace dix années de recherche autour de modèles d'EDP appliqués à des écoulements de fluides (à une exception près). En début de parcours, je me suis plutôt intéressé aux aspects analyse mathématique (existence, propriétés de solutions, estimations à priori etc), aux aspects analyse numérique (convergence de schémas éléments finis essentiellement), et avec application à des modèles d'élasticité (l'exception non fluide), Navier-Stokes avec thermique radiative couplée ou encore équation surfacique locale en micro-fluidique. A mi-parcours, je me suis ensuite plus tourné vers les préoccupations des chercheurs utilisateurs potentiels de nos modèles et ceci tout d'abord dans le domaine de la micro-fluidique, puis l'hydraulique fluviale et à présent l'hydrologie de manière plus large et enfin la glaciologie. Cette ouverture vers les thématiques applicatives m'a conduit à élaborer des modèles numériques applicables aux problèmes réels posés.

Parmi les modèles d'EDP que j'ai abordés, figurent les équations de Navier-Stokes surface libre (micro-fluidique), les équations de St-Venant (hydraulique fluviale) et à présent les équations de Richards (hydrologie des sols), et enfin les équations de Stokes en non-newtonien et les équations glaces-peu-profondes (glaciologie).

Du fait de ma culture initiale en conception optimale de forme (travaux de thèse), en parallèle des modèles et solveurs directs, j'ai naturellement pu m'intéresser aux aspects analyse de sensibilité, assimilation de données et identification de paramètres (calibrage) via les techniques de contrôle optimal. Ces aspects sont particulièrement importants pour les écoulements géophysiques qui sont des écoulements à grande échelle spatiale avec des données entachées d'erreurs (données de terrain par exemple), écoulements qui sont difficilement ou pas du tout reproductibles, et qui s'appuient sur des paramétrisations empiriques. Du point de vue mathématique et numérique, l'applicabilité des modèles suppose des solveurs robustes (aux données réelles) et abordables en terme de coût de calcul pour les échelles de temps et d'espace considérées. Concernant ce dernier point, la notion de réduction de modèles y trouve naturellement sa place.

En termes de réalisation de logiciels prototypes, tout d'abord j'ai conçu un code d'optimisation de forme (2D axisymétrique) appliqué à l'électro-capillarité,

code actuellement à la base des calculs d'une thèse dans le domaine. En parallèle, et toujours dans le domaine de la micro-fluidique, nous avons développé avec un chercheur post-doctorant un code surface libre d'impact de gouttelettes (2D axisymétrique ALE). Dans le domaine de l'hydraulique fluviale, j'ai mené le projet de développement d'un code dédié à l'analyse de sensibilité et assimilation variationnelle de données. Ce logiciel est à présent largement repris et constitue la source de plusieurs collaborations. Dans la continuité de ce dernier projet, nous avons à présent pour ambition avec deux autres groupes de collègues européens de fusionner nos codes et savoir-faire autour d'une plate-forme intégrée plus large dédiée à l'hydrologie (surface et sols).

Le contenu de ce document semble à priori disparate, cependant il suit ma démarche chronologique et de ce fait entre deux études (et donc entre deux parties), on retrouve toujours des idées et méthodes précédemment développées. En somme, des problèmes disparates mais une évolution continue des outils mathématiques et numériques.

Dans le chapitre 2, je présente deux analyses mathématiques (estimations à priori, existence de solutions etc) et une analyse de schémas éléments finis pour un système complexe fortement couplé. Ces analyses portent sur un modèle d'élasticité adaptative (ré-adaptation des os aux contraintes extérieures) et sur un modèle d'écoulements Navier-Stokes fortement couplé avec une thermique radiative corps gris.

Dans le chapitre 3, j'écris la synthèse d'un cadre mathématique pour la conception optimale de forme, et ceci avec application au modèle Navier-Stokes thermique radiative précédent (mais en faiblement couplé). Dans une seconde partie, ce cadre mathématique et numérique est ensuite directement appliqué à une gouttelette électriée (électro-capillarité), modélisée à l'état d'équilibre comme minimisant son énergie totale (un problème de surface libre en statique modélisé comme un problème d'optimisation de forme). Les discrétisations et algorithmiques relatives aux aspects optimisation de forme y sont décrites.

Le chapitre 4 traite de la modélisation numérique de la dynamique d'une gouttelette sur un substrat solide. La difficulté majeure résidant dans la description de la dynamique de la ligne triple. Le modèle de Shikhmurzaev y est étudié. Une analyse mathématique 1D incluant des propriétés de la solution ainsi qu'une analyse numérique éléments finis y sont présentées. Ensuite une formulation ALE du modèle de Navier-Stokes surface libre avec conditions de glissement généralisées, combinée avec une algorithmique de point triple (géométrie 2D axisymétrique) y figurent, ainsi que des tests numériques de l'étalement d'une gouttelette impactant un solide.

Dans le chapitre 5, je présente l'ensemble des travaux que j'ai mené autour des écoulements fluviaux avec une attention particulière portée sur les écoulements avec débordements (zones inondées). Les modèles directs sont basés sur les équations de St-Venant 1D et 2D. Une étude précise sur un solveur volumes finis HLLC est y présentée. Les processus d'assimilation variationnelle de données et de calibrage de modèles y sont largement développés. L'assimilation de données lagrangiennes (extraites d'images vidéos par exemple) ainsi

que celle d'une image satellite y sont développées. Des applications à des cas réels y sont présentés et validés. Les aspects couplage y sont abordées, incluant un algorithme original de superposition de modèle basé sur le processus de contrôle optimal précédent (superposition type méthode des joints). Enfin les développements en collaboration et applications à court terme bouclent le chapitre.

Le chapitre 6 présente les perspectives à court et moyen terme, sachant qu'il décrit l'ensemble de mes travaux récemment initiés. Ces travaux portent sur la modélisation numérique directe et inverse d'écoulements en hydrologie (infiltration dans les sols, équations de Richards) et en glaciologie (calottes polaires, équations de Stokes non-linéaires et équations asymptotiques). Les difficultés mathématiques soulevées sont relatives à la réduction de modèles (asymptotique, réduction d'ordre), au couplage, à la sensibilité des modèles aux erreurs et aux paramètres, et enfin à l'assimilation de données et calibrage.

Chapitre 2

Résultats d'existence et unicité de solutions

Mes travaux de thèse portaient sur l'optimisation de forme pour un système couplé fluide - thermique (convection forcée, couplage faible). Le modèle de fluide était trivial (écoulement potentiel), tandis que le modèle de thermique était bien plus complexe car il tenait compte des échanges diffusifs, convectifs mais aussi radiatifs type corps gris (équation intégrale dite de radiativité).

Durant un court séjour post-doctoral au CMAF Lisbonne, j'ai écrit une analyse mathématique d'un modèle d'élasticité adaptative appliqué au comportement mécanique des os du corps humain ("bone remodelling"). J'en décris les principes dans la section 1. De retour en France (recrutement à Grenoble, LMC-IMAG), j'ai étudié un modèle de convection naturelle incluant des transferts radiatifs identiques à ceux étudiés durant ma thèse. L'aspect convection naturelle (et non uniquement forcée) conduisant à des difficultés d'analyse supplémentaires majeures tant au niveau de l'analyse mathématique que de l'analyse numérique. J'en décris les principes en section 2.

Un point commun entre ces deux analyses mathématiques tient au fait que les estimations à priori permettant d'obtenir l'existence de solutions à l'aide d'un théorème de point fixe, sont établies sur des équations tronquées (et éventuellement avec régularisation de la troncature). Ces troncatures sont effectuées aux valeurs extrêmes physiquement admissibles (valeurs naturelles d'un point de vue mécanique). Cette technique de troncature permet d'écrire les analyses mathématiques dans des espaces fonctionnels standards ; et dans le cas du fluide où l'on peut montrer un principe du maximum, on retrouve à posteriori l'existence et unicité de la solution "physiquement admissible" aux équations originelles.

2.1 Un modèle d'élasticité adaptative (ré-adaptation mécanique des os)

Ce paragraphe est tiré de l'article [MoTr98], voir également [MoTr98-b] .

Les os sont des structures dynamiques qui s'adaptent continuellement aux

stimuli extérieurs. Ce processus de ré-adaptation ("remodelling" en anglais), est responsable du fait qu'un os devient plus rigide et plus dense lorsque soumis à des contraintes intenses ; inversement il devient moins rigide et plus poreux en l'absence de contraintes extérieures. Plusieurs théories du "remodelling" existent. Celle proposée par Cowin et Hegedus, [4], [7], présente plusieurs avantages : i) elle est dérivée des principes de conservation de la mécanique des milieux continus ; ii) elle inclut bien d'autres théories existantes et semble pouvoir correctement modéliser bien des situations expérimentales ; iii) elle généralise, en un certain sens, la théorie de l'élasticité non linéaire.

Je m'attache ici à montrer l'existence et l'unicité de la solution du modèle de Cowin et Hegedus, [4], [7].

Quelques notations. Soit $\mathcal{R}$ l'ensemble des déplacements rigides : $\mathcal{R} = \{v/v = a + b \wedge x; a, b \in \mathbb{R}^3\}$. On suppose que la résultante des forces extérieures est nulle. Soit q un réel, $1 \leq q \leq \infty$, et m des entiers positifs, on définit : $V^{m,q} = (W^{m,q}(\Omega)/\mathcal{R})^n$, $V^m = (H^m(\Omega)/\mathcal{R})^n$, $\mathcal{L}^q = (L^q(\Omega))^{n \times n}$, $\mathcal{W}^{m,q} = (W^{m,q}(\Omega))^{n \times n}$, $\mathcal{H}^m = (H^m(\Omega))^{n \times n}$, $\mathcal{C}^m = (C^m(\Omega))^{n \times n}$.

Le modèle. On note le champ de déplacement $u = (u_i)$, $1 \leq i \leq n$, le tenseur des contraintes $\sigma = (\sigma_{ij})$, $1 \leq i, j \leq n$, le tenseur des déplacements linéarisé $\varepsilon = (\varepsilon_{ij})$, $1 \leq i, j \leq n$. Enfin on note e le changement de la fraction volumique par rapport à une fraction volumique de référence. Le modèle de Cowin et Hegedus, [4], [7] est le suivant :

$$(\mathcal{P}^I) \left\{ \begin{array}{ll} \text{Trouver } (u, e) \text{ qui satisfait :} & \\ -\partial_j \sigma_{ij} = \gamma(\xi_0 + e) f_i & \text{in } Q \\ \sigma_{ij} = (\xi_0 + e) a_{ijk m}(e) \varepsilon_{km}(u) & \\ \varepsilon_{ij}(u) = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) & \\ \sigma_{ij} n_j = F_i & \text{on } \Sigma_t \\ u = u_d & \text{on } \Sigma_d \\ \dot{e} = a(e) + A_{km}(e) \varepsilon_{km}(u) & \text{in } Q \\ e(x, 0) = e_0(x) & \text{in } \bar{\Omega} \end{array} \right.$$

Les fonctions $a_{ijk m}(e)$, $a(e)$ and $A_{ij}(e)$ caractérisent les propriétés du matériau (très peu de données expérimentales disponibles). Si on en effectue une approximation polynomiale, cela donne :

$$a_{ijk m}(e) = \frac{1}{\xi_0 + e} (\xi_0 a_{ijk m}^0 + e a_{ijk m}^1) \quad (2.1)$$

$$a(e) = a_0 + a_1 e + a_2 e^2 \quad (2.2)$$

$$A_{ij}(e) = A_{ij}^0 + e A_{ij}^1 \quad (2.3)$$

où $a_{ijk m}^0$, $a_{ijk m}^1$, a_0 , a_1 , a_2 , A_{ij}^0 , A_{ij}^1 sont des constantes.

En vue de montrer l'existence de solutions faibles à ce modèle, tentons de le formuler en terme de point fixe et voyons quelles sont les difficultés rencontrées. Si on cherche les déplacements u dans $C^0([0, T]; V^{m,p})$ avec $m \geq 1$ et p tel que $n < p < \infty$, alors $\varepsilon(u)$ appartient à $C^0([0, T]; \mathcal{W}^{m-1,p})$. Considérons le cas $m = 1$ i.e. $\varepsilon(u) \in C^0([0, T]; \mathcal{L}^p)$. Alors, la solution e de l'EDO de "remodelling"

n'appartient pas nécessairement à $C^0([0, T]; L^1(\Omega))$.

Pour illustrer cela, considérons l'équation : $\dot{e} = g(x)e$; $e(0, x) = 1$ avec $g(x) = x^{\frac{-1}{2p}}$. La fonction g appartient à $L^p(]0, 1[)$ et la solution de l'équation, $e(t, x) = \exp(g(x)t)$, n'appartient pas à $C^0([0, T]; L^1(]0, 1[))$. Ce contre-exemple¹ montre que la régularité L^p d'un paramètre dans une EDO n'est pas préservée, comme elle est pour les espaces C^p .

Considérons à présent le cas $m \geq 2$. Il découle des propriétés d'injection des espaces de Sobolev que les tenseur des déplacements $\varepsilon(u)$ appartient à $C^0([0, T]; C^{m-2})$, alors sous des hypothèses de régularité sur les coefficients élastiques $a_{ijkm}(e)$ et sur ξ_0 , on a $(\xi_0 + e)a_{ijkm}(e) \in C^0([0, T]; C^{m-2}(\bar{\Omega}))$. Finalement, on déduit de résultats classique de régularité en élasticité que u appartient à $C^0([0, T]; V^{m-1,p})$ et non pas à $C^0([0, T]; V^{m,p})$.

De cette analyse préliminaire, il est clair que si l'on veut montrer l'existence de solutions faibles à l'aide d'une méthode de point fixe, on a besoin de régularité supplémentaire. Nous contourons cette difficulté en tronquant (et régularisant) la fraction volumique e aux extrema physiquement admissibles (à savoir e doit appartenir à l'intervalle $]0, 1[$).

Pour cela, on définit les coefficients d'élasticité $c_{ijkm}(e)$, $1 \leq k, m \leq n$, de manière non locale comme suit :

$$c_{ijkm}(e) = (\xi_0 + M_\rho \circ \mathcal{P}_\eta(e)) a_{ijkm}(M_\rho \circ \mathcal{P}_\eta(e)) \quad (2.4)$$

où M_ρ est un opérateur de régularisation et $\mathcal{P}_\eta(e)$ un opérateur de troncation. Nous définissons alors le modèle de type non local, en considérant ces nouveaux coefficients d'élasticité, et en considérant $\mathcal{P}_\eta(e)$ à la place de e dans le second membre des équations d'élasticité.

Cette troncation régulière permet d'imposer que la fraction volumique appartienne à $]0, 1[$, tout en ayant une régularité C^1 pour le couplage du système d'élasticité et de l'EDO de "remodeling". D'un point de vue mécanique, cette régularisation peut être interprétée comme étant une loi constitutive non locale.

Afin d'obtenir l'existence de solution, on établit les estimations à priori suivantes. Pour e et $\dot{e}$, on a :

Proposition 1 *Supposons $\varepsilon(u)$ donné dans $C^0([0, T]; C^0)$. Alors, il existe une unique e in $C^1([0, T]; C^0(\bar{\Omega}))$ solution de l'EDO tronquée. De plus, il existe une constante positive c telle que :*

$$\begin{aligned} \|e\|_{C^1(C^0)} &\leq \{c + c\|\varepsilon(u)\|_{C^0(C^0)}\} \times \{ \|e_0\|_{C^0(\bar{\Omega})} \\ &+ T [\|a(e_0)\|_{C^0(\bar{\Omega})} + \|A(e_0)\|_{C^0(\bar{\Omega})} \|\varepsilon(u)\|_{C^0(C^0)}] \\ &\times \exp[T (k_1 + k_2 \|\varepsilon(u)\|_{C^0(C^0)})] \} \end{aligned} \quad (2.5)$$

¹Contre-exemple dû à L. Sanchez du CMAF Lisbonne

Ce résultat est obtenu à l'aide du théorème de Cauchy-Lipschitz-Picard (existence-unicité) et du lemme de Gronwall (estimation).

Alors, on prouve que les nouveaux coefficients d'élasticité sont bornés dans $C^1(\bar{\Omega})$ uniformément en temps. Ce qui nous permet d'obtenir une estimation sur le champ de déplacement 3D u :

Proposition 2 *Soit $e(t, x)$ donné dans $C^1([0, T]; C^0(\bar{\Omega}))$. Alors, il existe une unique solution $u \in C^1([0, T]; V^{2,p})$ au système d'élasticité quasi-statique tronqué. De plus, il existe une constante positive c indépendante de e telle que :*

$$\|u\|_{C^1(W^{2,p})} \leq c (\gamma \|f\|_{C^1(L^p)} + \|F\|_{C^1(W^{1-\frac{1}{p},p})}) \quad (2.6)$$

Finalement, on obtient :

Théorème 1 *Il existe une unique solution (u, e) in $C^1([0, T]; V^{2,p}) \times C^1([0, T]; C^0(\bar{\Omega}))$ au problème tronqué régularisé.*

La démonstration s'effectue en trois étapes. 1) Existence de solutions à l'aide du théorème de point fixe de Schauder (basé sur les estimations précédentes). 2) Unicité obtenue en adaptant une démonstration d'unicité de Cowin and Natchlinger [5]. 3) Du fait de notre formulation du système, on peut déduire de la régularité supplémentaire de résultats classiques de régularité sur le système de l'élasticité.

2.2 Un modèle de convection libre avec transferts radiatifs corps gris

Ce paragraphe est tiré de l'article [Mo00].

Au cours de ma thèse, j'avais étudié un modèle de thermique prenant en compte les transferts diffusifs, convectifs mais aussi radiatifs type corps gris (équation de radiativité). Dans le prolongement de ce travail, je me suis intéressé à l'analyse mathématique (existence, unicité solutions faibles, estimations) ainsi qu'à l'analyse numérique de schémas éléments finis pour ce modèle de thermique (intégral-différentiel non linéaire) fortement couplé aux équations de Navier-Stokes au travers d'un terme de Boussinesq (modèle complet de convection naturelle). L'analyse mathématique s'appuie là encore sur un théorème de point fixe, des estimations à priori obtenues dans des espaces de Sobolev standards grâce à des troncatures "naturelles" (ie aux valeurs extrêmes du physiquement admissible).

L'analyse numérique éléments finis s'appuie sur l'analyse de Brezzi-Rappaz-Raviart, [2], qui traite de l'approximation des problèmes non-linéaires de la forme $F(\lambda; x) = 0$. On en déduit un ensemble de schémas éléments finis d'approximations cohérentes entre les différentes variables.

De nombreux articles traitent du modèle de convection naturelle mais sans le modèle de transfert radiatif de type corps gris (e.g. [1], [12]). Par ailleurs, le présent modèle thermique radiatif à $\vec{u}$ donné a été étudié dans [11], [3], [13], [14] et [10]. L'analyse du couplage (fort) entre Navier-Stokes et ce modèle radiatif n'avait alors pas encore été abordé.

Le modèle mathématique. On considère le modèle de convection libre (naturelle) dans un domaine borné de $\mathbb{R}^n$ ($n = 2$ ou 3). Après une résolution de l'équation intégrale de radiativité (voir [11] qui présente une expression explicite de la radiativité en fonction de T), et une reformulation des équations, les inconnues du modèle sont la vitesse $\vec{u}$, la pression p , et la température T . Les équations sont :

$$-\Delta \vec{u} + \sqrt{Gr} (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} + \vec{\nabla} p = \sqrt{Gr} \vec{g} T \quad \text{in } \Omega \quad (2.7)$$

$$\text{div}(\vec{u}) = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (2.8)$$

$$-\Delta T + \sqrt{Gr} \vec{u} \cdot \vec{\nabla} T = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (2.9)$$

Comme conditions aux bords, nous avons : $u = 0$ sur $\partial\Omega$, $T = T_d$ sur un bout du bord Γ_d et la condition au bord radiative. Cette dernière est non-linéaire, non monotone, de type non locale : $-\frac{\partial T}{\partial n} = Q(T)$ sur Γ_f , où :

$$Q(T)(x) = Bi (T - T_0)(x) + \varepsilon(x) \delta_1 (I - B)(T^4)(x) \quad x \in \partial\Omega$$

Gr est le nombre de Grashoff, Bi est le nombre de Biot, δ_k des nombres adimensionnels ; $\varepsilon(x)$ est l'émissivité, elle vérifie : $0 < \varepsilon_0 \leq \varepsilon(x) \leq \varepsilon_1 \leq 1$. On montre que le noyau (linéaire) B est contractant dans $L^\infty(\partial\Omega)$, [10], (cela n'est pas vrai dans $L^q(\partial\Omega)$, $1 \leq q < \infty$, à moins que l'émissivité ε soit constante).

Existence et unicité de solutions faibles admissibles. Effectuons à nouveau une petite analyse préliminaire en terme de régularité. Il découle des propriétés d'inclusion des espaces de Sobolev (en 3D) que si $T \in H^1(\Omega)$ alors $T^4 \in L^1(\partial\Omega)$ et $Q(H^1(\Omega)) \subset L^1(\partial\Omega)$. Alors, un espace naturel pour écrire une analyse serait le Banach : $H^1(\Omega) \cap L^5(\partial\Omega)$. Une analyse mathématique à u donné a depuis été écrite dans [14].

Nous suivons ici la même approche que précédemment au sens où nous avons préféré tronquer la température sur la frontière Γ_f et dans le terme source des équations de Navier-Stokes (terme de Boussinesq) aux valeurs physiquement "naturelles", voir [11], [10] :

$$T_{inf} = \min(\inf_{\Gamma_d} T_d, \inf_{\Gamma_f} T_0); T_{sup} = \max(\sup_{\Gamma_d} T_d, \sup_{\Gamma_f} T_0) \quad (2.10)$$

L'opérateur correspondant $\bar{Q}(T)$ devient alors Lipschitzien dans $L^2(\partial\Omega)$ et borné dans $L^\infty(\partial\Omega)$, voir [11].

L'intérêt d'une telle troncature est de pouvoir écrire une analyse dans les espaces de Sobolev standards, ce qui facilite grandement l'analyse sans pour autant diminuer la portée du résultat d'existence-unicité montré.

Brièvement, l'analyse mathématique écrite est la suivante. On considère l'espace des champs de vitesse à divergence nulle, l'inconnue devient $(\vec{u}, T)$. On écrit un principe du maximum faible sur les équations tronquées : la solution vérifie à priori $T_{inf} \leq T \leq T_{sup}$ a.e. dans Ω . On obtient alors des estimations à priori sur T et u :

$$\begin{aligned} \|\theta\|_{1,\Omega} &\leq \mathcal{C}_\Omega^* \{ \sqrt{|\Gamma_f|} \mathcal{T}_\Omega^* [Bi(T_{sup} - T_{inf}) + 2\delta_1 \varepsilon_1 T_{sup}^4] \\ &+ \mathcal{R}_\Omega \|T_d\|_{\frac{1}{2}, \Gamma_d} [1 + \mathcal{S}_\Omega^* \sqrt{Gr} \|u\|_{L^4(\Omega)}] \} \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\|u\|_{1,\Omega} \leq \mathcal{C}_\Omega \sqrt{Gr} |g| \sqrt{|\Omega|} T_{sup} \quad (2.12)$$

On obtient alors l'existence de solutions faibles à l'aide du théorème de point fixe de Leray-Schauder.

On établit ensuite des estimations supplémentaires (toujours dans les espaces de Sobolev standards) et on obtient l'unicité de la solution qui vérifie le principe du maximum. (Ces résultats d'existence et unicité sont bien entendus obtenus pour une viscosité et une diffusion thermique suffisamment importantes...). En résumé on obtient :

Théorème 2 *Pour une viscosité et une diffusion thermique suffisamment importantes, le modèle couplé de convection naturelle avec échanges thermiques radiatifs type corps gris précédent, admet une unique solution (u, p, T, w) in $\mathbf{H}^1(\Omega) \times L_0^2(\Omega) \times H^1(\Omega) \times L^\infty(\partial\Omega)$ qui vérifie :*

$$T_{inf} \leq T \leq T_{sup} \text{ p.p. dans } \bar{\Omega} \quad (2.13)$$

Autrement exprimé, le problème original (non tronqué) admet une unique solution physiquement admissible.

Cette même approche de troncature va nous permettre d'obtenir d'autres estimations et de montrer la convergence des schémas éléments finis qui suivent.

Schémas élément finis : existence, unicité et convergence. Pour des raisons techniques, nous considérons une troncature plus régulière que précédemment ($\mathcal{C}^2$). Pour l'analyse numérique, on considère la formulation primale du système i.e. on ne résout pas l'équation de radiativité et on considère comme inconnue discrète : $\vec{u}_h$, p_h , T_h et w_h . On discrétise les équations à l'aide de méthode éléments finis, les espaces éléments finis de vitesse et pression satisfaisant la condition inf-sup de Babuska-Brezzi.

On montre que le système complet couplé entre dans le cadre des problèmes non-linéaires de la forme $F(\lambda; x) = 0$ avec $F : \Lambda \times X \rightarrow X$, Λ un intervalle de $\mathbb{R}$ et X un Banach ; problèmes dont l'approximation est étudiée dans Brezzi-Rappaz-Raviart [2].

On écrit notre système sous forme de point fixe et nous considérons des solutions non singulières (on montre que le système linéarisé est bien posé si les coefficients de diffusion sont suffisamment grands) Le théorème des fonctions implicites discret établi dans [2] nous permet d'obtenir l'existence-unicité de la solution discrète et sa convergence en h .

A noter que l'on établit des estimations d'erreurs très précises dans le sens où le cas de solutions non-régulières (espace de Sobolev fractionnaires) est considéré. En particulier, une nouvelle estimation d'erreur basée sur les inégalités d'interpolation entre deux espaces de Sobolev, est montrée pour des éléments finis à bulle. Finalement, on a :

Théorème 3 *Supposons montré de la régularité supplémentaire sur la solution $(\vec{u}, p, T, w)$ (de coefficients respectifs s, s, β, γ), et considérons des éléments finis satisfaisant la condition inf-sup de Babuska-Brezzi. Si la viscosité ν , si la conductivité thermique λ et si le coefficient de transfert thermique h sont suffisamment grands alors il existe un $h_0 > 0$ tel que pour tout $h < h_0$, il existe une*

unique solution $(u_h, p_h, T_h, w_h) \in \mathbf{U}_h \times P_h \times L_h \times R_h$ au schéma éléments finis. De plus,

$$\|u - u_h\|_{1,\Omega} + \|p - p_h\|_{0,\Omega} + \|T - T_h\|_{1,\Omega} + \|w - w_h\|_{0,\partial\Omega} \leq c h^\alpha \quad (2.14)$$

où c est une constante indépendante de h , $(u, p, T, w) \in \mathbf{H}^1(\Omega) \times (L^2(\Omega)/\mathbb{R}) \times H^1(\Omega) \times L^\infty(\partial\Omega)$ est l'unique solution faible (admissible) du modèle, et $\alpha = \min(s, \beta, \gamma)$.

Notons que le cadre d'analyse de [2] ne requiert pas de principe du maximum discret. Par ailleurs, ce résultat traite de schémas centrés sans procédure de stabilisation (tel que de la diffusion artificielle par exemple).

Finalement, nous montrons que les combinaisons d'éléments finis ci-dessous satisfont les hypothèses du théorème et conduisent à la vitesse de convergence montrée :

1. L'élément fini "mini" / $\mathbb{P}_1$ Lagrange - $\mathbb{P}_0$ piecewise (ordre 1), voir Fig. 2.1 ;
2. L'élément de Crouzeix-Raviart / $\mathbb{P}_2$ Lagrange - $\mathbb{P}_1$ Lagrange (ordre 1) ;
3. L'élément de Hood-Taylor / $\mathbb{P}_2$ Lagrange - $\mathbb{P}_1$ Lagrange (ordre 2) ;
4. L'élément $(\mathbb{P}_1 \text{ iso } \mathbb{P}_2)\text{-}\mathbb{P}_1$ / $\mathbb{P}_2$ Lagrange - $\mathbb{P}_1$ Lagrange (ordre 2).

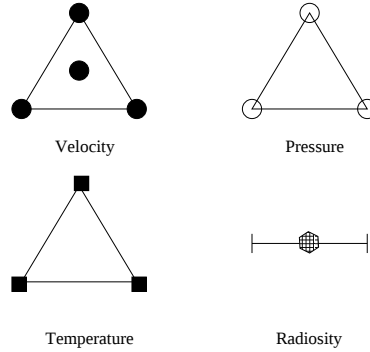


FIG. 2.1 – Element fini "mini" / $\mathbb{P}_1$ Lagrange - $\mathbb{P}_0$ par morceaux.

Références personnelles ou en collaboration

Reuves internationales à comité de lecture

- [Mo00] J. Monnier. "Free convection with radiative thermal transfer of grey bodies. Analysis and approximation by finite element methods". Math. Models and Meth. in Appl. Sc. 9 (10), 1383-1424, 2000.
- [MoTr98] J. Monnier, L. Trabuco. "An existence and uniqueness result in bone remodeling theory". Comp. Meth. Appl. Mech. Engrn. (CMAME)

151 (1998) 539-544.

Congrès internationaux avec actes publiés dans des revues à comité de lecture

[MoTr98-b] J. Monnier, L. Trabuco ” *Existence and uniqueness of solution to an adaptive elasticity model*”. Mathematics and Mechanics of Solids. 3 (2), 217-228, 1998.

Références principales du chapitre

- [1] C. Bernardi, B. Métivet and B. Pernaud-Thomas, *Couplage des équations de Navier-Stokes et de la chaleur : le modèle et son approximation par éléments finis*, *RAIRO, M2AN* **29** 7 (1995) 871-921.
- [2] F. Brezzi, J. Rappaz and P.A. Raviart, *Finite-dimensionnal approximation of non-linear problems. Part I : branches of nonsingular solutions*, *Num. Math.* **36** (1980) 1-25.
- [3] D. Chenaïs, J. Monnier, J.P. Vila. “*Shape optimal design for a fluid-heat coupled system*”. *Appl. Math. and Comp. Sc.* 1996, vol. 6, No2, 245-261.
- [4] S.C. Cowin and D.H. Hegedus. Bone remodeling i : A theory of adaptative elasticity. *J. of Elasticity*, 6(3) :313–326, 1976.
- [5] S.C. Cowin and R.R. Nachlinger. Bone remodeling iii : uniqueness and stability in adaptative elasticity theory. *J. of Elasticity*, 8(3) :285–295, 1978.
- [6] M. Dauge, *Stationnary Stokes and Navier-Stokes systems on two or three dimensionnal domains with corners. Part I : Linearized equations*, *SIAM J. Math. Anal.* **20** 1 (1989) 74-97.
- [7] D.H. Hegedus and S.C. Cowin. Bone remodeling ii : Small strain adaptative elasticity. *J. of Elasticity*, 6(4) :337–352, 1976.
- [8] J.L. Lions and J. Peetre, *Sur une classe d’espaces d’interpolation*, *Publications de l’IHES* **19** (1964) 5-68.
- [9] J. Monnier, *Conception optimale de forme pour un système couplé fluide-thermique. Application à l’aérothermique d’un véhicule*, Thesis, University of Nice-Sophia Antipolis (1995).
- [10] J. Monnier and J.P. Vila, *Convective and radiative thermal transfer with multiple reflections. Analysis and approximation by a finite element method*. *Math. Models Meth. Appl. Sc.* Vol. 11, No 2, pp 229-262, 2001.
- [11] C. Perret C. and P. Witomski, *Équation de la chaleur et réflexions multiples*, *Annales Institut Poincaré*, **8**(6) (1991) 677-689.
- [12] J. Pousin, *Analyse numérique de problèmes de thermo-hydraulique liés à la convection naturelle ou mixte*, Thesis, University of Paris VI (1983).
- [13] T. Tiihonen, *Stefan-Boltzmann radiation on non-convex surfaces*, *Math. Meth. in Appl. Sc.*, **20** (1997) 47-57.
- [14] T. Tiihonen, *A nonlocal problem arising from heat radiation on non-convex surfaces*, *Euro. Jnl of Appl. Math.*, **8** (1997) 403-416.
- [15] A.M. Sanchez and R. Arcangeli, *Estimations des erreurs de meilleure approximation et d’interpolation de Lagrange dans les espaces de Sobolev d’ordre non entier*, *Num. Math.* **45** (1984) 301-321.

Chapitre 3

Autour de l'optimisation de forme pour des écoulements

Dans la continuité de mes travaux de thèse [12], j'ai étendu la dérivation mathématique des équations requises pour l'optimisation de la forme d'un objet plongé dans un écoulement couplé Navier-Stokes - thermique radiative (modèle de thermique du chapitre précédent). La différentiabilité de la solution (du modèle couplé de fluide) par rapport au domaine Ω est démontré. J'en ai également profité pour revisiter les régularités des transformations de domaine requises selon le type de conditions aux limites considérées. Le cadre numérique ainsi que le logiciel associé ont été détaillés. Cette rédaction a ensuite permis l'écriture du logiciel d'optimisation de forme ElectroCap, logiciel dédié au problème d'électromouillage de la section 2.

Ce travail d'écriture des équations d'optimisation de forme a été effectué pour une conférence internationale, [Mo98-b] ; rédaction que j'ai plus détaillé par la suite pour en faire une publication dans une revue internationale, [Mo03].

Ensuite, j'ai repris le problème de thèse de S. Bouchereau [4], thèse encadrée par P. Witomski. En effet quelques questions restaient en suspens, parmi lesquelles la modélisation de la saturation de l'étalement de la goutte électrisée ou encore la valeur la courbure de la gouttelette au voisinage de la ligne triple, [15], [5]. N'ayant pas à disposition de code de calcul permettant de simuler la forme de la gouttelette électrisée (ne serait ce qu'en 2D axisymétrique), nous avons développé avec P. Chow-Wing-Bom, étudiant DEA 2003, le logiciel ElectroCap [MoCh05-c]. ElectroCap est un code de calcul basé sur le cadre mathématique et numérique de la section 1, et sur la modélisation développée durant la thèse de S. Bouchereau. Du point de vue informatique, ce code s'appuie sur la bibliothèque éléments finis C++ Rheolef, [11].

Une fois ce logiciel (2D axisymétrique) abouti, je me suis intéressé au calcul de courbure d'une courbe définie par un ensemble de points eux-mêmes solution de schémas numériques (typiquement le processus d'optimisation de forme décrit précédemment ou encore l'algorithme de calcul de surface libre ALE décrit dans le chapitre suivant). Nous avons mis au point un algorithme simple ¹, qui permet de détecter des variations de courbure locales tout en filtrant suf-

¹Algorithme implémenté et testé par un E. Bretin et I. Cheddadi, étudiants Ensimag, au cours de leur projet calcul scientifique

fisamment les variations dues aux erreurs numériques portées par les points définissant la courbe. Cet algorithme, initialement élaboré pour le calcul de courbure d'écoulement de gouttelettes à surface libre [MoBeCo07] (voir également le logiciel maison Micralef), a été directement appliqué aux gouttelettes obtenues via le présent procédé d'optimisation de forme.

Ces travaux basés sur et prolongeant la thèse de S. Bouchereau ont donné lieu à une conférence internationale avec acte [MoWi05], ainsi qu'à une publication [MoWiBoChSc07]. Ces travaux ont été développés en collaboration avec C. Quilliet et M. Bienia (Lab. LSP Grenoble).

Notons aussi que C. Scheid a commencé sa thèse en 2005 dans la continuité de ces travaux (thèse dirigée par P. Witomski). Ses travaux numériques actuels sont basés sur le logiciel ElectroCap, logiciel à laquelle je l'ai initié ².

En terme d'encadrements.

P. Chow-Wing-Bom, étudiant Ensimag que j'ai encadré durant son stage de DEA (UJF, 2003). Titre : "Modélisation numérique d'une lentille adaptative. Approche par optimisation de forme". Co-encadrement P. Witomski (20%).

A noter que j'ai également encadré le stage de DEA de S. Putot (1999) qui traitait de "contrôle de la température lors d'un procédé de cristallisation de matériaux semi-conducteurs". Le contenu du travail ne s'insérant pas directement dans la présente direction de recherche, je n'en ai pas décrit ici les grandes lignes.

En terme de logiciels. ElectroCap, logiciel développé par P. Chow-Wing-Bom et moi-même.

3.1 Un cadre mathématique pour l'optimisation de forme.

Illustration avec un modèle couplé

Ce paragraphe est tiré de l'article [Mo03], voir également [Mo98-b] .

On considère un écoulement de convection forcée avec transferts radiatifs. Les équations du modèle direct sont celles de Navier-Stokes (faiblement) couplées avec les équations du modèle de thermique du chapitre précédent. Et on s'intéresse au problème d'optimisation de forme pour un tel écoulement. L'optimisation de forme pour des écoulements Navier-Stokes avec transferts thermique convectifs-diffusifs a fréquemment été étudié; l'optimisation de forme pour le présent modèle de thermique radiative corps gris (ie avec termes intégral-différentiels liés à la forme du domaine) a été étudié au cours de ma thèse. Je présente ici l'extension de ces travaux lorsque le modèle de fluide est celui de Navier-Stokes et j'en profite pour revisiter précisément les régularités de domaine requises selon le type de conditions aux bords considérées. Aussi, j'ai ré-écrit de manière synthétique et rigoureuse, dans un contexte éléments finis, la discrétisation des espaces de déformations de domaine ainsi que le processus global d'optimisation

²Claire y a d'ailleurs détecté l'oubli d'une constante dans la fonction coût, oubli qui confirme le dicton qu'"une constante manquante dans un problème de point-selle ne conduit pas le montagnard au bon col..." Qu'elle en soit remerciée au travers de la publication [MoWiBoChSc07]

qui en découle.

La démarche est illustrée au travers de ce modèle de fluide couplé : la différentiabilité de la solution par rapport au domaine γ est démontrée, les équations adjointes et la différentielle (continue) de la fonction coût qui en découle γ sont présentées.

3.1.1 Le modèle couplé de fluide et optimisation de forme

Le modèle couplé Navier-Stokes - thermique radiative.

Soit ω un ouvert borné de $\mathbb{R}^d$ ($d=2$ or 3), le modèle adimensionnel est le suivant.

[1] Trouver $(\vec{u}, p)$ tel que :

$$-\frac{1}{Re} \Delta \vec{u} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} + \nabla p = 0 \text{ et } \operatorname{div}(\vec{u}) = 0 \text{ dans } \omega \quad (3.1)$$

$$\vec{u} = 0 \text{ ou } g \text{ on the boundary} \quad (3.2)$$

La fonction $\vec{g} \in (H^1(\omega))^d$, elle vérifie $\operatorname{div}(\vec{g}) = 0$ et s'annule dans $\omega \setminus \mathcal{V}_1$, où $\mathcal{V}_1$ est un voisinage suffisamment petit de la partie Dirichlet.

[2] Etant donné le champ de vitesse $\vec{u}$, trouver $(\tilde{T}, w)$ solution des équations thermique du chapitre précédent (ie le système fortement couplé équation convection -diffusion / équation de radiativité).

Notons que pour avoir le problème de thermique bien posé, la température doit être donnée (Dirichlet) sur les parties du bord entrantes (ie. où $\vec{u} \cdot \vec{n} < 0$).

Le problème d'optimisation de forme

On considère le problème général d'optimisation de forme suivant. Soit $J_\omega(y)$ une fonction d'observation, on définit la fonction coût par :

$$j(\omega) = J_\omega(y^\omega) \quad (3.3)$$

où $y^\omega = (u^\omega, p^\omega, T^\omega, w^\omega)$ est la solution du modèle direct précédent, posé dans ω . Le problème de minimisation est :

$$\left| \begin{array}{l} \text{Trouver } \omega^* \text{ tel que :} \\ j(\omega^*) = \min_{\omega} j(\omega) \end{array} \right. \quad (3.4)$$

Pour un problème d'écoulement donné, il reste à préciser $J_\omega(y)$ qui doit dépendre régulièrement de la solution $y = (u, p, T, w)$ ou d'une partie de ses composantes.

On note : $V_0^u(\omega) = (H_0^1(\omega))^d$, $V_0^T(\omega) = \{t \in H^1(\omega); t|_{\gamma_d} = 0\}$ et $V_0(\omega) = V_0^u(\omega) \times L_0^2(\omega) \times V_0^T(\omega) \times L^2(\partial\omega)$, avec $L_0^2(\omega) = \{q \in L^2(\omega); \int_{\omega} q \, dx = 0\}$; alors l'équation d'état sous forme faible est :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } y^\omega = (u^\omega, p^\omega, T^\omega, w^\omega) \in V_0(\omega) \text{ tel que :} \\ \forall z = (v, q, t, r) \in V_0(\omega), E_\omega(y^\omega, z) = 0 \end{array} \right. \quad (3.5)$$

où $E_\omega(y, z)$ est la somme des formes faibles des deux équations de Navier-Stokes, de l'équation de convection-diffusion et de l'équation intégrale (radiosité).

Pour montrer la différentiabilité de la solution y^ω par rapport à ω , on utilise tout simplement le théorème des fonctions implicites. Et pour cela on montre que l'équation d'état linéarisée (opérateur $\frac{\partial E_\omega}{\partial y}(y^\omega, z) \cdot \eta^\omega$) est coercif, et donc bien posé, lorsque la viscosité et la conductivité thermique sont suffisamment importants.

3.1.2 Cadre mathématique et numérique pour l'optimisation de forme

On développe une approche classique de transformations de domaine (méthode de transport avec des transformations régulières $\mathcal{C}^1$), voir [13, 6, 7, 12, 1]. On va minimiser la fonction coût par rapport aux paramètres de forme. On est alors conduit à définir la notion de dérivée par rapport à la forme d'un domaine. On considère une famille de domaines lipschitziens (les coins sont admis, et les propriétés des espaces de Sobolev restent valables). L'espace des domaines admissibles est défini comme étant les domaines homéomorphes à un domaine de référence. Etant donné Ω un ouvert lipschitzien de $\mathbb{R}^d$, on adopte les notations de la figure 3.1. Γ désigne la frontière mobile ie l'inconnue du problème, B_{int} est un voisinage de Γ suffisamment grand et $B_{int} \supset \supset \Gamma$.

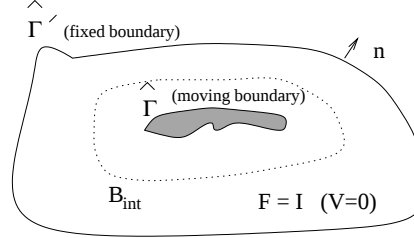


FIG. 3.1 – Notations et exemple type de domaine de référence Ω

On définit l'espace de transformations :

$$\mathcal{F} = \{F, F \text{ bijection of } \Omega \text{ onto } F(\Omega); F \in \mathcal{C}^1(\bar{\Omega}, \mathbb{R}^d), F^{-1} \in \mathcal{C}^1(\bar{F}(\Omega), \mathbb{R}^d)\} \quad (3.6)$$

et le sous-espace affine correspondant : $\mathcal{F}_0 = \{F \in \mathcal{F}; F = I \text{ in } \Omega \setminus B_{int}\}$.

L'espace des domaines admissibles est défini ainsi :

$$\mathcal{D} = \{\omega = F_0(\Omega); F_0 \in \mathcal{F}_0\} \quad (3.7)$$

La partie du bord Γ' est fixée et on ne travaille que sur la partie variable Γ .

On définit ensuite la notion de dérivée par rapport au domaine comme étant la dérivée de la fonction transportée par rapport à la transformation. Pour cela, on définit le champ de perturbation du domaine : $V = F - I$. On a

$V \in \mathcal{C}^1(\bar{\Omega}, \mathbb{R}^d)$ et $V = 0$ dans $\Omega \setminus B_{int}$.

Pour une fonction coût j , $j : \omega \in \mathcal{D} \mapsto j(\omega) \in \mathbb{R}$, on définit le fonction coût transportée $\bar{j}$ par : $\bar{j} : \mathcal{F}_0 \rightarrow \mathbb{R} : F \mapsto \bar{j}(F) = j(F(\Omega)) = j(\omega)$.

Sa dérivée par rapport au domaine est alors définie ainsi :

$$\frac{dj}{d\omega}(\Omega) \cdot V = \frac{d\bar{j}}{dF}(I) \cdot V, \quad \forall V \in \mathcal{C}^1(\bar{\Omega}, \mathbb{R}^d) \quad (3.8)$$

Régularité des transformations de domaine requise. On considère des domaines avec coins (lipschitziens). Si le problème direct (d'ordre deux) est un problème aux bords de type Dirichlet, si la fonction d'observation est volumique uniquement (sans terme de bord), alors des transformations $\mathcal{F}$ de régularité lipschitzienne seulement, est suffisant, voir [13, 12, 1, 8]. Autrement dit, nous n'avons pas besoin de la régularité $\mathcal{C}^1$, Lipschitz suffit.

Par contre, si les conditions aux bords sont du type Neumann ou mixtes, et/ou la fonction d'observation fait intervenir un terme de bord, alors nous devons considérer des transformations de régularité $\mathcal{C}^1$ (car le terme $\partial_i V_j$, $1 \leq i, j \leq d$, devra être bien défini sur le bord).

Transport des équations et différentiabilité de la solution

En vue d'étudier la différentiabilité de la solution du modèle direct par rapport au domaine et de calculer la différentielle de la fonction coût, on a besoin de transporter l'intégralité des équations sur le domaine de référence $\Omega = F^{-1}(\omega)$. Pour cela on pose : $\bar{j}(F) = \bar{J}(F; \bar{y}^F)(= j(\omega))$ où $\bar{y}^F = y^\omega \circ F$, et y^ω est la solution de l'équation d'état transportée (changement de variables dans les formes faibles) :

$$\begin{cases} \text{Trouver } \bar{y}^F = (\bar{u}^F, \bar{p}^F, \bar{T}^F, \bar{w}^F) \in V_0(\Omega) \text{ tel que :} \\ \forall \bar{z} = (\bar{v}, \bar{q}, \bar{t}, \bar{r}) \in V_0(\Omega), \quad \bar{E}(F; \bar{y}^F, \bar{z}) = 0 \end{cases} \quad (3.9)$$

Le problème d'optimisation devient :

$$\left| \begin{array}{l} \text{Trouver } F^* \in \mathcal{F}_0 \text{ tel que :} \\ \bar{j}(F^*) = \min_{F \in \mathcal{F}_0} \bar{j}(F) \end{array} \right.$$

Le problème originel d'optimisation de forme devient alors un problème de contrôle optimal standard, voir [10]; nous pouvons le résoudre avec les outils différentiels classiques et la méthode des équations adjointes classique.

Transport des espaces fonctionnels. Lors du transport des équations, nous voulons que les espaces fonctionnels soient préservés. Ce qui est le cas pour les espaces de Sobolev concernés. Par contre, l'espace de vitesses à divergence nulle n'a lui aucune raison d'être préservé ($\text{div}(u) = 0$ n'implique pas $\text{div}(u \circ F) = 0$). Pour contourner ce problème, on introduit comme dans [1], l'espace des pressions : $L^2_{\#}(F) = \{q \in L^2(F(\Omega)); \int_{F(\Omega)} \frac{q}{|\det DF|} dx = 0\}$.

Différentiabilité de la solution. On a vu que l'on pouvait obtenir la différentiabilité de la solution du modèle direct par rapport au domaine (avec les définitions précédentes) à l'aide du théorème des fonctions implicites. On a plus précisément :

Lemme 1 *Supposons la viscosité ν et la conductivité thermique λ suffisamment grandes. Soit $\bar{y}^F \in V_0(\Omega)$ l'unique solution (physiquement admissible) de (3.9). Il existe un voisinage $\mathcal{V}_I$ dans $\mathcal{F}_0$ de l'identité telle que l'application $F \in \mathcal{V}_I \subset \mathcal{F}_0 \mapsto \bar{y}^F \in V_0(\Omega)$ est de classe C^1 .*

Conditions de Dirichlet non homogènes. Concernant les conditions aux bords de type Dirichlet non homogène, nous avons supposé qu'elles étaient posées sur la partie fixe du bord Γ' , et nous avons supposé que les données de Dirichlet g et T_d s'annulaient dans B_{int} (autrement dit, le voisinage $\mathcal{V}_1$ est inclus strictement dans $\Omega \setminus B_{int}$). Nous avons alors $g \circ F = g$ et $T_d \circ F = T_d$ pour $F \in \mathcal{F}_0$, F suffisamment petit, et nous avons pu montrer la différentiabilité de la solution par rapport au domaine i.e. l'application

$$F \in \mathcal{F}_0 \mapsto \bar{y}^F = (\bar{y}^F + (g, 0, T_d, 0)) \in V(\Omega)$$

avec $V(\Omega) = (H^1(\Omega))^d \times L^2_{\#}(I) \times H^1(\Omega) \times L^2(\partial\Omega)$, est C^1 dans un voisinage $\mathcal{V}_I$ de l'identité I .

Si nous ne supposons pas que les conditions de Dirichlet sont posées seulement sur la partie fixe du bord et si $F \in \mathcal{F}$, alors à priori $g \circ F \neq g$ et $T_d \circ F \neq T_d$. Et pour une fonction $g \in H^{m+1}(\mathbb{R}^d)$, $m = 0$ or 1 , l'application $F \mapsto g \circ F$ est C^1 de $\mathcal{F}$ dans $H^m(\mathbb{R}^d)$... (voir par ex. [13], Lemma IV.4.4).

Modèle adjoint et différentielle ("gradient continu")

Suite aux définitions et propriétés précédentes, nous nous sommes ramenés à un problème de contrôle optimal classique au sens où la variable de minimisation vit dans des espaces fonctionnels standards. On peut alors employer la méthode des équations adjointes, [10], et nous obtenons ainsi une "bonne" expression de la différentielle de la fonction coût. Plus précisément on montre :

Théorème 4 *Si la viscosité ν et la conductivité thermique λ sont suffisamment grandes, alors il existe un voisinage $\mathcal{V}_I$ dans $\mathcal{F}_0$ de l'identité tel que la fonction coût $j : \omega \in \mathcal{D} \mapsto j(\omega) \in \mathbb{R}$ est de classe C^1 pour tout $\omega = F(\Omega)$, $F \in \mathcal{V}_I \subset \mathcal{F}_0$.*

De plus, pour tout $V \in C^1(\bar{\Omega}, \mathbb{R}^d)$, on a :

$$\frac{dj}{d\omega}(\Omega).V = \frac{\partial J_{\Omega}}{\partial \omega}(y^{\Omega}).V - \frac{\partial E_{\Omega}}{\partial \omega}(y^{\Omega}, \pi^{\Omega}).V \quad (3.10)$$

où y^{Ω} est la solution de l'équation d'état (3.5) posée dans Ω et π^{Ω} est l'unique solution de l'équation d'état adjoint :

$$\begin{cases} \text{Trouver } \pi^{\Omega} = (\vartheta^{\Omega}, \rho^{\Omega}, \theta^{\Omega}, \kappa^{\Omega}) \in V_0(\Omega) \text{ tel que :} \\ \forall z = (v, q, t, r) \in V_0(\Omega), \\ \frac{\partial E_{\Omega}}{\partial y}(y^{\Omega}, \pi^{\Omega}).z = \frac{\partial J_{\Omega}}{\partial y}(y^{\Omega}).z \end{cases} \quad (3.11)$$

Bien entendu, tous les termes de la différentielle de la fonction coût (3.12) et de l'équation adjointe (3.11) peuvent être détaillés.

A noter que dans cas du modèle de notre fluide couplé, le système adjoint est constitué d'EDP (linéaires par construction) couplé à l'équation intégrale adjointe. Et les systèmes fluide-thermique adjoints sont résolus dans le sens inverse de celui du modèle direct : modèle thermique adjoint en premier (avec équation intégrale adjointe fortement couplée) puis le modèle fluide adjoint.

3.1.3 Calcul de sensibilité de forme et processus global d'optimisation

A partir de l'expression de la différentielle de la fonction coût (qui nécessite une résolution du modèle direct et une résolution du modèle adjoint), on discrétise les équations d'état et d'état adjoint (via une méthode numérique adaptée, e.g. éléments finis), on discrétise la forme du domaine et l'espace des déformations V pour finalement obtenir le gradient de la fonction coût³. Ce gradient fournit une information quantitative relative à la sensibilité de la réponse du modèle (la fonction coût) par rapport aux paramètres de forme considérés. Ce gradient peut également être employé dans l'optique d'un processus complet d'optimisation de la forme, processus bien évidemment bien plus lourd en terme de coût de calcul (typiquement de l'ordre de 50-100 fois).

Je propose dans ce qui suit une rédaction synthétique de la partie discrétisation du domaine et de l'espace des transformations, et ceci dans la continuité du cadre mathématique défini précédemment.

On suppose avoir écrit un schéma numérique (par exemple éléments finis) du modèle direct et adjoint, ce qui nous donne ici les solutions discrètes (u_h, p_h, T_h, w_h) et $(\vartheta_h, \rho_h, \theta_h, \kappa_h)$; où h est une taille caractéristique de la maille. Il nous reste alors à définir précisément les paramètres de forme, la gradient de forme et les variables d'optimisation, pour enfin pouvoir mettre en place le processus global d'optimisation qui se schématise comme indiqué sur la figure 3.2. L'algorithme de minimisation (locale) étant ici utilisée comme un boîte noire. L'algorithme de type BFGS figurant parmi les algorithmes les plus efficaces du premier ordre quasi-Newton.

Discrétisation de la frontière mobile : paramètres de forme. Dans le cas de la description de la frontière mobile (l'inconnue du problème) par une fonction paramétrée : $s_\Omega(t) = \sum_{i=0}^{N-1} P_i s_i(t)$, $t \in [0, 1]$, ce bout du bord est défini par les N points de contrôle $P_i, i = 0..N-1$; par conséquent définir une nouvelle forme reviendra à définir un nouvel ensemble de points de contrôle.

L'espace des déformations. Pour discrétiser le champ de déformation de domaines V , $V \in C^1(\bar{\Omega}, \mathbb{R}^2)$, on approche $C^1(\bar{\Omega}, \mathbb{R}^2)$ par S_H , espace vectoriel engendré par des vecteurs de déformations de base $\{\hat{V}_i\}_{i=0..N-1}$. Chaque vecteur de base $\hat{V}_i$, $i = 0..N-1$, est défini sur le point de contrôle P_i correspondant (et mis à 0 sur les autres points de contrôle) puis dans un cas général, est étendu à l'ensemble du domaine en résolvant une EDP "régularisante". Dans de nombreux cas, il est plus judicieux de considérer le système de l'élasticité linéaire (ce qui conduit à une déformation robuste du maillage) plutôt que de considérer la classique équation de Laplace.

Une fois l'ensemble des vecteurs de déformations de base calculés, on définit le champ de déformation $V_H \approx V$ par : $V_H = \sum_{i=0}^{N-1} \eta_i \hat{V}_i$.

³En suivant cet ordre des choses (différenciation - discrétisation - implémentation), on obtient ce que l'on appelle le gradient continu discrétisé

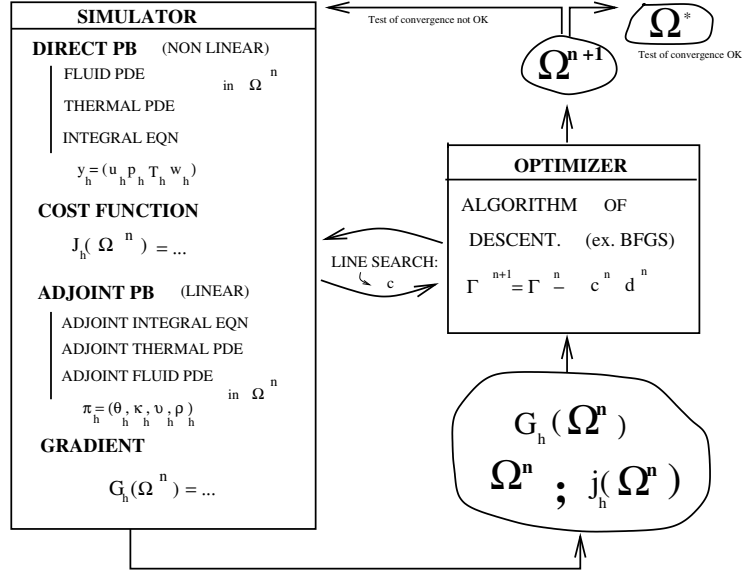


FIG. 3.2 – Processus global d'optimisation de forme

Comme mentionné précédemment, en considérant un suivi de maillage de type déformation élastique, on peut espérer au cours du processus itératif d'optimisation un nombre de remaillage relativement faible (remaillage dû à l'obtention d'une mauvaise qualité de mailles). Bien sûr, lorsque un remaillage s'avère nécessaire, les fonctions de base doivent être recalculées.

A noter que nous avons distingué h de H pour les discrétisations des équations différentielles des modèles et de l'espace des déformations respectivement. On a ici : $H = \frac{1}{N-1}$, N nombre de paramètres de forme. En effet, nous ne pouvons considérer $H = h$ car il est fréquemment observé que si H est trop proche de h , alors le processus d'optimisation conduit à de fortes oscillations des forme. Pour éviter un tel phénomène d'instabilité de forme, on considère typiquement $H \approx 3 - 4h$ sur la frontière mobile.

Le gradient de forme et variable d'optimisation. On pose :

$$\frac{\partial j}{\partial \omega}(\Omega) \cdot V \approx \frac{\partial j}{\partial \omega}(\Omega) \cdot V_H = \sum_{i=0}^{N-1} \eta_i \frac{\partial j}{\partial \omega}(\Omega) \cdot \hat{V}_i$$

Les composantes du vecteur gradient de forme $G^H = (G_i^H)_{i=0 \dots N-1}$ sont donc : $G_i^H = \frac{\partial j}{\partial \omega}(\Omega) \cdot \hat{V}_i$, terme dont l'expression a été présenté dans le théorème précédent.

Les variables d'optimisation sont alors les N coefficients η_i , $i = 0 \dots N-1$; et

lors du procédé itératif d’optimisation, une nouvelle forme est définie par :

$$\Omega^{n+1} = (I + \sum_{i=0}^{N-1} \eta_i \hat{V}_i)(\Omega^n)$$

3.2 Usage de l’optimisation de forme pour un calcul de surface libre : électro-mouillage

Ce paragraphe est tiré de [MoWiBoChSc07], voir également [MoWi05-b] et [MoCh05-c]. Collaboration avec C. Quillet et M. Bienia (LSP, Grenoble).

L’électro-mouillage désigne l’application d’un champ électrique entre une surface solide (conductrice) et un liquide conducteur étalé sur ce solide (liquide mouillant la surface solide). Un tel procédé permet de manipuler des liquides de volume très petit ($\approx$ picolitre, domaine de la microfluidique où les effets gravitaires sont négligeables tandis que les effets de capillarité et de surface sont dominants). L’électro-mouillage semble très prometteur pour la manipulation de liquides dans de nouveaux domaines applicatifs tels que les bio-technologies par exemple. On s’intéresse ici à la modélisation numérique d’une expérience simple qui consiste à modifier le mouillage (l’étalement) d’une gouttelette d’eau (2D axisymétrique) sur une surface parfaitement lisse (un fil polymère), en jouant sur l’intensité du potentiel électrique appliqué. De telles expérimentations ont été menées par B. Berge et C. Quillet notamment, au sein du Laboratoire de Spectrométrie Physique -LSP-, Grenoble, [2], [3].

Lorsque le potentiel électrique appliqué est faible, une loi simple (équation de Lippman) permet de prédire la valeur de l’angle de mouillage et donc dans notre cas la forme de la gouttelette étalée. Passée une certaine valeur seuil, on observe un phénomène de saturation, [15]. Plusieurs explications plausibles ont été avancées pour expliquer ce phénomène limitant de blocage, cependant la compréhension de ce phénomène demeure un problème ouvert.

S. Bouchereau a développé durant sa thèse (encadrée par P. Witomski), [4], un modèle numérique de cette expérience. Le principe de base étant de modéliser cet écoulement surface libre statique sous la forme d’un problème d’optimisation de forme. En effet, à l’équilibre la gouttelette électrisée minimise son énergie totale (somme des énergies de tension de surface et de l’électro-statique). L’inconnue étant alors la forme de la gouttelette (sa surface libre). A partir de ce travail, une investigation plus approfondie des forces et phénomènes mis en jeu au voisinage de l’angle de contact semblait intéressante. J’ai alors repris la même approche de modélisation que S. Bouchereau, mais ne disposant pas de code pour effectuer des calculs fins au voisinage de la ligne triple (point de contact en 2D), j’ai d’abord ré-écrit l’ensemble des équations dans le formalisme d’optimisation de forme du paragraphe précédent (incluant la différentiabilité de la solution par rapport au domaine), puis ré-écrit un code de calcul propre et modulaire avec un étudiant de DEA - Ensimag, code permettant d’effectuer des simulations numériques comparables aux expérimentations et enfin mis au point un algorithme de calcul de courbure, et tout particulièrement au voisinage du point triple. Les résultats obtenus sont présentés par la suite ainsi que les

perspectives à venir (perspectives développées dans le cadre de la thèse de C. Scheid, thèse encadrée par P. Witomski).

3.2.1 Le processus d'électro-mouillage et sa modélisation

Nous considérons le procédé expérimental représenté sur la figure 3.3.

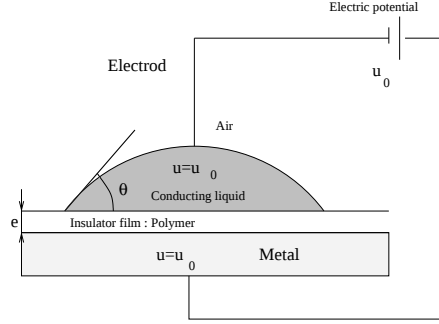


FIG. 3.3 – Procédé d'électro-mouillage considéré

On note : σ_{LS} , σ_{SG} and σ_{LG} les coefficients de tension de surface des interfaces liquide-solide, solide-gaz et liquide-gaz respectivement ; θ l'angle de mouillage (θ_0 sa valeur à $u_0 = 0$). En supposant que le système se comporte comme un condensateur plan, on obtient l'équation de Lippman :

$$\cos(\theta) = \cos(\theta_0) + \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_1}{2\sigma_{LG} e} u_0^2$$

Cette équation prédit un étalement total lorsque u augmente, contrairement à ce que les expérimentations montrent (phénomène de blocage), [2], [15].

Comme dans [4], on modélise cet écoulement surface libre stationnaire (état d'équilibre recherché) par une formulation inverse de forme. L'énergie totale $\mathcal{E}$ est la somme de l'énergie capillaire (énergie de surface) et de l'énergie électrostatique (on suppose l'énergie gravitationnelle négligeable). L'énergie électrostatique dépend du potentiel électrique extérieur $u(x)$, solution d'une équation type Poisson avec conditions à l'infini et conditions de transmissions (interface solide-gaz). Le problème inverse de forme s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } \omega_0^* \text{ tel quet :} \\ \mathcal{E}_{\omega_0^*} = \min_{(\omega_0; \int_{\omega_0} dx = vol)} \mathcal{E}_{\omega_0} \end{array} \right.$$

où vol est le volume de la goutte donné. On note $u_i = u|_{\omega_i}$, $i = 1, 2$. Alors le potentiel électrique u_i est solution de : $-div(\varepsilon_i \nabla u_i) = 0$ dans ω_i , $i = 1, 2$, avec conditions aux bords mixtes Dirichlet - transmission et conditions à l'infini.

Du fait de la contrainte de volume, on écrit un lagrangien (augmenté) ce qui conduit à un problème de point-selle.

Notons que les calculs qui suivent sont effectués en 2D axisymétrique mais les formulations établies restent tout à fait valables en 3D. Dans ce dernier cas, bien sûr l'implémentation serait plus complexe et les temps de calcul plus importants.

Gradient de forme

On suit le cadre mathématique présenté dans le paragraphe précédent : on montre la différentiabilité de la solution par rapport au domaine, on introduit l'état adjoint (qui est nul !) et on obtient l'expression de la différentielle du coût :

Théorème 5 *Il existe un voisinage $\mathcal{V}_I$ de l'identité dans $\mathcal{F}_0$ tel que :*

i) la fonction coût $j : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$; $\omega \mapsto j(\omega) = \mathcal{E}_{\omega_0}(u^\omega)$ appartient à $\mathcal{C}^1$ for all $\omega = F(\Omega)$, $F \in \mathcal{V}_I$. Et pour tout $V \in \mathcal{C}^1(\bar{\Omega}, \mathbb{R}^2)$, on a :

$$\frac{dj}{d\omega}(\Omega).V = \frac{\partial \mathcal{E}_{\Omega_0}}{\partial \omega}(u^\Omega).V \quad (3.12)$$

où u^Ω est solution de l'équation d'état posée dans Ω et

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{E}_{\Omega_0}}{\partial \omega}(u^\Omega).V &= \alpha \int_{\Omega} z \circ V \, dx + \alpha \int_{\Omega} z \operatorname{div}(V) \, dx \\ &+ \int_{\Gamma_{LG}} r \circ V \, ds + \int_{\Gamma_{LG}} r \operatorname{div}_{\Gamma} V \, ds \\ &+ \mu \int_{\Gamma_{LS}} r \circ V \, dr + \mu \int_{\Gamma_{LS}} r \operatorname{div}_{\Gamma} V \, dr \\ &- \delta \int_{\Omega} \varepsilon (r \circ V) |\nabla u^\Omega|^2 \, dx - \delta \int_{\Omega} \varepsilon r |\nabla u^\Omega|^2 \operatorname{div}(V) \, dx \\ &+ \delta \int_{\Omega} \varepsilon r \langle {}^T DV + DV, \nabla u^\Omega, \nabla u^\Omega \rangle \, dx \end{aligned}$$

avec : $\operatorname{div}_{\Gamma} V = (\operatorname{div}(V) - \langle n, {}^T DV n \rangle)$ et $x = (r, z)$.

ii) la contrainte de volume $c(\omega)$ appartient à $\mathcal{C}^1$ pour tout $\omega = F(\Omega)$, $F \in \mathcal{V}_I$. Et pour tout $V \in \mathcal{C}^1(\bar{\Omega}, \mathbb{R}^2)$,

$$\frac{dc}{d\omega}(\Omega).V = - \int_{\Omega} r \circ V \, dx - \int_{\Omega} r \operatorname{div}(V) \, dx \quad (3.13)$$

Comme dans le paragraphe précédent, la démonstration s'effectue en trois étapes : 1. transport des équations ; 2. différentiabilité par rapport à ω ; 3. introduction des équations adjointes et obtention de l'expression de la différentielle.

Discretisation

On discrétise l'équation d'état (potentiel électrique) avec une méthode éléments finis $\mathcal{P}_1$ -Lagrange, on définit les paramètres de forme et le gradient de forme exactement selon la méthode décrite dans le paragraphe précédent.

3.2.2 ElectroCap et calcul de formes de gouttelettes

On montre sur la figure 3.4 quelques formes de gouttes obtenues avec le logiciel de calcul ElectroCap.

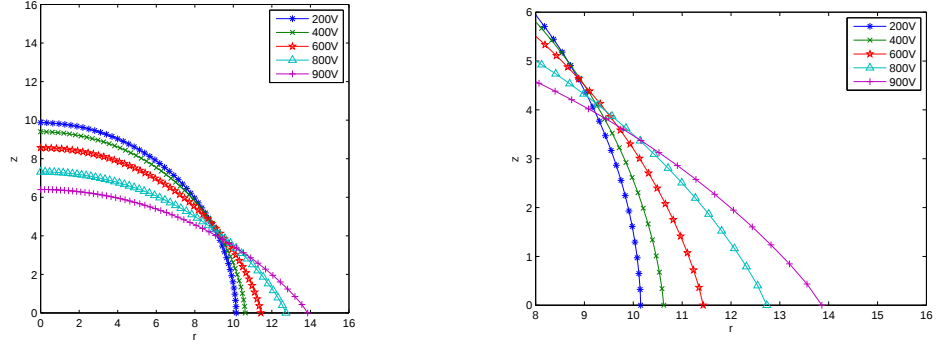


FIG. 3.4 – Surfaces de gouttes pour différentes valeurs de u_0 . A droite : zoom près du point triple.

Rappelons que les résultats expérimentaux sont bien retrouvés avec l'équation de Lippman jusqu'à une certaine valeur critique u_{cr} du potentiel (dans le cas présent, $u_{cr} \approx 700\text{V}$). Pour $u_0 > u_{cr}$, les résultats expérimentaux montrent une saturation de l'angle de mouillage (phénomène de blocage), [15]. Tandis que pour $u_0 \approx 1050\text{ V}$, l'équation de Lippman prévoit un étalement total de la gouttelette sur le substrat (l'angle de mouillage tend vers zéro). Avec le modèle numérique implémenté dans ElectroCap, on obtient des résultats concordants avec l'équation de Lippman pour $0 - 500\text{ V}$. Pour des valeurs de u_0 supérieures, on n'obtient pas le phénomène de blocage à proprement parler, on obtient par contre un angle de contact supérieur à celle prédite par l'équation de Lippman.

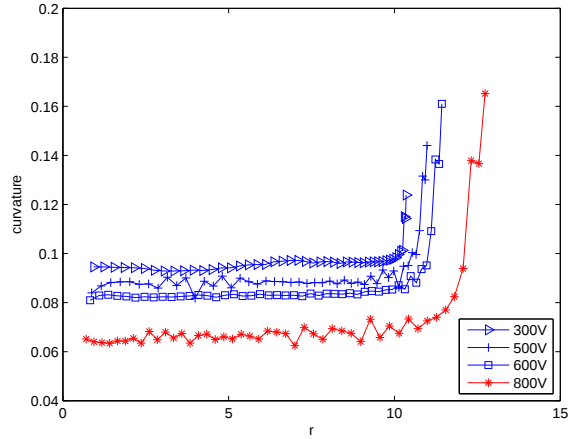


FIG. 3.5 – Courbure pour plusieurs valeurs de u_0 .

Calcul de courbures. J'ai implémenté dans ElectroCap une algorithmique de calcul de courbure mise au point pour les écoulements surface libre présentés dans le chapitre suivant. Pour l'intégralité des calculs numériques effectués, on trouve des gouttelettes de courbure constante, excepté près du point triple, zone dans laquelle la courbure augmente fortement. De plus, la courbure près du point triple augmente avec u_0 . Ces résultats de variation de courbure concordent avec les résultats expérimentaux présentés dans [3] et [5]. La figure 3.5 présente la courbure pour plusieurs valeurs de u_0 .

3.2.3 Prolongements en cours

Avec la modélisation numérique présentée précédemment, nous retrouvons les variations de courbure locales près du point triple; par contre, nous ne simulons pas pleinement le phénomène de bocage, et nous ne retrouvons pas le fait que l'angle de mouillage soit (à une certaine échelle...) constant et égale à l'angle de Young (ie. celui sans potentiel électrique).

Claire Scheid, au cours de sa thèse (05-08, encadrement : P. Witomski), a repris ce travail ainsi que le logiciel ElectroCap. Elle y a rajouté la fonction de base singulière dans la maille du coin (la singularité y est explicitement connue en fonction de la valeur de l'angle rentrant car il s'agit de la solution de l'équation de Laplace). Cette première approche supplémentaire n'a semble-t-il pas donné les résultats escomptés. A partir de [5], Claire définit à présent une équation complémentaire au voisinage du point triple (équation différentielle ordinaire), équation restant à coupler au présent modèle macroscopique.

Références personnelles ou en collaboration

Revue internationale à comité de lecture

- [MoWiBoChSc07] J. Monnier, P. Witomski, S. Bouchereau, P. Chow-Wing-Bom, C. Scheid " *Numerical modelling of electrowetting by a shape inverse approach*". SIAM Appl. Math. Accepted, to appear.
- [Mo03] J. Monnier. " *Shape sensitivities in a Navier-Stokes flow with gray bodies thermal transfer*". Optim. Control Appl. Meth. 24 (5), 237-256, 2003.

Congrès internationaux avec actes avec comité de lecture

- [MoWi05-b] J. Monnier, P. Witomski " *A shape inverse approach modelling electro-wetting*". 6th WCSMO, Brazil, 2005.
- [Mo98-b] J. Monnier " *Shape optimal design problem in fluid mechanics with thermal transfer*". Invited talk. ECCOMAS'98. Greece. Eds : Papailiou-Tsahalis-Periaux-Knorzer, John Wiley-Sons. vol. 2, 142-147, 1998.

Logiciel

- [MoCh05-c] J. Monnier, P. Chow-Wing-Bom " *ElectroCap : A shape inverse model for an electro-capillary process*". Research Report INRIA RR-5617, 2005.

Références principales du chapitre

- [1] Bello JA, Fernandez-Cara E, Lemoine J, Simon J., The differentiability of the drag with respect to the variations of a lipschitz domain in a Navier-Stokes flow, *SIAM J. Control Optim.*, **35**, 2, 626–640, 1997.
- [2] B. Berge *Electrocapillarité et mouillage de films isolants par l'eau*, CRAS 317 Série II, (1993) 157.
- [3] M.Bienia, M.Vallade, C.Quilliet and F.Mugele, *Electrical-field-induced curvature increase on a drop of conducting liquid*, EuroPhys. Lett. **74**, pp 103, (2006).
- [4] B. Bouchereau *Modélisation et simulation numérique de l'electro-mouillage*, PhD Thesis, University of Grenoble I (1997).
- [5] J. Buehrle, S. Herminghaus, and F. Mugele, *Interface profiles near three-phase contact lines in electric fields*, Phys. Rev. Lett., **91**, 8 (2003).
- [6] C  a J., Conception optimale ou identification de formes - Calcul rapide de la d  riv  e directionnelle de la fonction co  t, *M2AN*, **20**, 3, 371–402 , 1986.
- [7] Chenais D., "Optimisation de forme", *Cours de DEA, Univ. Nice - Sophia-Antipolis*, 1992.
- [8] Chenais D, Monnier J, Vila JP., A shape optimal design problem with convective radiative thermal transfer. Analysis and implementation, *J. Optim Th. Appl.*, **110**, 75–117 , 2001.
- [9] Laporte E., Optimisation de formes pour   coulements instationnaires, Thesis, Ecole Polytechnique , 1998.
- [10] J.-L. Lions, Contr  le optimal de syst  mes gouvern  s par des   quations aux d  riv  es partielles, Dunod, 1968.
- [11] Mohammadi B, Pironneau O., *Applied Shape Optimization for Fluids*, Numerical Mathematics Scientific Computation. Oxford , 2001.
- [12] Monnier J., Conception optimale de forme pour un syst  me coupl   fluide-thermique. Application    l'a  rothermique d'un v  hicule. Thesis, University of Nice - Sophia Antipolis , 1995.
- [13] Murat F, Simon J., *Sur le contr  le par un domaine g  om  trique*, Publication of L.A. 189, University P. et M. Curie Paris VI, 1976.
- [14] P. Saramito, N. Roquet, J. Etienne, *Rheolef home page : www-lmc.imag.fr/lmc-edp/Pierre.Saramito/rheolef/*, LMC-IMAG, (2002).
- [15] M. Vallet, M. Vallade and B. Berge, *Limiting phenomena for the spreading of water on polymer films by electrowetting*, Eur. Phys. J. B, **11**, 583, (1999).

Chapitre 4

Écoulements de micro-gouttes : surfaces libres et contacts

Nous avons vu dans le chapitre précédent comment nous pouvions modéliser un écoulement surface libre stationnaire à l'aide d'une approche optimisation de forme. Dans le cas d'un écoulement instationnaire de gouttelettes, d'une part une telle approche n'est plus envisageable et d'autre part le problème de la modélisation de la dynamique de la ligne triple devient incontournable. Après une longue recherche bibliographique (dans des revues de physique essentiellement), je me suis intéressé au modèle de Shikhmurzaev qui m'a paru plaisant pour deux raisons essentiellement. D'une part c'est un modèle qui est basé sur les lois de conservation (milieu continu) et qui adopte la description des interfaces de Gibbs; d'autre part c'est un modèle pour lequel la dynamique de la ligne triple (angle de mouillage et vitesse) n'est pas imposée à priori mais constitue une réponse du modèle.

Y.D. Shikhmurzaev a établi son modèle au travers de cinq articles ([12] et [4] en sont les premiers et derniers de la série). J'ai alors effectué une synthèse de ces équations ainsi qu'une ré-écriture partielle (en distinguant notamment les zones microscopiques et mésoscopiques). Ces travaux de synthèses ont été exposés durant une école d'été du CEA-LETI, [Mo03a-d].

Une analyse mathématique et numérique de la partie mésoscopique du modèle en 1D a été écrite dans [MoWi04]. La partie macroscopique du modèle consiste à résoudre les équations de Navier-Stokes surface libre avec des termes surfaciques dominants (micro-fluidique...), une condition de glissement locale de type Navier généralisée et des équations posées sur la surface libre. Il fallait donc définir une bonne résolution numérique d'écoulements surface libres : une haute précision sur la description de la surface semblait nécessaire. J'ai alors encadré trois stages de DEA (B. Blanchard, J. Etienne, B. Leteurtre) afin de déterminer quelle approche nous pouvions bien adopter. Une approche lignes de niveaux ("Level Set") m'a paru difficile à définir du fait que dans le modèle visé, il apparaît des équations surfaciques ie posées sur la surface libre. Ces équations surfaciques sont du type parabolique (convection-diffusion) éventuellement non-linéaires.

Une approche ALE m'a paru plus adaptée qu'une méthode lignes de niveaux pour un tel couplage surface libre - lois de conservation surfaciques. J'ai alors défini un schéma éléments finis du type ALE, enrichi d'un algorithme permettant de traiter la dynamique de la ligne triple (point triple en 2D axisymétrique), voir [CoMo05-b] [MoBeCo07]. L'algorithme permettant de traiter l'avancée du point triple est basé sur le mouvement de chenillette mis en évidence dans les expérimentations. Notons également qu'un lien avec un modèle de dynamique moléculaire, voir [14], est effectué dans [MoBeCo07].

En collaboration avec le LEGI équipe PIM (JL Achard, A. Soucemarianadin) et le CEA-LETI (A. Glières, P. Pham), nous avons tourné nos calculs vers la simulation de l'étalement d'une gouttelette impactant un solide (ou encore une plaque plongeant dans un bain mouillant).

Nous avons implémenté nos algorithmiques au sein du logiciel industriel Comsol Multiphysics, voir [BeMo07-d] ; malheureusement la version 3.2 alors disponible ne permettait pas encore des suivis de maillages ALE pour de grandes déformations (ce qui est le cas en écoulement de fluides et tout particulièrement lors de l'impact d'une gouttelette). Nous avons alors implémenté ces algorithmiques au sein de notre logiciel maison Micralef (voir [MoBeCo07] et un descriptif sur ma page web personnelle).

En terme d'encadrements.

Stages DEA. Encadrement des stages de DEA "mathématiques appliquées" de l'Université J. Fourier, Grenoble (étudiants Ensimag) :

- B. Blanchard, 1999. *Calcul d'un écoulement bi-fluide par la méthode des lignes de niveau*. Co-encadrant 20% : P. Witomski.
- J. Etienne, 2001. *Formulation ALE des équations de Navier-Stokes surface libre avec tension de surface*. Co-encadrant 40% : P. Saramito.
- B. Leteurtre, 2003. *Modélisation fine de la dynamique du contact liquide-solide-gaz. Effet Marangoni local*. Co-encadrant 20% : P. Witomski.

Post-doctorants. Le logiciel Micralef (écrit en C++ et basé sur la bibliothèque éléments finis Rheolef, code disponible sur ma page Web personnelle) a été développé par A. Benselama, I. Cotoi et moi-même. Les deux premiers auteurs étant deux chercheurs post-doctorants que j'ai encadré (séjours de 5 mois et 10 mois respectivement, financement issu d'un projet européen mené par A. Soucemarianadin).

4.1 Dynamique de la ligne triple et le modèle de Shikhmurzaev

Ce paragraphe est tiré de [MoWi04], [MoBeCo07] voir également [Mo03a-d], [Mo03b-d], [MoWi04-b], [MoWi05-b].

4.1.1 Aspects qualitatifs

Les expérimentations et procédés industriels qui impliquent la surface libre d'un liquide s'étalant sur un solide conduisant au mouillage (ou démouillage) du solide, font apparaître une ligne de contact triple. La modélisation numérique

de la dynamique de la ligne triple est une question clef dans ce domaine en plein essor qu'est la microfluidique.

Dans le cas où le liquide est au repos (cas statique), l'angle de mouillage dépend uniquement de l'affinité entre les différents matériaux et est déterminé par la loi de Young : $\sigma_{LG}^{eq} \cos(\theta_s) = \sigma_{SG}^{eq} - \sigma_{SL}^{eq}$, où θ_s désigne l'angle de mouillage (statique) et σ_{LG}^{eq} , σ_{SL}^{eq} , σ_{SG}^{eq} sont les coefficients de tensions de surface à l'équilibre liquide-gaz, solide-liquide et solide-gaz respectivement.

Dans le cas dynamique, la ligne triple et le point de contact sont en mouvement, la valeur de l'angle de mouillage θ diffère alors de sa valeur au repos θ_s . La loi de Young présentée précédemment n'est *à priori* plus vérifiée. Aussi le comportement du fluide se situant dans la zone sous influence des forces capillaires (i.e. dans un voisinage de la ligne triple), est fonction des conditions d'écoulement, de la dynamique de la ligne triple et de la dynamique de l'angle de mouillage.

Caractéristiques et structure locale de l'écoulement. Parmi les principales caractéristiques de tels écoulements (ex. goutte glissant sur un plan incliné), montrées à travers l'expérimentation, figurent les suivantes : i) le front liquide avance selon un mouvement de chenillette ("rolling motion"), voir [7], ie les particules de l'interface liquide-gaz "roulent" et passent sur l'interface liquide-solide ; ii) l'angle de contact dynamique est différent de l'angle de contact statique -déterminé par la loi de Young-, et dépend notamment du champ de vitesse dans le volume. De plus, il semblerait que sa valeur ne puisse être obtenue de manière explicite mais dépende de l'écoulement global.

Rappelons que la valeur de l'angle dynamique ainsi que la vitesse de la ligne triple font partie des paramètres essentiels pour décrire ces écoulements.

Une multitude d'études très approfondies sur le sujet ont été menées. Citons seulement quelques références historiques : [7], [5], [10].

4.1.2 Modélisation mathématique et difficultés sous-jacentes

Nous considérons par la suite aussi bien la configuration d'une goutte glissante, que celle d'une plaque plongeante ou encore celle de l'impact d'une goutte (en géométrie 2D axisymétrique). Ecrivons "naivement" les équations qui modélisent l'écoulement du liquide. Nous notons le volume Ω , la surface libre liquide-gaz Γ_{LG} et la surface de contact liquide-solide Γ_{LS} . Dans le volume Ω , l'écoulement du liquide est modélisé par les équations de Navier-Stokes incompressible. On pose : $\vec{\Sigma}_n = \Sigma_n \vec{n} \in \mathbb{R}^2$; $\vec{\Sigma}_n = \Sigma_n \vec{n} + \Sigma_\tau \vec{\tau}$, avec $(\vec{\tau}, \vec{n})$ la tangente et normale unitaires à une surface. Les conditions aux limites sur Γ_{LG} issues de la loi de Young-Laplace et prenant en compte les effets de courbure -ainsi que la pression du gaz extérieur- s'écrivent :

$$\vec{\Sigma}_n = (-p_{ext} + \sigma_{LG} \kappa) \vec{n} \text{ dans } (0, T) \times \Gamma_{LG} \quad (4.1)$$

où κ est la courbure moyenne et p_{ext} est la pression extérieure. A noter que le calcul de courbure pourra s'effectuer de différentes manières selon de type de représentation mathématique de la surface Γ_{LG} .

Représentation de la surface libre. Une description mathématique de la surface libre liquide-gaz Γ_{LG} ainsi qu'un modèle de dynamique associé est nécessaire.

Plusieurs descriptions sont envisageables. La frontière Γ_{LG} peut être représentée comme étant le graphe d'une fonction (trop restrictif en général), ou comme étant le zéro d'une hyper-surface (méthode des lignes de niveau, "level set") ou encore comme par une surface implicite transportée par un champ arbitrairement eulerien-lagrangien (méthode ALE). Nous discuterons de cet aspect-là plus loin.

Condition d'adhérence, problème de la singularité et conditions de glissement. Il reste à établir les conditions aux limites sur la surface de contact liquide-solide Γ_{LS} . Le fluide étant visqueux, la condition qui paraît à première vue être la bonne est la condition d'adhérence, à savoir :

$$\vec{u} = \vec{U}_S$$

où $\vec{U}_S$ est la vitesse du solide. Cette condition d'adhérence conduit alors au paradoxe bien connu suivant : le fluide exerce une force infinie sur le solide. C'est le problème dit de la singularité de la ligne triple. La singularité porte sur le tenseur des contraintes.

Une relaxation de la condition d'adhérence en une condition de type glissement conduit bien à la relaxation de cette singularité non physique. Cependant, les particules fluides ne glissent pas le long de l'interface. Elles se meuvent selon un mouvement de chenillette, [7]. Une condition de glissement est-elle alors compatible avec un tel mouvement ?

Toute la difficulté de la modélisation de la dynamique de la ligne triple -en vu de simulations numériques- réside dans l'établissement de bonnes équations sur les interfaces liquide-solide et liquide-gaz, dans le voisinage de la ligne triple. A noter que *loin de la ligne triple*, sur l'interface liquide-solide la condition d'adhérence est valable tandis que sur l'interface liquide-gaz la loi de Young-Laplace l'est également.

De nombreux travaux de modélisation -ainsi que de calcul numérique en découlant- basées sur différentes lois de glissement ont été menés. Diverses conclusions -plus ou moins compatibles d'ailleurs- ont alors été tirées (y compris l'indépendance de l'écoulement par rapport à la condition aux limites remplaçant la condition d'adhérence dans un voisinage de la ligne triple!).

Modélisation de la ligne de contact. Concernant la ligne de contact, nous pouvons nous poser la question si une loi explicite intrinsèque est envisageable. Il est classique de supposer que la dynamique de l'angle peut être modélisée par une fonction explicite de la vitesse de la ligne triple et des propriétés des matériaux. Il s'agit de loi de Tanner de la forme :

$$U_{CL}(t) = k \frac{(\theta(t) - \theta^{eq})^\gamma}{(\theta^{eq})^\gamma} \quad \text{pour } t \in]0, T[\quad (4.2)$$

où U_{CL} est la vitesse de la ligne triple, θ^{eq} l'angle de mouillage à l'équilibre (loi de Young), θ l'angle de mouillage variable (dynamique). k et γ sont des paramètres à calibrer selon l'expérience.

La théorie de Shikhmurzaev. Les auteurs de [4] ont conclut à l'inexistence d'une loi explicite type Tanner intrinsèque. Ils ont également remarqués que le

champ de vitesse au sein du volume liquide, agit sur la dynamique de l'angle. Autrement dit, tout est fortement couplé i.e. la dynamique de l'angle agit sur l'écoulement dans le volume et cet écoulement agit sur la dynamique de l'angle. Le modèle de Shikhmurzaev basé sur les lois de conservation et une description de Gibbs des interfaces, a pour principale caractéristique de ne pas imposer la vitesse de la ligne triple ni la valeur de l'angle de mouillage, mais de les considérer comme une réponse du modèle.

4.1.3 Le modèle de Shikhmurzaev reformulé

Principe du modèle de Shikhmurzaev

On étudie ici le modèle de Shikhmurzaev, voir notamment [12] [4]. Ce modèle est supposé décrire macroscopiquement (point de vue mécanique des milieux continus) les principales caractéristiques de la dynamique ligne triple, et supprimer la singularité. L'idée de base est de considérer que le mouvement de chenillette observé dans les expérimentations, [7], implique que les particules de l'interface liquide-gaz passent sur l'interface liquide-solide, et ainsi change de propriétés (de surface) en un temps non nul. Ainsi, les valeurs des coefficients de tensions de surface s'en trouvent modifiés durant ce lap de temps (temps de relaxation de l'ordre de la milliseconde). Ce processus conduirait alors à un gradient de tension de surface dans un petit voisinage de la ligne triple, qui induirait un effet de Marangoni localisé. Par ailleurs, la loi de Young resterait valable en tout temps (pour cela, nécessairement les tensions de surfaces doivent varier). Un aspect important de cette modélisation est que la vitesse de la ligne triple ainsi que la valeur de l'angle de mouillage constituent une réponse du modèle, et ne sont pas imposés à priori comme cela est le cas avec une loi de type Tanner..

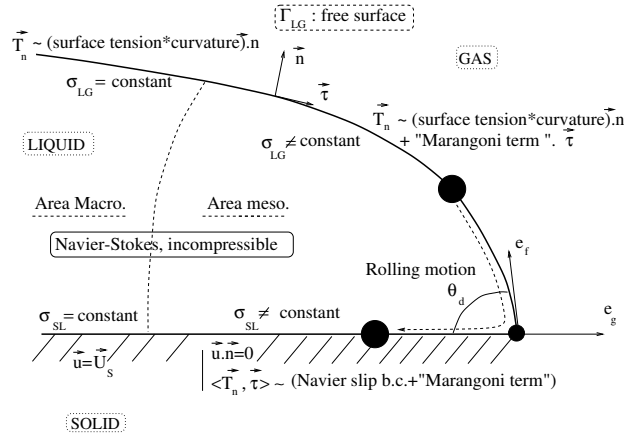


FIG. 4.1 – Modèle de Shikhmurzaev. Liquide mouillant une surface.

Les équations du modèle reformulées

Sans entrer dans les détails des équations de Shikhmurzaev qui ont été établies au cours de plusieurs années, voir notamment [12] [4], je présente ici une reformulation.

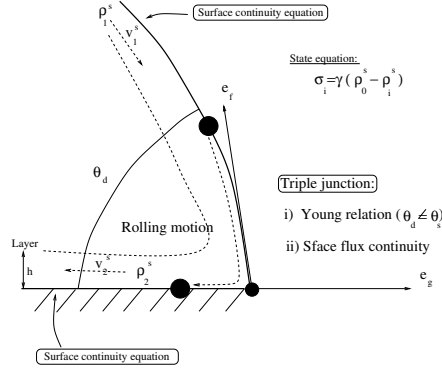


FIG. 4.2 – Voisinage de la ligne triple (zone mésoscopique).

mulation de ces équations. Je distingue ici une zone proche de la ligne triple dite zone mésoscopique, en opposition au reste du volume désigné comme étant la zone macroscopique. Ensuite en remanipulant les différentes équations (qui sont issues des principes de conservations ainsi qu'une description de Gibbs des interfaces), j'ai différencié ce que j'appelle le modèle d'hydrodynamique macroscopique à surface libre (HFSM des articles rédigés en anglais) du modèle de surface mésoscopique local (LSM). Le modèle HFSM est constitué des équations de Navier-Stokes surface libre avec condition de glissement de Navier généralisée; le modèle LSM est une équation de surface parabolique non-linéaire dégénérée.

Les conditions aux bords du modèle HFSM sur l'interface liquide-gaz sont :

$$\vec{\Sigma}_n = (-p_{ext} + \frac{\kappa^\tau}{Ca})\vec{n} + h\vec{\tau} \quad \text{dans } (0, T) \times \Gamma_f \quad (4.3)$$

où Ca est le nombre capillaire. Le terme supplémentaire h est donnée par le modèle LSM (voir plus loin).

Sur l'interface liquide-solide et proche de la ligne triple on a la condition de glissement de Navier généralisée suivante :

$$\begin{cases} \vec{u}^\tau \cdot \vec{n} &= 0 & \text{in } (0, T) \times \Gamma_{sl} \\ \Sigma_\tau &= -[\beta \vec{u}^\tau + \vec{g}] \cdot \vec{\tau} & \text{in } (0, T) \times \Gamma_{sl} \end{cases} \quad (4.4)$$

où β est un coefficient de glissement et le terme supplémentaire $\vec{g}$ est donné par le modèle LSM.

Les termes $\vec{g}$ et h sont locaux car ils s'annulent hors d'un certain voisinage de la ligne triple. Dans la théorie de Shikmurzaev, ils sont reliés aux gradients de tension de surface ainsi (effets Marangoni locaux) :

$$\vec{g} = -\frac{1}{2Ca} \vec{\nabla} \sigma \text{ et } h = \frac{1}{Ca} \vec{\nabla} \sigma_{LG} \cdot \vec{\tau} \quad (4.5)$$

Les coefficients de tension de surface sont une réponse du modèle LSM.

Le modèle de surface mésoscopique LSM.

Les deux interfaces sont classiquement décrites par leur densité de surface ρ_i^s , $i = 1, 2$, (représentation de Gibbs). Basé sur un principe de conservation, Shikhmurzaev dérive des équations de continuité dont ρ_i^s est solution :

$$\frac{\partial \rho_i^s}{\partial t} + \text{div}(\rho_i^s \vec{v}_i^s) + \frac{1}{\tau^*}(\rho_i^s - \rho_i^{eq}) = 0 \quad i = 1, 2 \quad (4.6)$$

où τ^* est le temps de relaxation, $\vec{v}_i^s$ est une vitesse moyenne à l'intérieur de la couche limite et ρ_i^{eq} est la densité à l'état d'équilibre. On a : $\sigma_i(\rho_i^{eq}) = \sigma_i^{eq}$. Ensuite, une équation d'état établit une relation entre ρ_i^s et les tensions de surface σ_i : $\sigma_i = \gamma(\rho_0^s - \rho_i^s)$; où γ et ρ_0^s sont des constantes à estimer. Enfin, les vitesses $\vec{v}_i^s$ sont reliées à ρ_i^s et $\vec{u}$ par deux lois de Darcy (avec là également un certain nombre de constantes à estimer).

Et enfin, à la ligne triple on impose la continuité du flux :

$$(\rho_1^s \vec{v}_1^s) \vec{e}_f = (\rho_2^s \vec{v}_2^s) \vec{e}_g \quad (4.7)$$

où $\vec{e}_f$ et $\vec{e}_g$ sont les vecteurs unités normaux à la ligne triple et tangentiels aux deux interfaces respectivement. Notons que l'on a : $\cos(\theta) = -\vec{e}_f \cdot \vec{e}_g$.

Le modèle de Shikhmurzaev : un modèle initialement pas fermé...

L'aspect le plus notable de ce modèle est que ni la vitesse de ligne triple ni la valeur de l'angle de mouillage (dynamique) ne sont imposés mais constituent une réponse du modèle. Néanmoins, le modèle LSM est constitué de deux équations de surface d'ordre deux (paraboliques non linéaire dégénérées) et d'une condition de transmission au point triple. Telle que formulé par Shikhmurzaev, cette dernière n'impose que la continuité du flux. Comme il est noté dans [3], cette condition n'est pas suffisante pour fermer le système. Il manque dans cette formulation (de surface) une condition à la ligne triple (on peut facilement s'en convaincre en regardant une formulation rectiligne 1D, avec deux équations du second ordre). Cette condition manquante ne peut pas être l'équation de Young, car cela reviendrait à imposer la valeur de l'angle... L'auteur de [3] propose alors une condition supplémentaire du type :

$$(\rho_1^s \vec{v}_1^s) \vec{e}_f = F(\rho_1^s, \rho_2^s) \quad (4.8)$$

où $F(.,.)$ est une forme bilinéaire définie à partir d'une loi de potentiel chimique.

Un lien avec la dynamique moléculaire (théorie de Qian-Wang-Sheng).

Les auteurs de [14] ont effectué des simulations de dynamique moléculaire au voisinage de l'interface de deux fluides immiscibles. Leur modèle est basé sur une description d'interface diffuse de type Cahn-Hilliard. Ils ont montré qu'à une échelle mésoscopique, un glissement relatif à l'interface se produisait selon une loi qui peut se formuler comme la condition de glissement de Navier généralisée (4.4). Cependant, le terme $\vec{g}$ dans (4.4) modéliserait la contrainte tangentielle due à l'anisotropie de la pression au travers de l'interface fluide-fluide ; terme lié à la tension interfaciale. Ce terme de contrainte tangentielle $\vec{g}$

(dénommmé "contrainte de Young interfaciale non-équilibrée"), est défini ainsi : $\int_{\Gamma_{int}} g \, dy = \sigma(\cos\theta - \cos\theta^{eq})$, où $\int_{\Gamma_{int}} dy$ désigne l'intégrale au travers de l'interface Γ_{fr} .

D'un point de vue continu, ce terme provient de la déviation de l'interface fluide-fluide de son état d'équilibre, terme redistribué dans la région interfaciale.

Finalement, il est intéressant de noter que les deux théories (celle de Shikhmurzaev et celle de Qian-Wang-Sheng) conduisent à la même condition (mésoscopique) (4.4). L'obtention de cette condition ainsi que l'interprétation du terme $\vec{g}$ étant radicalement différentes dans chacune des deux approches.

4.1.4 Analyse 1D du modèle mésoscopique de surface

On présente dans ce paragraphe une analyse mathématique et numérique du modèle LSM basées sur une reformulation des équations. Cette reformulation permet également de réduire à deux le nombre de paramètres empiriques à déterminer ; des résultats numériques permettent de définir des intervalles de valeurs admissibles de ces paramètres ainsi qu'un comportement qualitatif des termes $\vec{g}$ et h au voisinage du point triple.

Après reformulations et dans le cas stationnaire 1D rectiligne les deux équations du modèle LSM sont semblables et s'écrivent :

$$(P) \quad \begin{cases} -(\rho\rho')' + \delta_1 U\rho' + \delta_2\rho &= f \text{ in }]0,1[\\ \rho(0) &= \rho_0 \\ (-\rho\rho' + \delta_1 U\rho)(1) &= \phi \end{cases}$$

où δ_1, δ_2 sont deux nombres adimensionnels, $\phi = \delta_1\rho_1^{eq}(2U(1) - U(0)) \leq 0$, ϕ est le flux au point triple.

Existence, unicité et propriétés de la solution

L'équation est non-linéaire et dégénère si ρ s'annule. On suppose $\rho_0 > 0$, et on suit la technique de troncature du premier chapitre. En supposant quelques propriétés de régularité et de signe sur U et U' (propriétés vérifiées pour nos cas tests), on obtient d'utiles estimations à priori, en relation avec la troncature effectuée, et on montre l'existence de solution faibles qui satisfont de telles estimations à priori (paramètre η ci-dessous) à l'aide du théorème de Leray-Schauder.

Théorème 6 *Le problème (P) précédent admet une unique solution faible ρ dans $H^1(0,1)$. Cette solution satisfait $\rho(x) \geq \eta > 0$ dans $[0,1]$, et appartient à $H^2(0,1)$.*

Ensuite, on intégrant à la main l'équation (qui est en fait une EDO), on obtient l'unicité de la solution. A noter que l'on utilise fortement le fait qu'en 1D, $H^{m+1}(0,1)$ est inclus dans $C^m([0,1])$, m entier positif. Aussi, nous montrons plusieurs propriétés de la solution, parmi laquelle

Proposition 3 *Sous les mêmes hypothèses sur les données physiques que précédemment, soit A l'opérateur défini par : $A : \mathbb{R} \rightarrow H^1(0,1)$; $\phi \mapsto \rho$, où ρ est l'unique solution de (P). Alors, cet opérateur A est monotone.*

Plus précisément si $\phi_2 < \phi_1 < 0$, et soient ρ_1 et ρ_2 les deux solutions correspondantes, on a : $\rho_2 \geq \rho_1$ dans $[0,1]$.

Cette propriété de monotonie s'est avérée fort utile d'une part pour l'analyse numérique qui suit mais aussi pour une aide au calage "à la main" des paramètres pour les simulations numériques.

Analyse numérique

On discrétise modèle LSM 1D avec des éléments finis $\mathcal{P}_1$ Lagrange. Comme pour les analyses du chapitre 1, on formule le problème sous forme de point fixe. La formulation faible de (P) s'écrit :

$$(\mathcal{P}) \quad \begin{cases} \text{Trouver } \theta \in V_0 \text{ tel que :} \\ \langle F(\theta), v \rangle = 0 \quad \forall v \in V_0 \end{cases}$$

On étudie le problème linéarisé correspondant, on établit certaines estimations et en appliquant les résultats d'analyse de Brezzi-Rappaz-Raviart, on obtient :

Théorème 7 *Sous les mêmes hypothèses que précédemment, il existe deux constantes $h_0 > 0$, $\alpha_0 > 0$, et pour $h \leq h_0$, il existe une unique solution θ_h au problème discret $(\mathcal{P}_h)$ dans la boule fermée $\bar{B}(\theta, \alpha_0)$.*

De plus, il existe une constante c indépendante de h telle que :

$$\|\theta - \theta_h\|_1 \leq c \inf_{v_h \in V_h} \|\theta - v_h\|_1 \leq ch \|\theta\|_2 \quad (4.9)$$

Tests numériques 1D et calibrage à la main

On suppose $\sigma_{LG} = \sigma_{LG}^{eq}$ et on calcule la solution numérique du modèle LSM 1D sur l'interface liquide-solide. On considère les données d'un système air-eau-verre. En statique, on a : $\theta_s \approx 64.6^\circ$. Dans le cas dynamique, la loi de Young est supposée rester vraie, et le cas $\theta_d > 90^\circ$ correspond à : $\sigma_{SG}^{eq} = 50 < \sigma_{SL} < \sigma_{LG}^{eq} = 70$.

On pose : $\tau^* = 10^{-3}s$ et $U^* = 5.10^{-2}ms^{-1}$. Il ne reste alors plus que deux paramètres empiriques à déterminer : le produit (λ, ρ^*) et ρ_1^{eq} . La propriété de monotonie précédente va nous aider à définir des valeurs physiquement admissibles.

Les solutions ρ et ρ' obtenues sont présentées sur la figure 4.1.4.

Le coefficient de tension de surface σ_{SL} et son gradient σ'_{SL} sont déduit des valeurs de la solution et de l'équation d'état (après résolution d'un système pour obtenir les constantes γ et ρ_0^s de cette loi d'état).

Finalement, on obtient : $\sigma_{SL}(P_C) = 66.8$, $\sigma'_{SL}(P_C) = 1.01 \cdot 10^6$ et avec la loi de Young $\theta_d = 103.9^\circ$.

Les valeurs des deux paramètres $\lambda\rho^*$ et ρ_1^{eq} sont les principales incertitudes de ce modèle, mais la propriété de monotonie et les extréma des valeurs physiquement admissibles pour σ_{SL} nous permettent d'en déterminer des intervalles de valeurs admissibles.

Le profil de la fonction $\nabla\sigma_2$ au voisinage du point triple pourra être utilisé pour définir les termes $\vec{g}$ et h de la condition de glissement généralisée du modèle macroscopique HFSM.

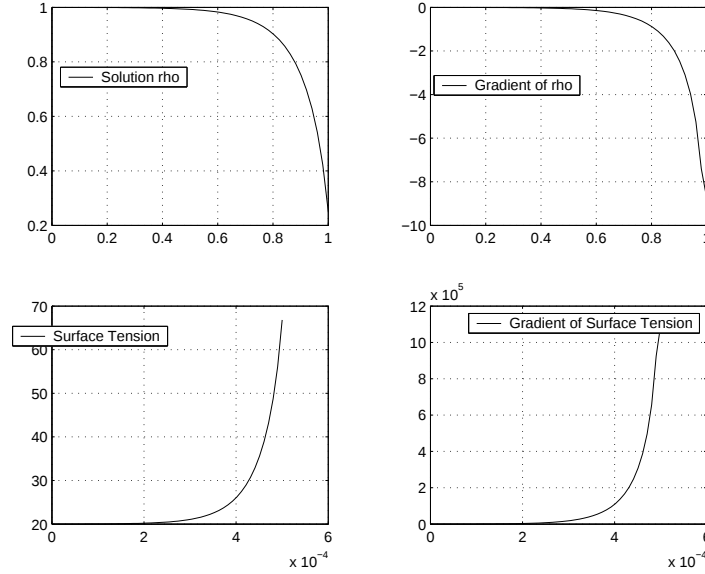


FIG. 4.3 – Représentations de : ρ , ρ' , σ_{SL} et σ'_{SL}

4.2 Etalement de gouttelettes et formulation éléments finis ALE

Ce paragraphe est tiré de [MoBeCo07] voir également [BeMo07-d].

4.2.1 Un calcul simple mais direct de courbure

Nous cherchons à élaborer un algorithme simple et direct pour calculer la courbure d'une courbe plane donnée. Nous nous plaçons dans le cas où cette courbe est définie au travers d'un ensemble fini de points. De plus, ces points sont supposés bruités dans le sens où ils sont issus de calculs numériques comportant leurs propres erreurs. Une telle situation apparaît aussi bien dans le cadre d'un calcul de surface libre ALE que dans le cadre du processus d'optimisation de forme du chapitre précédent.

Le problème est alors le suivant. Etant donné un ensemble de points entaché d'erreurs (de l'ordre schéma éléments finis), comment estimer la courbure de la courbe sous-jacente ? Sachant que nous devons éviter les variations de courbure dûes aux erreurs numériques portées par les points tout en quantifiant au mieux les variations locales de courbure (dans un voisinage du point triple notamment). Dans un contexte CAGD, l'objectif est généralement de régulariser le maillage de la surface sous-jacente et non pas de quantifier une variation de courbure locale.

Une évaluation de la courbure par une approximation différence finie directe conduit à des variations trop importante dûes aux erreurs portées par les points. Une reconstruction polynomiale de la surface sous-jacente pour en évaluer sa courbure ne conduit pas non plus à des résultats satisfaisants. En s'inspirant de

[8], on considère l'approche suivante : on approche localement la courbe sous-jacente au sens des moindres carrés (ce qui conduit à un certain filtrage du bruit) pour ensuite calculer la courbure de la courbe moindres carrés locale. Cet algorithme a été implémenté et testé par deux étudiants de l'Ensimag que j'ai encadré. Il a ensuite été inséré dans les codes Micralef et ElectroCap.

L'algorithme Etant donnés N points définissant l'interface liquide-gaz $X_i = (r_i, z_i)^T$, $i = 1..N$, on approche localement ces données au sens des moindres carrés par une courbe de Bezier $\mathcal{C}(t)$. On calcule ensuite la courbure en chaque point X_i ainsi :

$$\kappa_i \equiv \kappa(t_i) = \frac{r'z'' - r''z'}{(r'^2 + z'^2)^{\frac{3}{2}}}(t_i)$$

où (r', z') et (r'', z'') sont calculés à l'aide de l'algorithme de de Casteljau, t_i étant le paramètre relatif à X_i .

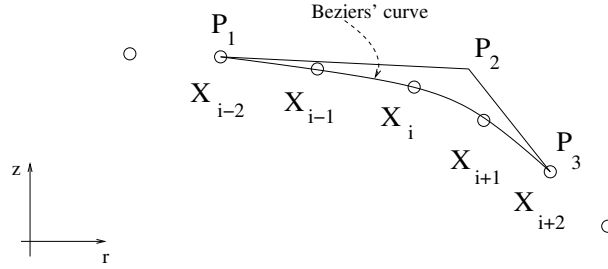


FIG. 4.4 – Point interne X_i . Approximation locale aux moindres carrés par une courbe de Bezier.

Tests numériques. On se donne des courbes dont on connaît exactement la courbure et on compare numériquement notre algorithme avec un schéma différences finies d'ordre deux directement appliqué aux données $X_i = (r_i, z_i)^T$, $i = 1..N$. Sans bruit imposé sur les données, les deux approches donnent de bons résultats. Par contre si l'on rajoute un bruit aléatoire (sur l'ordonnée de chaque point), le schéma différences finis direct ne donne plus de bons résultats tandis que notre algorithme basé sur une approximation aux moindres carrés locale permet de quantifier correctement la courbure ainsi que ses variations locales.

4.2.2 Le modèle macroscopique : hydrodynamique à surface libre avec conditions locales de glissement généralisées

Nous cherchons à résoudre le modèle d'hydrodynamique macroscopique de Shikhmurzaev HFMSM qui est constitué des équations de Navier-Stokes incompressible avec les conditions aux bords (4.3)-(4.4) et une équation de la dynamique de la surface libre. Les termes σ_{LG} et $\nabla \sigma_{SL}$ sont donnés et on pose : $\Gamma_{LG} = \Gamma_{LG}^M$. Un autre terme source est la courbure κ .

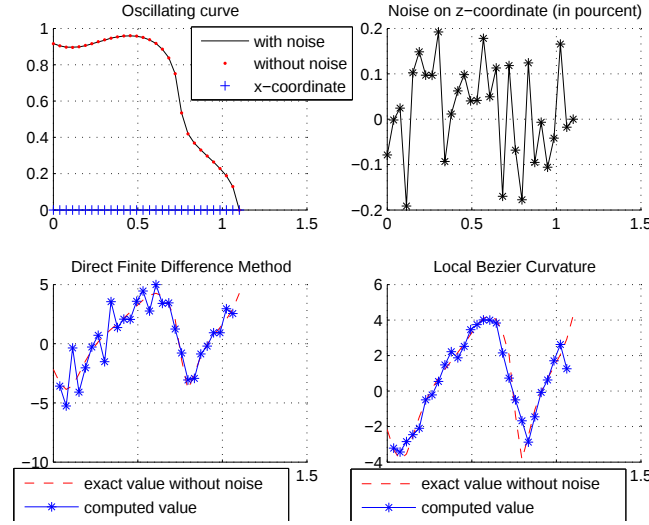


FIG. 4.5 – Valeurs de la courbure avec / sans bruit

Quelle représentation de la surface libre ? Parmi les méthodes classiquement employées, nous pensons à la méthode des lignes de niveau ("level set") avec une description diffuse de l'interface, à une formulation ALE, ou encore aux méthodes VOF et "Front tracking". Nous avons affaire ici à un écoulement incompressible surface libre, surface sur laquelle sont posées des équations de type convection-diffusion en compressible (le modèle mésoscopique local). A l'issu des trois stages de DEA (B. Blanchard, J. Etienne, B. Leteurre) que j'ai encadré, l'approche lignes de niveaux ("level set") avec une description diffuse de l'interface m'a paru moins adapté qu'une formulation ALE. Evidemment cette dernière présente l'inconvénient de ne pas pouvoir gérer des changements de topologies, par contre elle conduit à une description explicite de la surface qui permet plus facilement de poser les équations surfaciques (qui pourraient d'ailleurs être les équations de surfactants).

Le modèle macroscopique à surface liubre est alors résolu selon une formulation ALE classique dont l'algorithmique après discrétisation en temps est présenté sur la figure 4.6.

Effet Marangoni au voisinage du point triple. Dans le cas test d'une plaque solide plongeant dans un bain liquide, un raisonnement simple montre que le gradient de tension de surface induit un écoulement qui s'oppose à l'écoulement volumique Fig. 4.7 : c'est l'effet Marangoni. Une simulation numérique (en Stokes 2D plan stationnaire) montre un champ de vitesse local au point triple cohérent avec ce raisonnement. Aussi cela semble cohérent avec des expérimentations menées au LEGI, voir la photo dans le cas d'un écoulement bi-fluide¹.

¹Cette photo est dû à A. Royon, stage ingénieur HMG et Forschungszentrum Karlsruhe, 2002

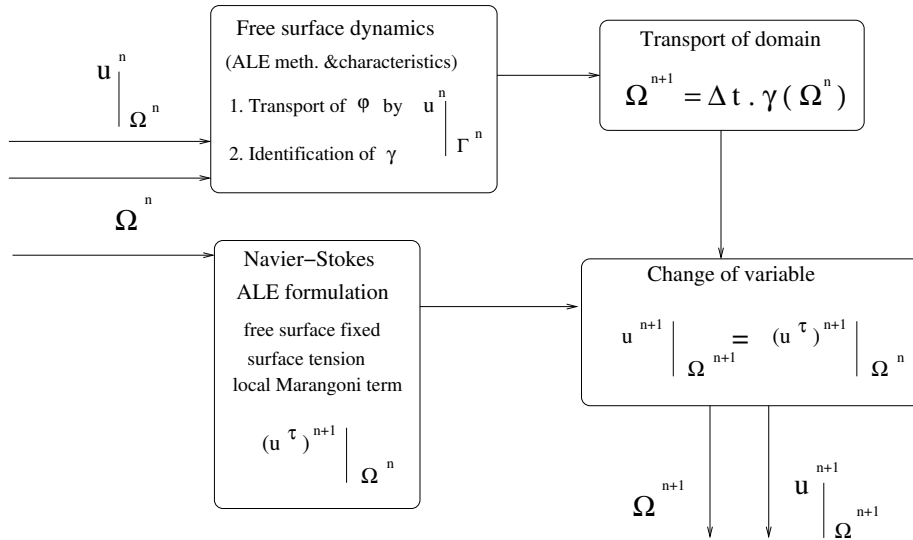


FIG. 4.6 – Algorithme de résolution ALE

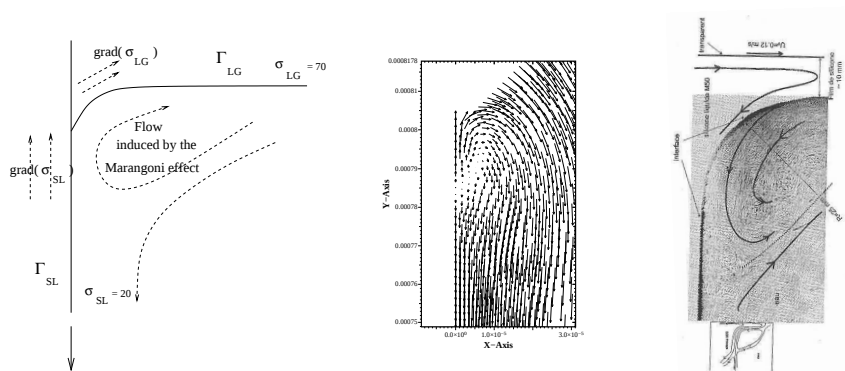


FIG. 4.7 – Plaque plongeante. (G) Aspect qualitatif (M) Champ de vitesse local (D) Photo issue de A. Royon EnSHMG 2002

Étalement et chenillette

Il a été montré expérimentalement [7] que lorsque le front liquide avance (étalement), les particules de la surface passent de l'interface liquide-gaz à l'interface liquide-solide, telles une chenillette ("rolling motion"). Partant de cette observation, j'ai élaboré un algorithme d'étalement (avancée du point triple) imitant ce mouvement de chenillette, voir Fig. 4.2.2, [CoMo05-b][MoBeCo07]. Cet algorithme d'étalement complète l'algorithme global ALE.

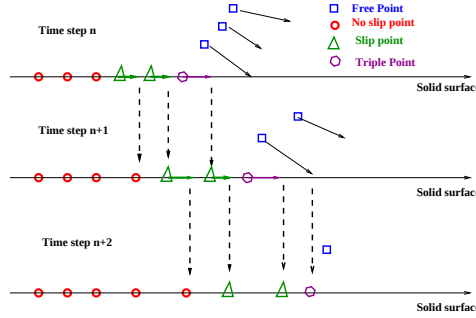


FIG. 4.8 – Processus d'étalement. Les cercles représentent les noeuds de non-glissement; triangles : noeuds de glissement $u_z = 0$; carrés : noeuds libres; diamant : le point triple.

4.2.3 Impact de gouttelettes : simulation de la phase d'étalement

Nous considérons la phase d'étalement lors de l'impact d'une gouttelette 2D axisymétrique sur un solide. Les nombres caractéristiques sont : $L_{ref} = 2.3 \text{ mm}$, $U_{ref} = 0.98 \text{ m/s}$, soit le Reynolds $Re \approx 46$, le Weber $We \approx 68$ et le nombre capillaire $Ca \approx 1.5$. L'élément fini utilisé est celui de Hood-Taylor (ordre deux).

Loi de type Tanner imposée et test algorithmique. Nous avons effectué des simulations en imposant l'angle de mouillage et la vitesse du point triple afin de tester notre algorithmique ALE. Nous avons pu vérifier que le volume total de la goutte est relativement bien conservé (perte de 2-3 % en tout début d'étalement lors des grandes déformations, et ceci pour un maillage de 600 éléments environ). Le nombre de remaillages requis est relativement faible (environ 20 pour 1000 itérations en temps), et ne sont nécessaires que lorsque nous projetons un point de la surface liquide sur la surface solide. Cela démontre notamment la performance du relèvement du champ de vitesse arbitraire par un système d'élasticité linéaire (en espérant que cela convainc les responsables de Comsol Multiphysics...).

Les résultats numériques obtenus (hauteur et diamètre de la goutte) sont qualitativement comparables aux résultats expérimentaux dont nous disposons, [1].

Influence des paramètres (β, g, h) . Nous montrons numériquement l'influence des trois paramètres (β, g, h) qui apparaissent dans les nouvelles conditions aux bords au voisinage du point triple. Nous considérons le système de Stokes stationnaire avec les conditions aux bords (4.3)-(4.4).

Tout d’abord, nous retrouvons bien sûr le fait que lorsque β devient grand, la condition de glissement devient semblable à une condition de non-glissement. Concernant le terme en g , nous retrouvons le fait que pour $|g|$ grand ($g < 0$), l’étalement est accéléré : pour définir une contrainte faible, la vitesse tangentielle doit être de l’ordre de $\frac{-g}{\beta}$. Quant au terme h , ce dernier crée une force tangente à la surface liquide-gaz (vers le haut) qui pourrait permettre le mouvement de rétraction.

Notons enfin que le terme $\frac{-g}{\beta}$ agit différemment sur la surface selon si l’angle de mouillage est inférieur ou supérieur à $\frac{\pi}{2}$, Fig. 4.9.

Phase d’étalement simulée avec le modèle de Shikmurzaev. Les équations considérées sont celles du modèle HFSM : équations de Navier-Stokes instationnaire avec surface libre et conditions aux bords (4.3)-(4.4). Les termes (β, g, h) sont calibrés à la main selon l’analyse et les expérimentations du modèle surfacique 1D (section précédente) ainsi que les expérimentations précédentes, Fig. 4.9. Nous nous intéressons à la phase d’étalement de la goutte à partir d’un premier contact avec le support solide. Comme évoqué précédemment, le terme g peut jouer le rôle d’un contrôle sur la vitesse du point triple (et donc sa position). Une diminution de $|g|$ ($g < 0$) se traduit par une accélération de l’étalement. Si $|g|$ petit (valeurs dépendantes de β), son effet ne se fera pas sentir lors de la phase initiale tant les termes d’inertie sont dominants. Pour $|g|$ très grand, d’importantes déformations du maillage sont engendrés et son suivi devient problématique.

4.3 Bilan et perspectives

Bilan. Dans cette thématique d’écoulements dynamiques de gouttelettes avec contact, je me suis principalement intéressé au modèle de Y.D. Shikmurzaev issu de la mécanique des milieux continus et d’une représentation de Gibbs de l’interface. J’ai commencé par reformuler de manière plus synthétique les équations. Nous avons écrit dans [MoWi04] une analyse mathématique et numérique détaillée, ainsi que des propriétés et des expérimentations numériques démontrant un possible calage à la main. Nous avons mis au point dans [CoMo05-b] [MoBeCo07] une algorithmique complète ALE pour la partie macroscopique enrichie d’un algorithme d’avancée du point triple imitant le mouvement de chenille observé dans les expérimentations. Nos expérimentations numériques ont mis en évidence les rôles prépondérants des paramètres apparaissant dans les conditions aux bords locales au point triple ; ces paramètres jouant potentiellement un rôle de contrôle de l’écoulement. Des résultats numériques d’étalement d’un goutte 2D axisymétrique après impact sont qualitativement comparables aux résultats expérimentaux. Enfin une analogie des équations obtenues dans la théorie de Shikmurzaev et celles obtenues à partir de simulations de dynamique moléculaire (interface diffuse, Cahn-Hilliard) a été mis en évidence [MoBeCo07].

Un problème encore ouvert : la phase de rétraction (“recoiling”). Nous avons montré dans la section précédente le rôle que pouvait jouer le terme h dans la phase de rétraction de la goutte. Nous avons élaboré l’algorithme suivant, cf Fig. 4.11, pour modéliser numériquement la dynamique du point triple

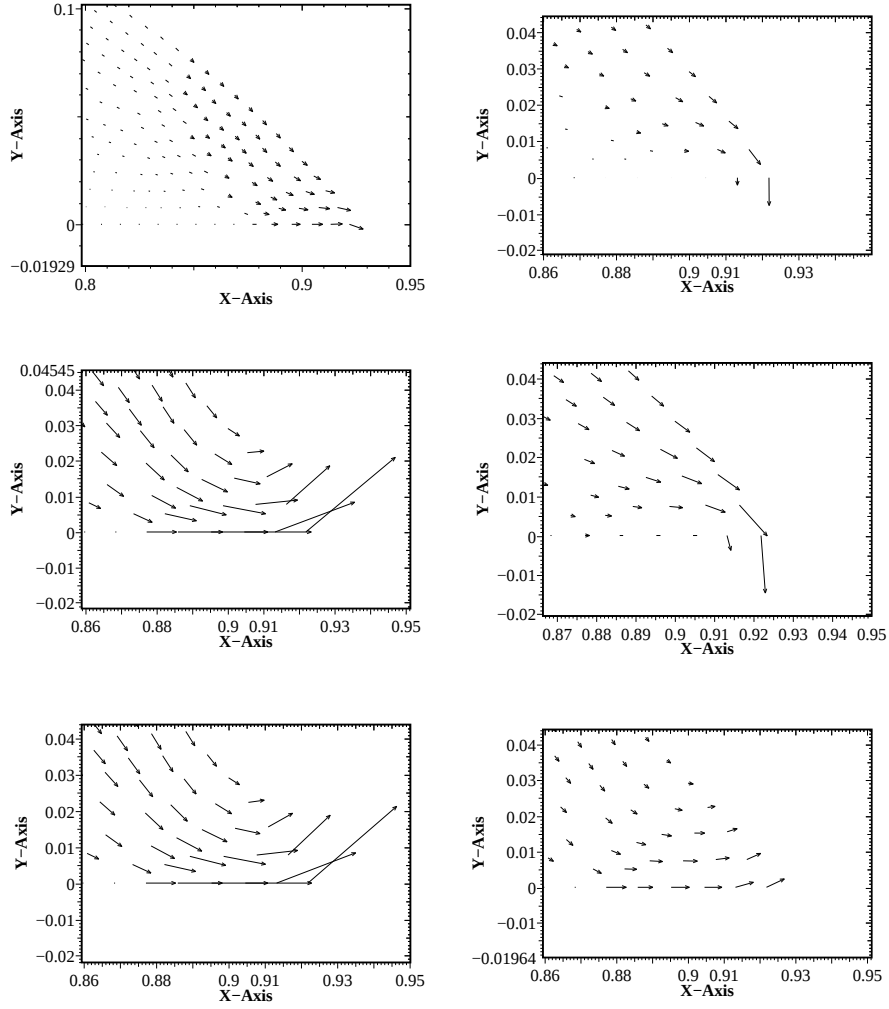


FIG. 4.9 – Case 3 : influence of β , g and h , $h = 2g$. Velocity in the vicinity of the triple point for : $(\beta, g) = \{(0, 0), (10^4, 0)\}$ (up), $\{(0, -10^2), (10^4, -10^2)\}$ (middle), $\{(0, -10^4), (10^4, -10^4)\}$ (down). Scale factors are 0.05, 0.05, 0.005, 0.1, 5×10^{-5} , 0.005, respectively. $\theta > \frac{\pi}{2}$.

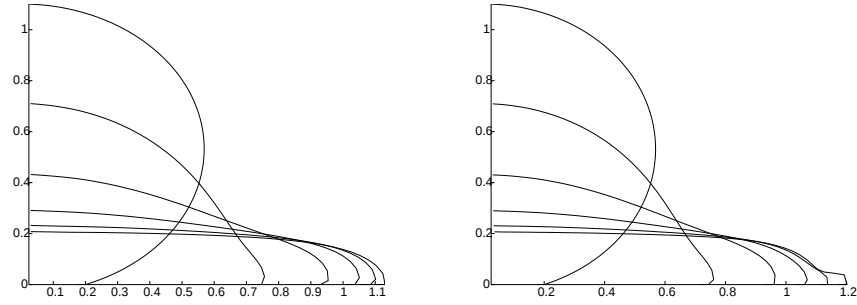


FIG. 4.10 – Profil de gouttelettes et position du point triple pour $\beta = 10^3$ et : (G) $g = -10$, (D) $g = -10^2$

en phase de rétraction. Les résultats numériques obtenus ont montré un possible écoulement de rétraction avec une telle approche ; cependant nous n'avons pas réussi à simuler intégralement et de manière correcte cette phase-ci. En effet, nous avons rencontrés des problèmes d'instabilité (numérique à priori) de l'interface. Une meilleure compréhension fondamentale des forces mises en jeu lors de cette phase semble nécessaire.

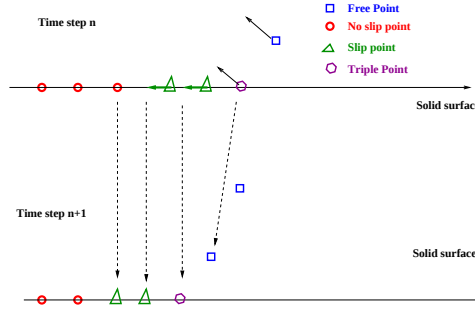


FIG. 4.11 – Recoiling process. Circles represent no-slip nodes $\vec{u} = 0$, triangles represent slip nodes $u_z = 0$, squares represent "free" nodes, diamond is the triple point.

Surfactants et analogie avec les équations surfaciques de Shikhmurzaev. Les équations de surface de la théorie de Shikhmurzaev (modèle mésoscopique) sont analogues à celles modélisant la dynamique de surfactants, voir [13]. Ces dernières sont des équations de convection-diffusion linéaires fortement couplées avec l'écoulement interne ; les opérateurs différentiels sont bien entendus surfaciques. L'inconnue Γ de ces modèles représente la concentration des surfactants (qui modifie l'affinité entre les différents milieux, ie les tensions de surface). Une formulation faible sur une surface paramétrée quelconque (en vue de son implémentation éléments finis, dans Comsol multiphysics notamment) est présentée dans [BeMo07-d]. Une résolution complète du modèle de Shikh-

murzaev (ie couplage des équations surfaciques avec les équations de dynamique du liquide) s'apparenterait à une résolution couplée dynamique du liquide - dynamique de surfactants. Des analyses mathématiques de modèles simplifiés ainsi que des expérimentations de manipulation de macromolécules biologiques dans des gouttes (applications en biologie médicale), sont menées par exemple par L. Davoust du LEGI - équipe PIM.

Implémentation de ces équations au sein d'un logiciel industriel : COMSOL Multiphysics. Nous avons implémenté les différentes équations et algorithmiques mises au point au sein du logiciel industriel Comsol Multiphysics 3.2, voir [BeMo07-d] ; et ceci en vue d'un transfert auprès de nos collègues mécaniciens du LEGI (équipe PIM) et du CEA-LETI.

Nous avons rencontrés plusieurs difficultés, parmi lesquelles : i) le calcul de la courbure (force primordiale en microfluidique) ; ii) l'implémentation de l'algorithme spécifique d'avancée du point triple qui fait appel à des informations non disponibles ; iii) le suivi de maillage en présence de grandes déformations.

Concernant les deux premiers points, des astuces (pas forcément intuitives ni élégantes...) ont cependant permis de contourner ces difficultés. Concernant la question cruciale d'un bon suivi de maillage, malheureusement nous n'avons pas réussi à contourner le problème. Il est fort probable qu'il suffise pourtant d'une modification mineure : un bon relèvement du champ de vitesse arbitraire (vitesse de grille) basé sur de l'élasticité linéaire. Cependant, nous pouvons parier que l'évolution prochaine de ce logiciel permettront d'y ajouter ces modèles et algorithmiques permettant de simuler la dynamique du point triple (phase d'étalement du moins).

Notons également qu'aussi bien les équations surfaciques de Shikhmurzaev que les équations de surfactants ont pu être implémentées sans trop de difficultés, ce qui permet d'afficher un certain optimisme quant à un premier couplage à venir entre ces différents modèles au sein de Comsol Multiphysics.

Références personnelles ou en collaboration

Revue internationale à comité de lecture

- [MoBeCo07] J. Monnier, A. Benselama, I. Cotoi. "*Flow patterns in the vicinity of triple line dynamics arising from a local surface tension model*". Int. J. Comput. Multiscale Comput. Eng. Accepted, To appear, 2007.
- [MoWi04] J. Monnier, P. Witomski. "*Analysis of a Local Hydrodynamics Model with Marangoni effect*". J. Sc. Comp. (JSC), 21 (3) : 369-403, 2004.

Logiciels : rapports de recherche INRIA

- [BeMo07-d] A. Benselama, J. Monnier. "*Navier-Stokes ALE free surface flow with generalized Navier slip conditions. Droplet impact and attempt using Comsol Multiphysics 3.2*". Report INRIA RR-6175, 2007.

Congrès internationaux avec actes publiés dans des revues à comité de lecture

- [MoCo06-b] J. Monnier, I. Cotoi. "*Flow patterns in the vicinity of triple line dynamics arising from a local surface tension model*". Lecture Notes in Computer Science. ICCS : 6th Int. conf., Reading, UK. Edts : Alexandrov, van Albada, Slood and Dongarra, vol. 3992, pp 26-33, Springer, 2006.
- [MoWi05-b] J. Monnier, P. Witomski. "*A local surface model applied to contact line dynamics*". Nonlinear Analysis, 63, pp1551-1559, 2005.

Congrès internationaux avec actes à comité de lecture

- [CoMo05-b] I. Cotoi, J. Monnier. "*On a ALE Finite Element Modelling of Droplet Impact*". FEF05, Swansea, UK, April 2005.
- [MoWi04-b] J. Monnier, P. Witomski. "*A hydrodynamic model with local Marangoni effects arising from microfluidics*". Eds P. Neittaanmäki, T. Rossi, K. Majava, O. Pironneau, S. Korotov, E. Oñate, J. Périaux, D. Knörzer. ECCOMAS'04. Jyväskylä, Finland, July 2004.

Cours en école d'été

- [Mo03a-d] J. Monnier. "Modélisation numérique de la dynamique de la ligne triple". Ecole d'été CEA "Interfaces Fluide-Fluide". SLB-SBS-DSIS-LETI-CEA Grenoble, Septembre 2003.
- [Mo03b-d] J. Monnier. "Suivi numérique d'interfaces". Ecole d'été CEA "Interfaces Fluide-Fluide". SLB-SBS-DSIS-LETI-CEA Grenoble, Septembre 2003.

Références principales du chapitre

- [1] Allaman, S., Desie, G., Vadillo, D., Soucemarianadin, A., Impact and spreading of micro-drops onto solid substrates. *Mécaniques & Industries* **4** pp. 443-455 (2003).
- [2] I.B. Bazhlekoy, P.J. Shopov, *Numerical simulation of dynamic contact line problems*, J. Fluid Mech., 352, 113-133 (1997).
- [3] Billingham, J., *A reappraisal of a model for the motion of a contact line on a smooth solid surface*. Euro. J. Appl. Math. (2006).
- [4] Blake, T.D., Bracke, M., Shikhmurzaev, Y.D., Experimental evidence of nonlocal hydrodynamic influence on the dynamic contact angle. *Physics of fluids* **11** pp. 1995-2007 (1999).
- [5] De Gennes, P.G., Wettings : statics and dynamics. *Reviews Modern Phys.* **57** pp. 827-863 (1985).
- [6] W. Dorfler, O. Goncharova, D. Kroner, *Fluid flow with dynamic contact angle : numerical simulation*, ZAMM, 82 (3), 167-176 (2002).
- [7] Dussan, V.E.B., Davis, S.H., On the motion of a fluid-fluid interface along a solid surface. J. Fluid Mech. **65** pp. 71-95 (1974).
- [8] Hamann, B., *Curvature approximation for triangulated surfaces*, In : G. Farin et al., editor, *Geometric modelling*, pp. 139-153, Springer-Verlag, (1993).
- [9] Hughes, T.J.R., Liu, W., Zimmermann, T.K., Lagrangian-Eulerian Finite Element Formulation for incompressible Viscous Flows, *Comp. Methods Applied Mech. Eng.*, vol. 29, pp. 329-349 (1981).
- [10] Pomeau, Y., Recent progress in the moving contact line problem : a review. C.R. Mécanique. **330** pp. 207-222 (2002).
- [11] Saramito, P., Roquet, N. and Etienne, J., Rheolef, The finite element system, [http ://www-lmc.imag.fr/lmc-edp/Pierre.Saramito/rheolef/](http://www-lmc.imag.fr/lmc-edp/Pierre.Saramito/rheolef/)
- [12] Shikhmurzaev, Y.D., The moving contact line problem on a smooth solid surface. *Int. J. Multiphase Flow*. **19** 589-610 (1993).
- [13] Slatery J.C, L. Sagis, E.S. Oh : *Interfacial transport phenomena*. 2nd edt. Springer (2007).
- [14] Qian, T., Wang, X.-P., Sheng, P., Generalized Navier boundary condition for the moving contact line. *Comm. Math. Sci.* **1** pp. 333-341 (2003).

Chapitre 5

Modèles numériques en hydraulique fluviale et inondations.

Assimilation variationnelle de données, calage, couplages

A partir de l'automne 2002, j'ai commencé à m'intéresser à la modélisation numérique (directe et inverse) de fluides géophysiques (thématique centrale du projet Idopt) et plus spécifiquement aux écoulements de rivières. Au sein d'Idopt et sur cette thématique, une thèse encadrée par FX Le Dimet avait été soutenue [28] et une autre était en cours [23]. Aussi le programme européen Anfas (auquel Idopt participait) traitait de ce sujet, voir par exemple [17]. Dans le prolongement de ces travaux, j'ai contacté plusieurs collègues hydrauliciens, hydrologues et industriels (Cemagref Lyon - Montpellier, LTHE et Sogreah essentiellement) pour aboutir au montage du projet "prévention numérique de crues", projet région Rhône-Alpes 2003-06 thématique "développement durable". Parallèlement à cela, je participais à l'ACI Assimage (Assimilation d'Images) 2003-06 menée par FX Le Dimet, et réunissant des spécialistes de l'image (INRIA projet Clime et IRISA notamment). Après discussions avec les "collègues applicatifs" (hydrologues, hydrauliciens), les directions qui semblaient intéressantes de développer au sein du projet région portaient sur le calage des modèles, l'assimilation de données, le couplage et la simulation temps réel. Seule cette dernière direction ne fût pas abordée dans le cadre de ce projet.

Les collègues disposaient depuis fort longtemps de modèles et de codes performants et opérationnels ; citons Telemac2D (St-Venant 2D) développé par EDF, utilisé et commercialisé par Sogreah, Rubar20 (2D) et Mage (1D casier) développés par le Cemagref Lyon. Dans l'optique de produits logiciels utilisables à court terme (avant 2006...), nous avons commencé par étudier la possibilité d'obtenir ou pas l'adjoint du premier code cité. Nous avons abordé la différenciation "automatique" d'un code source extrait du logiciel Telemac2D. Une large partie du travail a pu être menée, voir [LoHoMo05-b], cependant du fait de l'usage omniprésent des pointeurs au sein du code direct (fonctionna-

lité non prise en compte par les différenciateurs automatiques source-à-source actuels), nous n'avons pu aboutir à l'intégralité du code adjoint, et ceci malgré l'aide des collègues du projet Tropics, outil Tapenade [37]. Mener la tâche jusqu'au bout aurait nécessiter des moyens supplémentaires, cependant les quelques mois passés sur ce logiciel industriel nous ont permis de nous former sur la différenciation automatique.

Parallèlement à cela et dans l'optique de développements de nouvelles algorithmiques (assimilation d'images vidéo / satellites, de couplages de modèles etc), il nous fallait disposer d'un code relativement simple et parfaitement maîtrisé. C'est ainsi que j'ai initié le projet de construction de DassFlow [LoHoLeDiMo05-b][HoMaMoLa07-b], nouveau code aussi simple que possible, évolutif et dont les normes de programmation respectent parfaitement celles de Tapenade (différenciateur automatique utilisé pour générer le code adjoint). Le code de calcul est interfacé avec les mailleurs, visualiseurs et outils SIG nécessaires (aussi bien issus du monde du logiciel libre que d'outils commerciaux de référence).

Au fur et à mesure des développements et des contributions, nous avons pu améliorer les solveurs directs [FeBrMo07][FeMaMo07][FeMaMo-b], démontrer les potentialités sur des données réelles [HoLaLeDiMo06-b], intégrer des données lagrangiennes (thèse de M. Honnorat, architecte initial de DassFlow, [14][HoLeDiMo07]), assimiler des images satellites post-traitées [15][16] [LaMo07] [HoLaMoPuPa07], des images vidéo [HoHuLeDiMoRi07] et enfin mettre au point une algorithmique de couplage (type "mortar") 1D global - 2D local tout en assimilant simultanément les données [HoGeLeDiMo06-b][GeMo07].

Le présent chapitre a pour objet de présenter une synthèse de l'ensemble de ces résultats ainsi que ceux en cours et à venir.

En terme de projets.

- Montage et responsable du projet "prévention numérique de crues". Projet région Rhône-Alpes 2003-06, thématique "développement durable".
- Participation l'ACI Assimage (Assimilation d'Images) 2003-06, resp. FX Le Dimet.

En terme d'encadrements.

Thèse. Co-encadrement à 80% de la thèse de M. Honnorat (directeur habilité : FX Le Dimet). "Assimilation de données lagrangiennes pour la simulation numérique en hydraulique fluviale" BDI-CNES, déc. 2003-06. Thèse terminée en janv. 07, soutenance en octobre 07.

Stage DEA. Encadrement du stage DEA-INSA 2003 "Comparaison de schémas éléments finis pour les équations de St Venant". M. Honnorat. Univ. J. Fourier, Grenoble-I.

Ingénieur CDD INRIA 2 ans 06-08. Encadrement de J. Marin, jeune ingénieur (Ensimag'06) pour co-développer le code DassFlow mais aussi un code de glaciologie.

Postdocs. Dans le cadre du projet région, j'ai encadré 1 jeune chercheur et 2 chercheurs confirmés financés sur des bourses postdoctorales (de 10 à 16 mois).

- *T2DInverse* : génération du code adjoint et assimilation de données avec

Telemac2D (code EDF) Y. Loukili. 10 mois, 2004. Actuellement ingénieur au Canada.

- *Couplage et assimilation simultanées pour St-Venant 1D et 2D. Modèle de crues* I. Gejadze. 16 mois, 2004. Recruté lecteur à Glasgow à la suite de son financement postdoctoral.
- *Assimilation d'images satellitaires pour un modèle de crues. Application à la Moselle* X. Lai. Jeune chercheur de l'académie des sciences de Chine, Nandging, Chine.

En terme de logiciel.

- DassFlow (www.gforge.inria.fr/Dassflow) : logiciel diffusé internationalement.

Ce code est appelé à évoluer vers la plateforme intégrée d'hydrologie plus large DassHydro, plate-forme commune avec le laboratoire MOX, Politecnico Milano.

5.1 DassFlow : un modèle numérique direct et inverse pour l'hydraulique fluviale

Ce paragraphe est tiré des articles, proceedings et rapports suivants : [LoHoLeDiMo05-b] [HoLaLeDiMo06-b] [FeBrMo07] [HoMaMoLa07-b], de la thèse de M. Honnorat [14], voir également [CaDaHoLeDiLoMo05-b] [FeMaMo07] [FeMaMo-b].

5.1.1 Modèles directs 2D et 1D. Couplage.

Nous présentons ici les modèles et schémas numériques qui ont été retenus et implémentés dans notre logiciel DassFlow, [LoHoLeDiMo05-b] [HoMaMoLa07-b].

Les équations de St-Venant 1D avec apports latéraux. Les modèles opérationnels de rivières sont basés sur un réseau de branches modélisées par les équations de St-Venant 1D, [26], avec lois de noeuds, de vannes etc, mais aussi avec des termes sources (généralement empiriques) modélisant la perte de charge et moment lors des débordements, voir par exemple [36] [35]. Ces modèles sont appelées modèles 1D casier (ou encore 1.5D), [10]. Lors de la dérivation des équations de St-Venant 1D, si l'on considère une section de canal rectangulaire (de largeur $b(\tilde{x})$) et les apports latéraux éventuels (débordements), on obtient :

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial \tilde{x}} = q_n \\ \frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \left(\frac{Q^2}{S} + P \right) - g \frac{\partial b}{\partial \tilde{x}} \frac{H^2}{2} + g S \frac{\partial z_b}{\partial \tilde{x}} = q_n \frac{Q}{S} + s_f \end{cases} \quad (5.1)$$

où S est la section mouillée, Q le débit linéique, H la hauteur d'eau, b est la largeur du canal (supposé de section rectangulaire), $P = g S \frac{H}{2}$, q_n est le débit résultant des apports / pertes latérales (débordement au travers des parois latérales du canal principal) et s_f est le terme de friction (loi de Manning

par exemple).

On a effectué l'hypothèse que le canal est de section rectangulaire ($S = b.H$), mais aussi que $\frac{\partial b}{\partial \bar{x}}$ est petit. Ces équations peuvent s'écrire sous forme conservative avec terme source :

$$\partial_t w + \partial_{\bar{x}} f(w) = g(w) + s_f(w)$$

où $w = [S, Q]^T$, $f(w) = (Q, \frac{Q^2}{H} + g \frac{S^2}{2b})^T$ et $g(w) = (q_n, g \partial_{\bar{x}} b \frac{S^2}{b^2} - g S \partial_{\bar{x}} z_b + q_n \frac{Q}{S})^T$.

Bien sûr le système est fermé avec des conditions initiales et conditions aux bords. On note $c = \sqrt{gh}$ la célérité des ondes.

Les équations de St-Venant 2D. Les modèles d'hydraulique fluviale 2D sont basés sur les équations de St-Venant 2D dont les inconnues sont la hauteur d'eau h et le débit $\mathbf{q} = h\mathbf{u}$, où $\mathbf{u} = (u, v)^T$ est la vitesse moyennée sur la profondeur. Les équations sont :

$$\begin{cases} \partial_t h + \operatorname{div}(\mathbf{q}) = 0 & \text{in } \Omega \times]0, T] \\ \partial_t \mathbf{q} + \operatorname{div}(\frac{1}{h} \mathbf{q} \otimes \mathbf{q}) + \frac{1}{2} g \nabla h^2 + gh \nabla z_b + g \frac{n^2 \|\mathbf{q}\|_2}{h^{7/3}} \mathbf{q} = 0 & \text{in } \Omega \times]0, T] \\ h(0) = h_0, \quad \mathbf{q}(0) = \mathbf{q}_0 \end{cases} \quad (5.2)$$

où g est la gravité, z_b la topographie du fond, n le coefficient de friction (loi de Manning), (h_0, q_0) la condition initiale..

Sous forme conservative avec terme source, ces équations s'écrivent :

$$\partial_t W + \partial_x F_1(W) + \partial_y F_2(W) = (S_g + S_f)(W)$$

avec $F_1(W) = (q_1, \frac{q_1^2}{2} + \frac{1}{2} g h^2, \frac{q_1 q_2}{h})^T$, $F_2(W) = (q_2, \frac{q_1 q_2}{h}, \frac{q_2^2}{2} + \frac{1}{2} g h^2)^T$.

Conditions aux bords. Dans une optique de couplage et calibration de modèles, il est indispensable de porter une attention toute particulière aux conditions aux bords, tant du point de vue efficacité et rigueur mathématique (caractéristiques entrantes valables en sous-critique et super-critique) que du point utilisateur hydrologue (courbe de tarage).

On distingue les trois catégories de bord suivantes :

- . Γ_{in} la partie où l'écoulement est rentrant,
- . Γ_{out} la partie où l'écoulement est sortant,
- . Γ_{wall} la partie de type paroi.

Les parties entrantes et sortantes étant bien entendu susceptibles de changer au cours du temps.

Sur Γ_{wall} , on considère une condition de glissement :

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}|_{\Gamma_c}(t) = 0, \quad \frac{\partial h}{\partial \mathbf{n}}|_{\Gamma_c}(t) = 0 \quad \forall t$$

Sur la partie entrante Γ_{in} , deux types de conditions sont possibles :

- a. Débit imposé : $(\mathbf{q} \cdot \mathbf{n})|_{\Gamma_{in}} = -q^{in}(t)$, $\frac{\partial h}{\partial \mathbf{n}}|_{\Gamma_{in}}(t) = 0 \quad \forall t$

b. Caractéristiques entrantes. Elles s'écrivent : $w_1 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + \sqrt{\frac{g}{h_0}} h$, $w_2 = \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau}$ et $w_3 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - \sqrt{\frac{g}{h_0}} h$, associées aux valeurs propres $\lambda_1 = \mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n} + c$, $\lambda_2 = \mathbf{u}_0 \cdot \boldsymbol{\tau}$ et $\lambda_3 = \mathbf{u}_0 \cdot \mathbf{n} - c$ respectivement.

Sur la partie sortante Γ_{out} , quatre types de conditions sont possibles :

- a. Neumann homogène : $\frac{\partial h}{\partial \mathbf{n}}|_{\Gamma_{out}}(t) = 0$, $\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{n}}|_{\Gamma_{out}}(t) = 0 \quad \forall t$
- b. Hauteur d'eau imposée : $h|_{\Gamma_{out}}(t) = z_{out}(t) - z_b|_{\Gamma_{out}}$, $\frac{\partial(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} + 2c)}{\partial \mathbf{n}}|_{\Gamma_{out}}(t) = 0 \quad \forall t$. Cette condition ne pourra être imposée seulement en cas d'écoulement sous-critique.
- c. Caractéristiques entrantes. Ce cas est analogue à celui présenté précédemment pour Γ_{in} .
- d. Courbe de tarage. Condition usitée par les hydrauliciens. Une courbe de tarage est une relation entre le débit normal $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}$ et la hauteur d'eau h : $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = f(h)$.

Couplage 1D-2D.

L'information à transmettre d'un modèle 1D global vers un modèle 2D local, Fig. 5.1, consiste à définir les conditions aux limites de ce dernier. Sachant que le modèle 2D est un problème aux frontières ouvertes et que ses équations sont de nature hyperboliques, il semble nécessaire de raisonner en terme de caractéristiques entrantes, voir à ce sujet [5].

L'information du modèle 2D à transmettre au modèle 1D consiste à définir le terme d'apport latéral q_n , voir [FeMaMo07].

Dans le cadre de schémas volumes finis, cela peut être vu de manière équivalente en termes de flux numériques. Dans le cas (non réalisé en pratique) de grilles spatio-temporelles 1D et 2D identiques (même pas de temps, même pas d'espace), et si le canal principal 1D est rectiligne parallèle à l'axe x , cela s'écrit :

$$q_n = q_n^{(1)} + q_n^{(2)} = \Xi_i^{(1)}[1] + \Xi_i^{(2)}[1] \quad (5.3)$$

où $\Xi^{(1)}[1]$ et $\Xi^{(2)}[1]$ désignent les deux premières composantes (sur trois) des deux flux numériques 2D relatifs aux bords latéraux du canal.

Dans le cas plus réaliste où les grilles spatio-temporelles 1D et 2D sont discordantes (ratio de l'ordre de 100 en espace et en temps), on peut alors définir de manière semblable les apports latéraux à partir des flux numériques 2D (issus du solveur VF) à l'aide d'opérateurs de projections (spatiales) et interpolation (temporelle).

5.1.2 Solveur direct

Nous présentons les schémas volumes finis considérés en pointant les difficultés liées au "terme source" de topographie et à la notion de schémas bien équilibrés. Nous suivons l'approche de [8].

Nous considérons des maillages 2D mixtes triangles - quadrilatères, et nous discrétisons les deux modèles 1D et 2D par des schémas volumes finis : solveur de Riemann approché HLL pour le 1D et HLLC pour le 2D, voir e.g. [27]. Nous exposons la méthode dans le cas 2D seulement (sachant que cela se ramène à

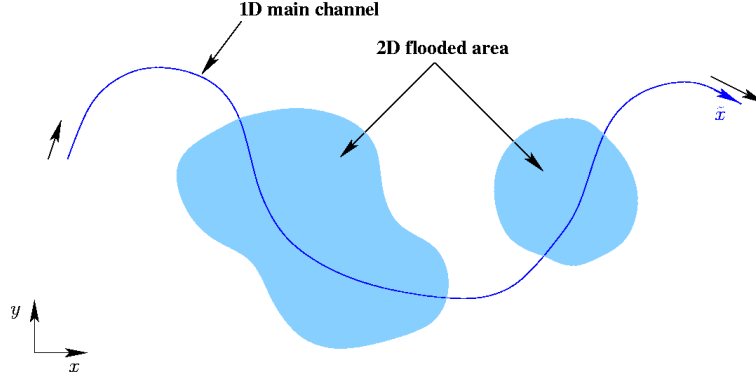


FIG. 5.1 – Couplage modèle 1D global - modèles 2D locaux

des problèmes de Riemann locaux 1D).

Schéma volumes finis standard. On intègre l'équation sur une cellule K_i du maillage, on applique le théorème de divergence, on utilise la propriété d'invariance par rotation des équations [27], on obtient :

$$\int_{K_i} \partial_t U \, dx + \sum_{j=1}^{N_i} \int_{E_{ij}} T_{ij}^{-1} F_1(T_{ij} U) \, ds = \int_{K_i} [S_g + S_f](U) \, dx \quad (5.4)$$

où N_i est le nombre d'arêtes de K_i (3 or 4), E_{ij} désigne l'arête et T_{ij} est la rotation d'angle θ_{ij} entre E_{ij} et l'axe horizontal.

Pour la cellule K_i , on définit les valeurs moyennes des termes sources et de la solution ainsi : $U_i = \frac{1}{|K_i|} \int_{K_i} U \, dx$. Avec le schéma temporel Euler explicite, cela donne :

$$U_i^{m+1} = U_i^m - \frac{\Delta t}{|K_i|} \sum_{j=1}^{N_i} (T_{ij}^{-1} \circ F_1^m \circ T_{ij})(U_i, U_j) + \Delta t (S_g^m)_i + \Delta t (\widetilde{S_f^{m+1}})_i \quad (5.5)$$

La difficulté réside dans le calcul du flux numérique $(F_1^m \circ T_{ij})(U_i, U_j)$.

Le terme de friction $\widetilde{S_f^{m+1}}$ est traité semi-implicitement ; pour la clarté de l'exposé, désormais nous le négligeons.

Cas homogène. Considérons le cas homogène (ie pas de terme de topographie : $S_g = 0$). En posant, $V = T_{ij} U$ on a : $V = [h, q_{\vec{n}}, q_{\vec{\tau}}]^T$ et $F_1(V) = [q_{\vec{n}}, q_{\vec{n}}^2/h + gh^2/2, q_{\vec{n}} q_{\vec{\tau}} h]^T$. Le schéma volumes finis 2D se ramène aux problèmes de Riemman locaux 1D :

$$\partial_t V + \partial_n F_1(V) = 0$$

avec $V(x, 0) = V_L$ si $x_{\vec{n}} < 0$; $V(x, 0) = V_R$ si $x_{\vec{n}} > 0$ où les indices L et R désignent les valeurs à gauche et à droite respectivement.

Analogie St-Venant 2D et St-Venant 1D avec polluant. Remarquons qu'en utilisant les propriétés d'invariance des équations de St-Venant 2D (et en négligeant

les termes tangentielle au bords des cellules, flux normaux seulement), nous nous sommes ramenés à des problèmes de Riemann locaux 1D dans la direction de la normale aux arêtes. Et dans ce cas, les équations 2D St-Venant deviennent exactement les équations 1D St-Venant faiblement couplées avec l'équation de transport linéaire (de polluant par exemple).

Cas non homogène et schéma volumes finis bien équilibré. Dans le cas non homogène, ($S_g \neq 0$), nous cherchons à définir un schéma volume fini "bien équilibré". Plus précisément, nous suivons l'approche de [8] qui conduit à des schémas "asymptotiquement bien équilibrés" au sens où ils préservent toute solution stationnaire au second ordre au moins (et pas seulement l'eau au repos). On écrit le schéma volumes finis sous la forme suivante. Pour une cellule $(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$ (notations 1D) :

$$\frac{V_i^{n+1} - V_i^n}{\Delta t} + \frac{F_{S,i+1/2}^n - F_{S,i-1/2}^n}{\Delta x} = S_i^n, \quad (5.6)$$

où S_i^n est une approximation centrée du terme source S en $x = x_i$: $S_i = (S_{i-1/2} + S_{i+1/2})/2$ et $F_{S,i+1/2}^n$ est une approximation de $F(V(x_{i+1/2}, t^n))$ où V est solution du problème de Riemann non-homogène :

$$\partial_t V + \partial_n F(V) = S$$

avec V_L et V_R comme conditions à gauche et à droite. C'est à dire que le terme source est centré et le flux numérique $F_{S,i+1/2}^n$ tient compte du terme de topographie S_g . Autrement dit, nous ne suivons pas l'approche qui consiste à garder le flux numérique du problème homogène puis à décentrer le terme source comme cela est fait par exemple dans [4].

Dans [8], les auteurs présentent un schéma HLL bien équilibré (au sens précédent) pour les équations de St-Venant 1D. Dans le cas 2D (ou 1D avec polluant), le schéma HLL qui ne tient pas compte de la valeur propre intermédiaire $\lambda_2 = u$ présente l'inconvénient d'être diffusif. Le schéma HLLC est une extension du schéma HLL, [27], qui prend en compte la vitesse d'onde intermédiaire λ_2 . A partir de la formulation (5.6) et du schéma HLL bien équilibré de [8], on peut naturellement définir un schéma HLLC bien équilibré. En effet, si on note F_S^{hll} le flux numérique HLL en présence du terme source, alors il suffit de poser :

$$[F_S^{hllc}]_k = [F_S^{hll}]_k \text{ pour } k = 1, 2 \text{ et } [F_S^{hllc}]_3 = [F_S^{hll}]_1 \cdot u^*$$

avec $u^* = (V_L)_3$ si $S^* \geq 0$ et $u^* = (V_R)_3$ si $S^* < 0$; où S^* est la vitesse d'onde intermédiaire à l'interface. On obtient alors un schéma HLLC bien équilibré au sens précédent. Par ailleurs, la définition de S^* suivante, voir [FeBrMo07] :

$$s^* = \frac{s_L q_R - s_R q_L - s_L s_R (h_R - h_L - \chi_2)}{h_{i+1}(u_{i+1} - s_R) - h_i(u_i - s_L)}$$

conduit à une onde intermédiaire consistante avec u . La preuve de ces deux résultats s'appuie sur le fait que toute solution stationnaire vérifie q constante. De plus, $(h_R - h_L - \chi_2) = \mathcal{O}(h^3)$ pour toute solution stationnaire, et ce terme s'annule pour l'eau au repos.

Traitement du front sec. Dans le cas du front sec, les vitesses d'onde précédentes s_L et s_R sont non définies, voir [27, p. 197]. Nous employons alors une définition de [27]. Cependant, cette méthode qui marche bien en l'absence de terme de topographie, conduit à des instabilités en présence de la topographie. Nous introduisons alors classiquement une hauteur minimale d'eau h_ϵ , valeur en dessous-laquelle la cellule est considérée comme sèche.

Benchmarks et comparaison de solveurs. Nous renvoyons à [HoMaMoLa07-b] [FeMaMo-b] pour la présentation de cas tests et comparaisons de différentes solutions.

Cas du modèle couplé 1D - 2D

Dans le cas du couplage des modèles 1D -2D, à priori le problème d'un schéma volumes finis global bien équilibré se pose à nouveau. En effet, du fait que le modèle 2D apporte les termes d'apports latéraux au modèle 1D, une correction supplémentaire devrait être effectuée pour bien équilibrer le schéma 1D qui comporte les correctifs issus du 2D. Cette question-ci est actuellement en cours d'étude, voir [FeMaMo07]

5.1.3 Principes de l'assimilation variationnelle de données

Le logiciel DassFlow a été spécialement développé pour l'analyse de sensibilité et l'assimilation variationnelle de données (méthode également appelée 4D-var). L'assimilation variationnelle de données est basée sur la théorie du contrôle optimal, voir [18], [20]. Brièvement, la méthode consiste à calculer un vecteur de contrôle optimal au sens où il minimise une fonction coût qui mesure l'écart entre des observations disponibles et l'état simulé du système.

Dans le cas de l'hydraulique fluviale, le vecteur de contrôle peut inclure le débit entrant, les coefficients de Manning, la topographie ou encore la condition initiale. Bien entendu, en pratique seule une partie de ces paramètres peuvent être identifiés pour une même configuration. Les paramètres types à calibrer sont les coefficients de Manning définis par zone (qui dépendent potentiellement de l'écoulement), l'onde de crue entrante, bien sûr l'état initial (bien que moins important que pour l'atmosphère par exemple), et aussi une topographie (du moins localement).

On définit la fonction d'observation $H(\mathbf{k}; W)$ où W est l'état du système et $\mathbf{k}$ la variable de contrôle. La fonction coût s'écrit $J(\mathbf{k}) = H(\mathbf{k}; W)$ et le problème de contrôle optimal s'écrit :

$$\min_{\mathbf{k}} J(\mathbf{k}) \quad (5.7)$$

Du fait du coût élevé (en terme de temps CPU) de chaque évaluation de la fonction coût, nous nous tournons vers des algorithmes de minimisation locale basés sur l'information du gradient (algorithme de descente quasi-Newton tel que BFGS). Le gradient de la fonction coût est alors classiquement calculé en

introduisant les équations adjointes.

Les observations. Comme bien des écoulements géophysiques, les observations disponibles en hydraulique fluviale sont généralement très peu denses et hétérogènes. Les mesures in-situ les plus classiques (et les plus faciles à assimiler) sont les hauteurs d'eau mesurées aux stations de jaugeage. Ces mesures peuvent être considérées comme quasi-continues en temps mais ne sont que très peu denses en espace (au mieux 2-3 stations pour une portion de rivière instrumentée). Les mesures de vitesse et/ou de débit sont très incertaines et tout particulièrement en cas d'événement exceptionnel (crues notamment). D'ailleurs lors de grandes crues, ces stations ne donnent généralement plus d'informations exploitables. Les laisses de crues après un événement ne sont que très peu utilisables dans les modèles car liées à des maximums d'écoulements très localisés. On pense alors à exploiter d'éventuelles données de télédétection : image satellite (si disponible au moment requis...), voir [15] [16], images aériennes, mais aussi caméra vidéo au-dessus de l'écoulement, voir [9], ou encore GPS embarqués dans des flotteurs dérivants, voir [2]. A noter que dans le cas d'images (satellites notamment), la densité d'observation est alors dense en espace mais ponctuelle en temps. Nous nous intéressons par la suite à ce nouveau type de données potentielles.

Exemple de fonction coût. Supposons des hauteurs et des débits disponibles en certains temps et certains points d'espace. Ces observations (classiques et qualifiées d'eulériennes par la suite) permettent de définir le premier terme de la fonction coût :

$$J_{obs}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left(\int_0^T \|C_h h(\mathbf{k}, t) - h^{obs}(t)\|^2 + \int_0^T \|C_q \mathbf{q}(\mathbf{k}, t) - \mathbf{q}^{obs}(t)\|^2 \right) dt$$

où C_h et C_q sont simplement des opérateurs de restrictions.

Vient ensuite de nécessaires termes de régularisation (type Tikhonov). Par exemple, dans le cas où l'on contrôle le débit entrant, on définit :

$$J_{reg}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \|\partial_{tt}^2 q_{in}\|^2$$

Nous avons remarqué qu'à partir d'observations de hauteur seulement (ie la première variable sur les trois pour St-Venant 2D), le processus de minimisation est grandement amélioré si l'on définit un terme coût supplémentaire relatif aux deux autres composantes de l'état, à savoir le débit. Plus précisément, on mesure la différence des débits au sein de chaque élément ainsi :

$$J_{flux}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \int_0^T \|G(\mathbf{k}, t) - G^{obs}(\mathbf{k}, t)\|^2 dt$$

où

$$G(\mathbf{k}, t) - G^{obs}(\mathbf{k}, t) = \sum_{j=1}^{N_i} T_{ij}^{-1} \circ \left([F_S]_1(V_L, V_R) - [F_S]_1(\tilde{V}_L, V_R) \right)$$

avec $[F_S]_1(U_L, U_R)$ la première composante du flux numérique du schéma volumes finis et $\tilde{U}_L = [h^{obs}, h^{obs}u, h^{obs}v]^T$ un flux mixte observé - calculé.

Dans le cas présent, la fonction coût total s'écrit :

$$J(\mathbf{k}) = \alpha_{obs} J_{obs}(\mathbf{k}) + \alpha_{flux} J_{flux}(\mathbf{k}) + \alpha_{reg} J_{reg}(\mathbf{k}) \quad (5.8)$$

où les coefficients α_{obs} , α_{flux} et α_{reg} sont à définir.

Algorithmique globale d'optimisation. Le processus de contrôle optimal est similaire à celui du chapitre traitant d'optimisation, hormis le fait qu'à présent il s'agit de contrôle optimal de systèmes instationnaires. L'algorithmique globale est représentée sur la figure 5.2. A noter que le modèle adjoint est rétrograde en temps ; par ailleurs la différence entre état simulé et observations se trouvent dans le terme source. Comme pour l'optimisation de forme le minimiseur local est celui de Gilbert-Lemaréchal, [13] (basé sur l'algorithme de Quasi-Newton BFGS). Le code adjoint est obtenu directement en différenciant le code direct (et non pas à partir des équations adjointes discrétisées). Nous présentons dans le paragraphe suivant le lien entre les équations adjointes et le code adjoint généré par l'outil de différenciation automatique Tapenade [37].

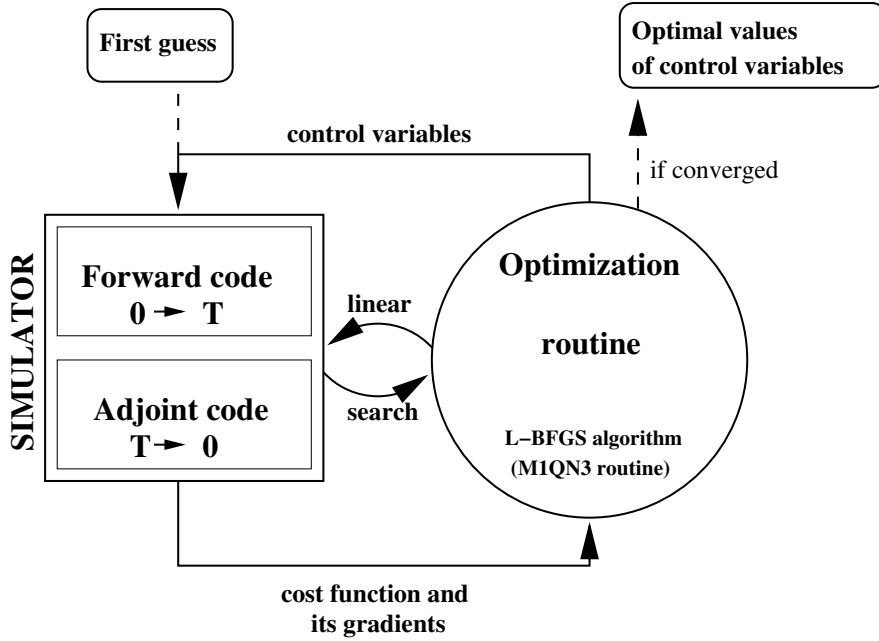


FIG. 5.2 – Algorithme d'assimilation variationnelle de données (4D-Var).

5.1.4 Des équations adjointes au code adjoint différencié automatiquement

Tout d'abord rappelons que les équations adjointes sont définies à partir de l'adjoint de l'opérateur linéaire tangent ; ce sont donc bien sûr des équations linéaires.

Trois approches sont envisageables pour calculer l'état adjoint (solution des équations adjointes) et donc le gradient de la fonction coût qui en découle. 1) La première qui est la plus naturelle pour un mathématicien mais aussi la plus synthétique, consiste à écrire les équations adjointes (continues), puis discrétiser ces équations via un schéma numérique adéquate. On obtient ce que l'on appelle le gradient continu discrétisé. 2) La seconde (faisant appel à du calcul différentiel en dimension finie seulement) consiste à construire l'opérateur adjoint au niveau discret ie à partir des équations discrètes du modèle direct. On obtient alors le gradient discret. 3) La troisième possibilité consiste à différencier non plus les équations mais directement le code de calcul résolvant le modèle direct (en y incluant la fonction coût). Cette dernière approche présente l'inconvénient de ne plus bien percevoir le lien entre les équations continues et les calculs effectués (c'est ce que nous proposons d'éclaircir dans ce qui suit). Par contre, dans le cas où les différents gradients envisageables diffèrent suffisamment (les erreurs portées par les différents gradients sont nécessairement différentes) et pour un espace de contrôle de taille importante, il semble plus cohérent de calculer le gradient de la fonction coût effectivement calculé (ie celui issu de la différenciation du code source).

Aussi, si le code direct a été initialement conçu pour être différencié "automatiquement" par un outil tel que Tapenade [37] (transformation source-à-source pour des codes Fortran 95), l'usage d'un tel outil de différenciation automatique s'avère être d'une très grande utilité.

Lien entre un code adjoint généré automatiquement et le gradient.

Les éclaircissements qui suivent sont intégralement tirés de la thèse de M. Honnorat [14].

Soit $\mathcal{K}$ l'espace des variables de contrôle et $\mathcal{Y}$ l'espace de la réponse du modèle direct. Dans notre cas, on a : $\mathbf{k} = (y_0, q_{in}, z_{out}, n, z_b)^T$ et $Y = (y, j)^T$. A noter, que nous considérons (et cela est primordiale pour la suite) que le calcul de la fonction coût fait partie de la réponse du modèle direct. Nous pouvons représenter le modèle direct (ainsi que le code de calcul associé) ainsi : $\mathcal{M} : \mathcal{K} \longrightarrow \mathcal{Y}$.

Le modèle linéaire tangent s'écrit alors : $\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial \mathbf{k}}(\mathbf{k}) : \mathcal{K} \longrightarrow \mathcal{Y}$. Il prend en entrée $d\mathbf{k} \in \mathcal{K}$, variation sur le vecteur de contrôle, et fournit en sortie :

$$dY = \frac{\partial \mathcal{M}}{\partial \mathbf{k}}(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k}$$

Le modèle adjoint est défini à partir de l'adjoint de l'opérateur linéaire tangent : $\left(\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial \mathbf{k}}(\mathbf{k})\right)^* : \mathcal{Y}' \longrightarrow \mathcal{K}'$. Il prend en entrée une certaine variable $dY^* \in \mathcal{Y}'$ et fournit en sortie la "variable adjointe" $d\mathbf{k}^* \in \mathcal{K}'$:

$$d\mathbf{k}^* = \left(\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial \mathbf{k}}(\mathbf{k})\right)^* \cdot dY^*$$

Montrons alors quel est le lien entre la variable adjointe $d\mathbf{k}^*$ et le gradient de j recherché.

Par définition de l'adjoint nous avons :

$$\left\langle \left(\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial \mathbf{k}}\right)^* \cdot dY^*, d\mathbf{k} \right\rangle_{\mathcal{K}' \times \mathcal{K}} = \left\langle dY^*, \left(\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial \mathbf{k}}\right) \cdot d\mathbf{k} \right\rangle_{\mathcal{Y}' \times \mathcal{Y}} \quad (5.9)$$

ce qui se ré-écrit :

$$\langle d\mathbf{k}^*, d\mathbf{k} \rangle_{\mathcal{K}' \times \mathcal{K}} = \langle dY^*, dY \rangle_{\mathcal{Y}' \times \mathcal{Y}}. \quad (5.10)$$

Si nous posons $dY^* = (0, 1)^T$ et en notant $d\mathbf{k} = (\delta y_0, \delta n, \delta z_b, \delta q^{in})^T$, on obtient :

$$\left\langle \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} dy^* \\ dJ^* \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathcal{Y}' \times \mathcal{Y}} = \left\langle \begin{pmatrix} \delta y_0^* \\ \delta n^* \\ \delta z_b^* \\ \delta q^{in*} \\ \delta z_{out}^* \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \delta y_0 \\ \delta n \\ \delta z_b \\ \delta q^{in} \\ \delta z_{out} \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathcal{K}' \times \mathcal{K}}$$

Par ailleurs, par définition :

$$dJ = \frac{\partial J}{\partial y_0}(\mathbf{k}) \cdot \delta y_0 + \frac{\partial J}{\partial n}(\mathbf{k}) \cdot \delta n + \frac{\partial J}{\partial z_b}(\mathbf{k}) \cdot \delta z_b + \frac{\partial J}{\partial q_{in}}(\mathbf{k}) \cdot \delta q_{in} + \frac{\partial J}{\partial z_{out}}(\mathbf{k}) \cdot \delta z_{out}$$

Finalement, la variable adjointe $d\mathbf{k}^*$ (réponse du code adjoint avec $dY^* = (0, 1)^T$ en entrée) correspond aux dérivées partielles recherchées de la fonction coût J :

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial y_0}(\mathbf{k}) &= y_0^* & \frac{\partial J}{\partial n}(\mathbf{k}) &= n^* \\ \frac{\partial J}{\partial z_b}(\mathbf{k}) &= z_b^* & \frac{\partial J}{\partial q_{in}}(\mathbf{k}) &= q_{in}^* & \frac{\partial J}{\partial z_{out}}(\mathbf{k}) &= z_{out}^* \end{aligned}$$

5.2 Démonstration des potentialités sur des données réelles (mais standards)

Ce paragraphe est tiré du proceeding [HoLaLeDiMo06-b] et de l'article [LaMo07] ; voir également le rapport de recherche [HoMaMoLa07-b].

Nous montrons dans ce paragraphe les potentialités de la méthode d'assimilation variationnelle de données mais aussi celles du logiciel DassFlow dans le cas d'écoulements 2D avec données synthétiques ou réelles. Les observations sont standards dans le sens où l'on dispose de hauteurs d'eau en quelques points d'espace et continues en temps.

Nous traitons deux problèmes inverses types : 1) la calibration des coefficients de friction (Manning) du modèle St-Venant 2D en présence de débordement ; 2) l'identification des débits aux bords de plusieurs branches d'une rivière.

Le premier exemple traite d'un cas test fictif mais présentant les mêmes caractéristiques que le cas test réel de la Moselle présenté dans un prochain paragraphe (image satellite). Les données sont alors synthétiques ie il s'agit d'expériences jumelles : les observations sont créées via un premier run du modèle direct. Ces observations sont donc parfaites et entachées d'aucune erreur, ce qui simplifie le problème inverse traité. En effet, dans le cas d'écoulements réels, le modèle ne représente qu'approximativement (voire mal) la réalité de l'écoulement. Une difficulté majeure est alors de comparer les observations (réelles) disponibles avec l'état simulé issu du modèle "simpliste".

Le deuxième exemple traite de données réelles : la rivière des perles en Chine (aux environs de Hong-Kong). Ce cas test réel a nécessité l'interfaçage du code de calcul avec des outils logiciels SIG performants, des maillages mixtes triangles - quadrangles non triviaux et surtout un solveur direct robuste qui reste stable en présence de grandes variations de topographie. L'intérêt principal d'un tel cas test concerne essentiellement ces différents aspects.

Identification des coefficients de Manning

Nous présentons le cas test "jouet" considéré, cas test que nous reprendrons par la suite pour d'autres études. La configuration est celle d'un lit majeur (la rivière) entouré d'une plaine d'inondation potentielle, Fig. 5.3. On impose en entrée une onde qui crée un débordement et l'on considère comme seules observations les hauteurs d'eau à la station 1 (en tout temps) Fig. 5.4(a). Tous les paramètres d'entrée du modèle sont connus sauf les coefficients de Manning n . On définit classiquement ces coefficients selon plusieurs "grandes zones" ("land-uses"), Fig. 5.5. Les valeurs données à priori ("first guess") sont prises toutes égales : $n = 0.010$ dans les cinq zones. Le tableau suivant montre qu'après optimisation, nous retrouvons parfaitement l'ensemble des cinq valeurs recherchées.

Zone	Valeur à retrouver	Valeur identifiée
Lit majeur	0.025 (graviers)	0.025000487
Partie droite du lit	0.066 (bushes)	0.065991635
Partie gauche du lit	0.04 (petite végétation)	0.039996868
Environ de la station 1	0.03 (patûrages, champs)	0.029999658
Environ bord sortant	0.10 (urbanisme)	0.10001384

Des résultats numériques similaires ont été obtenus avec des données réelles pour la configuration de la rivière Moselle (nord-est de la France), voir [LaMo07].

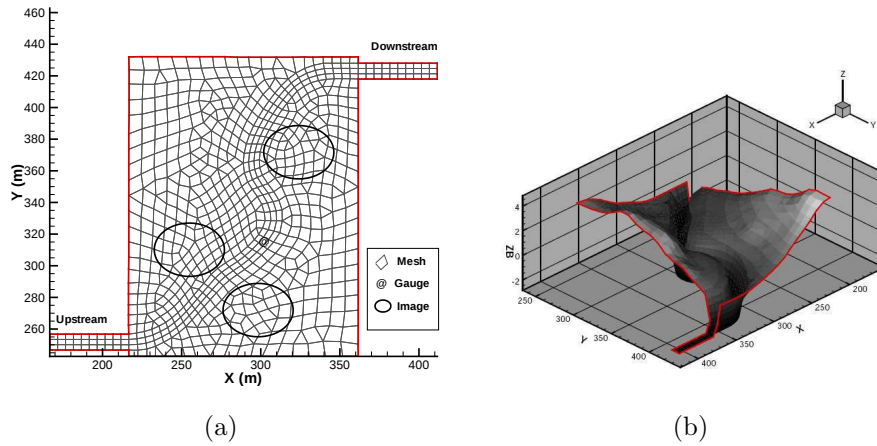


FIG. 5.3 – Cas test jouet : (a) maillage (b) bathymétrie

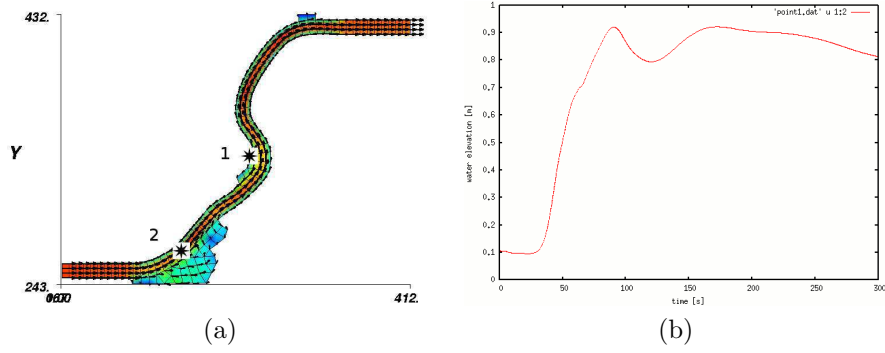


FIG. 5.4 – Cas test jouet : (a) Stations de mesures 1 et 2 (b) Observations : hauteurs d'eau en station 1

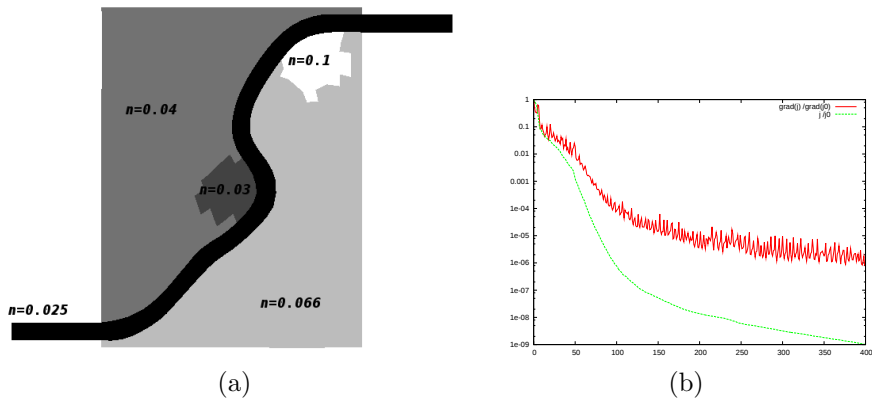


FIG. 5.5 – Cas test jouet : (a) Coefficients Manning (b) Function coût et gradient vs itérations

Identification du débit entrant : rivière des perles

On considère la portion de rivière indiquée sur la figure 5.6 (G). L'écoulement aux environs des stations de mesures A, B et C, est principalement régi par les marées (débits entrants - sortants en BC_6). On considère le problème inverse suivant : étant données les hauteurs d'eau h^{obs} mesurées chaque heure aux stations A, B et C, nous cherchons à identifier les débits aux bords en BC_1 , BC_2 et BC_6 ainsi que l'état initial de l'écoulement. Les valeurs choisies à priori ("first guess") sont des estimations grossières de ces quantités. La simulation porte sur une période de temps de 36 heures.

Un premier calcul de gradient montre que les observations aux trois stations de mesures sont beaucoup plus sensibles à la donnée au bord en BC_6 que celles en BC_1 et BC_2 . Après optimisation, nous retrouvons parfaitement la hauteur d'eau en BC_6 , tandis que les hauteurs d'eau en BC_1 et BC_2 sont approximativement retrouvées (sensibilité moindre), Fig. 5.6(D). Aussi, nous montrons sur la figure 5.6 (D) qu'après optimisation, l'écoulement aux stations de mesure correspond bien sûr parfaitement aux observations.

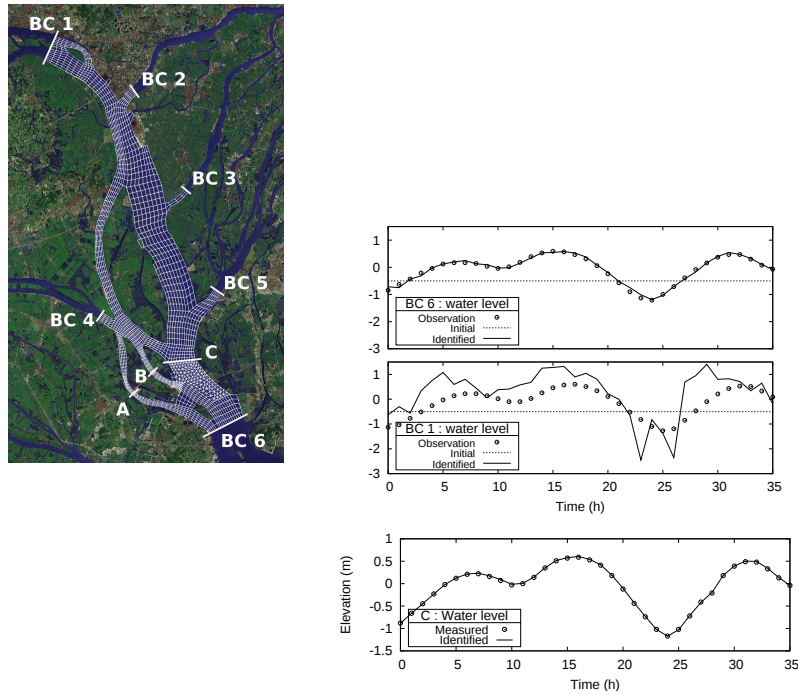


FIG. 5.6 – Rivière des perles : (G) maillage (D) hauteurs identifiées en BC_6 (haut), BC_1 (milieu), état simulé et observations en C (bas)

5.3 Données spatialement distribuées (une image satellite)

Ce paragraphe est tiré des articles [LaMo07] [HoLaMoPuPa07] et des proceedings [HoLaLeDiMo07-b] [HoLaMoPu07-b].

Nous nous posons la question des potentialités d'une image satellite pour caler un modèle d'écoulement de surface lors d'une crue (St-Venant 2D). Lorsque l'on regarde une telle image "brute", Fig. 5.13, la tâche d'eau nous montre clairement que bien des champs, partie d'une ville etc (lit majeur) sont sous les eaux. Cependant, le passage de la perception visuelle à la quantification de l'information dans un modèle d'écoulement est loin d'être immédiate... C'est cette question-là que nous étudions dans un cas bien précis (crue de la Moselle de février 97).

Notons d'abord qu'obtenir une image satellite lors d'un tel évènement est loin d'être systématique. Ensuite le premier travail à mener est l'extraction d'information utilisable et "fiable" à partir de l'image satellite brute. Ce travail a été intégralement effectué par R. Hostache et C. Puech [15] [16].

Les observations issues de ce travail deviennent alors du point de vue de l'assimilation de données, des observations relativement standards. En effet, ce sont des hauteurs d'eau spatialement distribuées, voir Fig. 5.13. Elles ont pour seule particularité d'être ponctuelle en temps et relativement dense en espace (ce qui est le contraire des mesures de hauteurs in-situ dans le lit majeur). Pour l'évènement considéré, les hauteurs issues de l'image satellite sont complétées par d'autres mesures de hauteurs in-situ mais en une seule station de mesure et en début et fin d'évènement seulement, voir Fig. 5.14. C'est à dire que les mesures sont absentes au cours de la période de crue la plus importante.

Etant données la lourdeur des données et des calculs, et aussi du fait que nous ne connaissons à priori pas ce que l'on peut espérer de telles observations, nous commençons par considérer un évènement fictif similaire basé sur la configuration jouet précédente.

5.3.1 Investigation numérique sur l'apport d'une image satellite

Nous considérons le cas test jouet précédent, Fig. 5.3, avec des observations "synthétiques" (créées par le modèle).

Une image "parfaite" comme seule observation. Le premier problème inverse considéré est le suivant. Etant donnée comme unique observation une image "parfaite" (ie hauteurs non entachées d'erreur et disponibles en tout point du domaine géométrique), nous cherchons à identifier le débit entrant ayant conduit à un tel débordement. L'ensemble des autres paramètres (condition initiale, Manning etc) est donné. Ce premier test nous permet d'une part de mettre en évidence l'apport du terme supplémentaire J_{flux} dans la fonction coût, voir (5.8), et aussi d'estimer l'apport potentiel d'une image pour la calibration

du modèle.

Pour mesurer l'apport de J_{flux} , nous supprimons le terme de régularisation : $\alpha_{reg} = 0$ dans (5.8). Les expériences numériques montrent alors que ce terme de flux améliore grandement la qualité du processus d'identification, voir Fig. 5.7 (J_{flux} apporte de l'information supplémentaire sur le flux).

Ce premier cas test montre également qu'avec une seule donnée image (parfaite et complète rappelons-le), le débit entrant passé semble identifiable, Fig. 5.7. Bien sûr, après le temps de l'image ($T_{imag} = 120s$) le débit ne peut plus être identifié, puisque plus aucune observation n'est disponible.

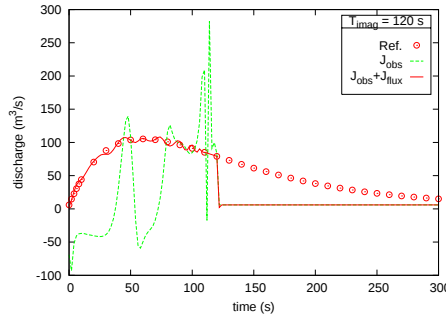


FIG. 5.7 – Identification de Q_{in} avec une image parfaite comme seule observation. Apport de J_{flux} .

Données partielles semblables au cas Moselle. Nous considérons à présent des observations semblables à celles du cas réel de la Moselle, à savoir nous disposons d'une image partielle (les 3 zones indiquées sur la Fig. 5.3), et d'un hydrographe partiel pris à la station située à peu près au milieu de l'écoulement, Fig. 5.3 et 5.8.

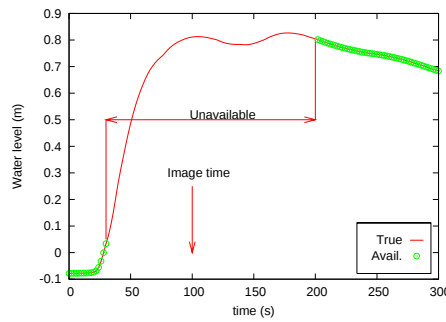


FIG. 5.8 – Cas test jouet : observations disponibles.

Dans les légendes des figures, on note "TS" (pour "time series"), les résultats obtenus avec l'hydrographe comme seule observation, et par "IMAG" lorsque l'on observe en plus une image partielle.

Dans un premier temps, on ne considère à nouveau pas le terme de régularisation ($\alpha_{reg} = 0$ dans (5.8)), ce qui permet de mieux mettre en évidence le temps de propagation de l'information entre l'onde entrante et le temps d'observation de l'image (vitesse d'onde $(u + c)$). Dans notre cas précis, l'image ($T_{imag} = 100s$ ou $T_{imag} = 120s$) permet d'identifier potentiellement l'onde entrante durant les 42s passées, voir Fig. 5.9.

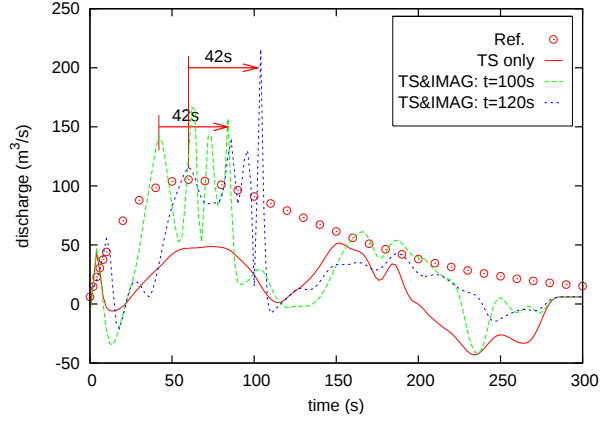


FIG. 5.9 – Débit entrant identifié. Pas de régularisation. Période potentiellement identifiable avec une image.

Dans l'expérience suivante on ré-introduit le terme de régularisation, et nous identifions l'onde entrante avec une image prise soit à $T_{imag} = 100s$ soit à $T_{imag} = 120s$, voir Fig. 5.10.

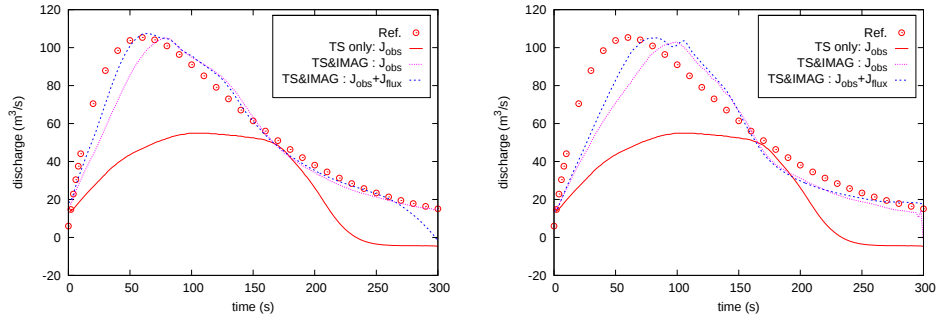


FIG. 5.10 – Débit entrant identifié. (G) $T_{imag} = 100s$ (D) $T_{imag} = 120s$

Cette dernière expérience montre que : 1) étant données les mesures partielles à la station, l'image apporte une information complémentaire primordiale ; 2) le terme supplémentaire J_{flux} améliore le processus d'identification.

Décomposition temporelle avec recouvrement

Le modèle adjoint, rétrograde en temps, requiert la valeur de l'état (direct) en tout temps, ce qui à priori implique la mise en mémoire de l'intégralité de l'état du système et ceci pour tout temps (ce stockage mémoire n'est en fait pas total du fait que lors de la différenciation du code source direct, Tapenade élabore une stratégie mixte stockage - re-calcul, "checkpointing" and "snapshots", voir [37]). Les équations de St-Venant n'ont beau être que 2D au plus, les temps importants de simulation considérés requièrent une mémoire extrêmement importante. Une des manières de remédier à ce problème est d'élaborer une stratégie temporelle lors de l'assimilation de données, voir par exemple [22]. Nous abordons ici une stratégie similaire dans le sens où nous cherchons à découper la période de simulation en plusieurs sous-domaines temporels. Dans le cas de l'identification de l'onde de crue entrante, le temps de propagation de l'onde du point d'entrée au point d'observation nous conduit à découper la période de simulation en des sous-périodes se recouvrant d'au moins autant ce temps de propagation de l'information (vitesse d'onde $(u + c)$). Nous montrons sur la figure 5.12 les erreurs obtenues sur l'état du système après optimisation, avec ou sans décomposition temporelle et surtout avec ou sans recouvrement. Nous retrouvons alors le fait qu'une décomposition temporelle sans recouvrement ne peut conduire à une bonne identification.

Du point de vue mémoire, bien entendu la mémoire requise est diminuée proportionnellement à la durée des sous-périodes. Quant au temps CPU, ce dernier devrait à priori croître proportionnellement au temps supplémentaire dû aux recouvrements. Nous avons remarqué lors de nos expérimentations numériques qu'il n'en était en fait rien. En effet, le temps CPU total restait quasi-constant malgré les recouvrements (à critère de convergence donné). Cela montre que dans ce cas précis, les décompositions temporelles (de l'ordre de 4) avec (faibles) recouvrements conduisent à un processus de minimisation plus rapide en termes d'itérations.

5.3.2 Application à un cas réel : crue de la Moselle

Nous appliquons à présent les méthodologies précédentes aux données réelles de la crue de la Moselle de février 1997. Les observations disponibles ont déjà été décrites précédemment ; elles sont schématisées sur les figures 5.14 (G) et 5.13. Les temps de simulation considérés sont de 66 heures (du 25 fév. 12h00, début de la crue, au 28 fév. 6h00 période de fin de crue).

Identification des coefficients de Manning. Nous effectuons le même type d'étude que précédemment lors du cas test jouet mais avec les données réelles disponibles. Notre premier objectif est d'exploiter ces observations pour calibrer au mieux les coefficients de friction n (Manning, paramètres supposés indépendant du temps et de l'évènement). Les valeurs considérées à priori ("first guess") sont celles d'un hydraulicien numéricien confirmé et habitué à effectuer un travail de calibrage "à la main" (via essais-erreurs).

Partant de là, une première analyse de sensibilité (calcul du gradient) montre que la valeur primordiale est celle du lit mineur tandis que celles du lit majeur (étendue inondée) n'interviennent que très peu sur la qualité du résultat (débit en sortie par exemple). Nous avons pour cela considéré de 1 à 10 zones

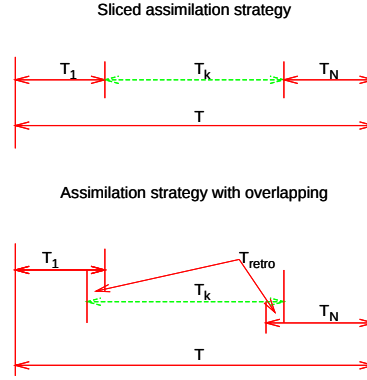


FIG. 5.11 – Décomposition temporelle : a) sans recouvrement ; b) avec recouvrement (période de retour T_{retro})

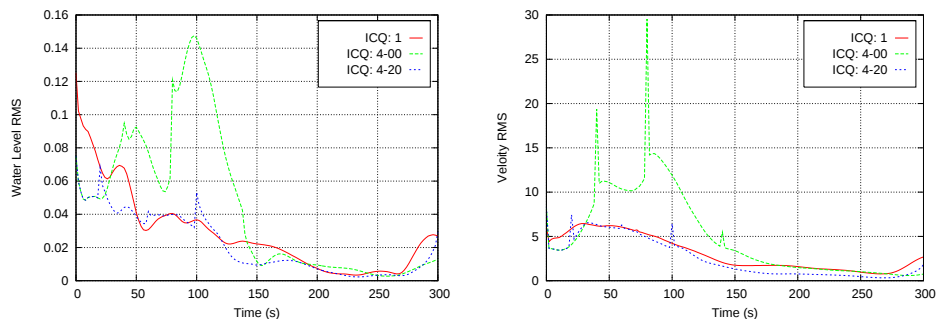


FIG. 5.12 – Identification de $Q_{in}(t)$ et décomposition temporelle. Erreur RMS pour : (a) h ; (b) $\|u\|$. Assimilation sans décomposition (ICQ : 1) ; avec décomposition sans recouvrement (4-00) et avec recouvrement (4-20).

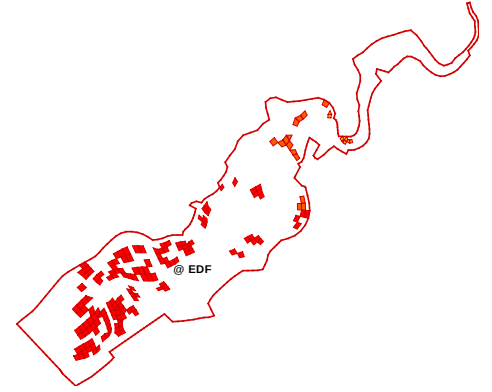
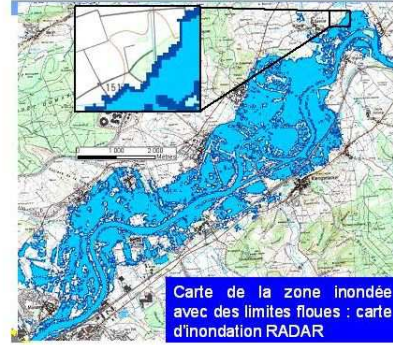


FIG. 5.13 – Image satellite (G) "brute" (D) après extraction de hauteurs d'eau "fiabiles" ([Hostache-Puech], Cemagref Montpellier).

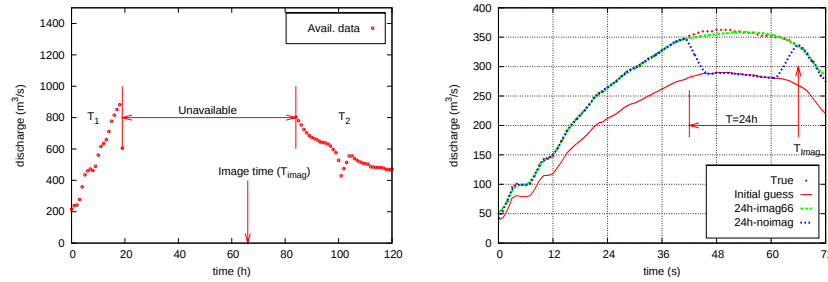


FIG. 5.14 – Moselle. (G) Observations réelles disponibles ; (D) Expériences jumelles : débit identifié avec / sans image.

différentes d'occupation des sols ("land-use"). Les hauteurs obtenues après calibration, Fig. 5.15, montrent d'une part que 3 zones (lit mineur - lit majeur gauche et droite) conduisent au meilleur résultat (conformément à l'analyse de sensibilité précédente), et d'autre part que le processus d'optimisation a permis d'améliorer grandement le modèle numérique d'écoulement par rapport au premier calage plus classique effectué "à la main".

Identification de l'onde de crue entrante (en expériences jumelles...).

Du fait de leur faible densité spatio-temporelle, les données réelles disponibles n'ont pas permis de reconstruire de manière satisfaisante un état initial et le débit entrant. Nous nous sommes alors tournés vers des expériences jumelles mais toujours sur la configuration réelle de la Moselle. Nous avons généré les observations : une image avec une information plus dense en espace que l'image réelle (avec $T_{imag} = 66h$), et un hydrogramme plus dense en temps que l'hydrogramme réel (24h seulement de non-mesures). Dans ces conditions, nous avons alors pu identifier le débit entrant, voir Fig. 5.14(D).

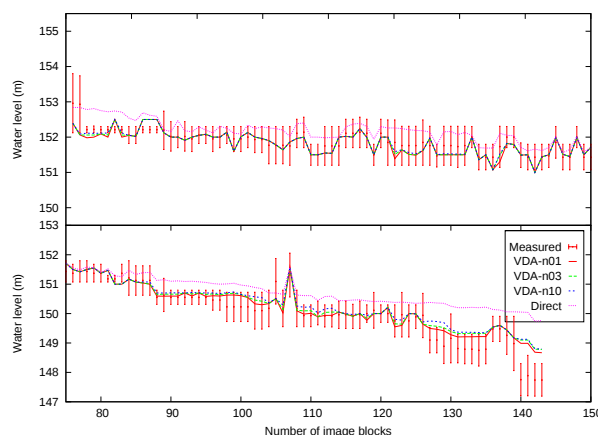


FIG. 5.15 – Moselle. Comparaison des hauteurs d'eau en des points où l'image est disponible sans / avec calibration du Manning.

En guise de perspectives. Nous avons vu que lorsque nous sommes en présence d'une image satellite, les données sont relativement denses en espace mais ponctuelles en temps, contrairement aux mesures in-situ qui sont ponctuelles en espace mais quasi-continues en temps. Il pourrait alors être intéressant de combiner une décomposition temporelle avec une telle répartition hétérogène des données.

Par ailleurs, l'information visuelle la plus frappante dans une image aérienne ou satellite de la nappe d'eau (tâche d'inondation) est la position du front. Nous discutons dans le chapitre de perspectives de l'assimilation d'un front via une méthode de lignes de niveau ("level set"). Cependant, nous pouvons déjà faire remarquer que plusieurs approches semblaient possibles pour assimiler une telle donnée image durant la crue : a) hauteurs d'eau extraites (l'approche présentée ici) ; b) prise en compte du volume d'eau correspondant dans la fonction coût ; c) position du front sec (autrement dit assimilation d'un front).

5.4 Données lagrangiennes

Ce paragraphe est tiré de la thèse de Marc Honnorat [14], des articles [HoLeDiMo07], [HoHuLeDiMoRi07] ; voir également les communications dans des congrès internationaux.

Comme nous l'avons mentionné précédemment, les observations disponibles en hydraulique fluviale consistent généralement à des hauteurs d'eau quasi-continues en temps mais en seulement très peu de points d'espace (au mieux deux-trois stations de jaugeage pour une portion de rivière bien instrumentée). Les mesures de vitesse sont quant à elles très incertaines (et tout particulièrement en cas de crues). L'idée d'une vidéo-surveillance des rivières a alors récemment été développée, voir par exemple [9] où l'écoulement en surface de mousses dans une zone restreinte de la rivière est filmée, ou encore [2] où l'on suit par GPS des flotteurs dérivants dans l'écoulement (trajectoires observées à une bien plus grande échelle). A noter que dans le domaine de l'océanographie de telles

données lagrangiennes avaient déjà été mises en place.
 Nous nous attachons dans ce paragraphe à assimiler des données lagrangiennes dans un modèle de rivière St-Venant 2D.

5.4.1 Modèle de transport additionnel et vitesse de transport...

La modélisation de marqueurs lagrangiens passifs dans un modèle d'écoulement St-Venant conduit à priori simplement à l'ajout d'une équation de transport pour chaque flotteur. Soit N le nombre de "particules" transportées, leurs trajectoires lagrangiennes $X_i(t)$ sont solutions des équations différentielles ordinaires suivantes : pour $i = 1..N$,

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}X_i(t) &= \mathbf{v}(X_i(t), t) & \forall t \in]t_i^0, t_i^f[\\ X_i(t_i^0) &= x_i^0 \end{cases} \quad (5.11)$$

où $\mathbf{v}$ est la vitesse de transport (de surface pour des flotteurs en surface) des particules, t_i^0 et t_i^f sont les temps d'entrée et sortie de la zone d'observations. Toute la difficulté réside alors à définir la vitesse de transport $\mathbf{v}$. En effet, un modèle de St-Venant standard ne fournit pas d'information suffisante sur des phénomènes locaux, petites échelles ou de turbulence. Et pourtant ces phénomènes peuvent s'avérer prépondérants dans le transport observé. En guise de première approche élémentaire et du fait de l'hypothèse "eaux peu profondes", on peut déjà noter que $\mathbf{v} = \gamma \mathbf{u}$ où $\mathbf{u}$ est la vitesse du modèle de St-Venant (i.e. moyennée sur la verticale) et γ un coefficient multiplicatif. Typiquement, dans un canal à fond plat, $\gamma \approx 1.1$. Par la suite, nous considérons ce coefficient γ comme un paramètre (dépendant de x) à identifier.

Concernant les observations (en supposant que nous en disposons d'un grand nombre), une approche simpliste mais permettant de filtrer les petites échelles consiste à moyenner en espace-temps les trajectoires observées. Pour cela, à partir des observations "brutes", on construit un champs de vitesse moyenné sur des fenêtres spatio-temporelles, Fig. 5.16, ce qui permet ensuite de reconstruire les trajectoires "filtrées", notées $\{\bar{X}_j^{obs}\}_{j=1, N_m}$, solutions des EDOs correspondantes. Le filtrage peut être effectué à différentes échelles en paramétrant les dimensions des fenêtres spatio-temporelles employées. A noter qu'une étape préliminaire consiste à rééchantillonner les observations sur la grille temporelle de calcul.

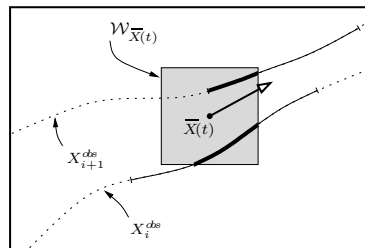


FIG. 5.16 – Fenêtres spatio-temporelles utilisées pour "filtrer" les trajectoires.

Numériquement, les EDOs sont résolues à l'aide d'un schéma de Runge-Kutta ordre 2 et la vitesse $\mathbf{v}$ est évaluée en un point d'espace via une interpolation Q1-Lagrange (maillage régulier en quadrangles).

Terme coût additionnel. On introduit ensuite un terme supplémentaire dans la fonction coût à minimiser. Ce terme mesure l'erreur faite sur les positions des particules (entre les positions simulées et les positions observées filtrées). Il s'écrit :

$$\sum_{i=1}^N \int_{t_i^0}^{t_i^f} |X_i(t) - \bar{X}_i^{obs}(t)|^2 dt \quad (5.12)$$

5.4.2 Survol et identification d'une topographie locale

Nous nous plaçons dans le cadre d'expériences jumelles mais pour lesquelles les trajectoires observées sont artificiellement bruitées. Plus précisément, les trajectoires observées sont construites à partir du modèle de transport en prenant comme champ de vitesse $\mathbf{v}^{tr} = (\mathbf{v} + \tilde{\mathbf{v}})$ où $\tilde{\mathbf{v}}$ est le résultat d'un processus stochastique de Gauss-Markov. La géométrie de l'écoulement est représentée sur la figure 5.17(a). Nous cherchons à identifier la topographie z_b (la bosse), Fig. 5.17(b), (et potentiellement la condition initiale en plus). Si nous tentons d'identifier la topographie (présence de la bosse) à partir d'observations de hauteurs d'eau aux abscisses $x_1 = 15\text{ m}$ et $x_2 = 70\text{ m}$, le processus de minimisation n'aboutit pas à un résultat satisfaisant. Par contre, si nous observons en plus 640 trajectoires (bruitées) X_i^{obs} au-dessus de la zone, nous réussissons à identifier correctement la topographie, voir Fig. 5.4.2. Autrement formulé, l'observation du "survol" d'une topographie par des marqueurs dérivants semble pouvoir conduire à son identification (du moins localement).

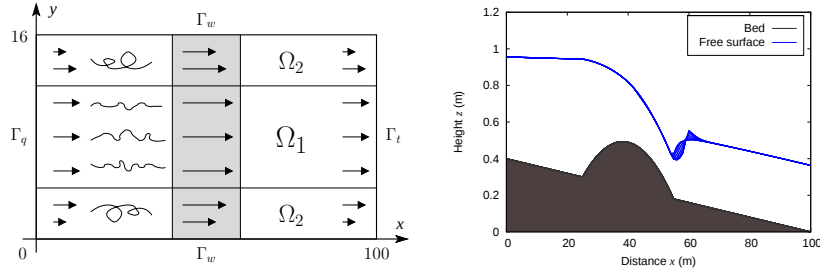


FIG. 5.17 – (a) Configuration géométrique. (b) Coupes verticales de l'écoulement de référence.

5.4.3 Un cas réel en canal

Nous passons à présent au cas d'un écoulement réel en canal. Les expérimentations ont été effectuées par N. Rivière (INSA Lyon et LMFA), tandis que l'extraction de trajectoires des images vidéos recueillies a été effectuée par E. Huot (Univ. Versailles et INRIA projet Clime) par une méthode PIV. Le travail collaboratif qui suit va donner lieu à la publication [HoHuLeDiMoRi07].

Nous considérons un écoulement en canal simple, Fig. 5.20, 5.21, en travers duquel est posée une planche de bois (la "bosse"). A l'entrée du canal est imposé

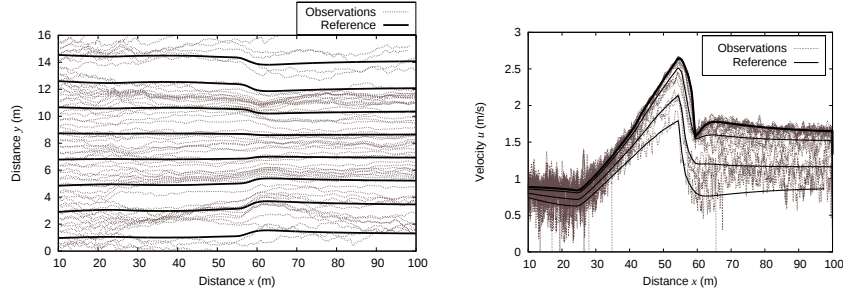


FIG. 5.18 – (a) Trajectoires bruitées et de référence. (b) Vitesses longitudinales bruitées et de référence.

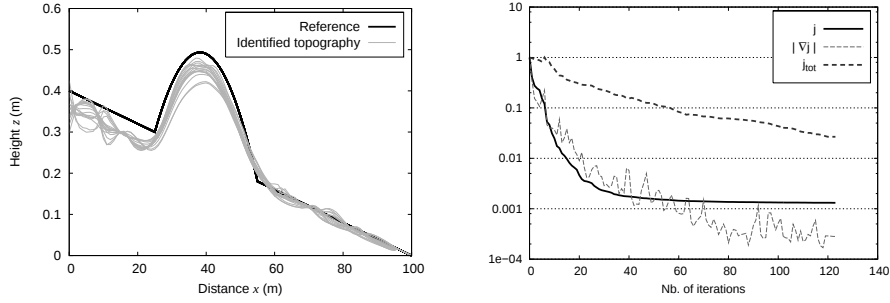


FIG. 5.19 – (a) Topographie identifiée. (b) Convergence de la fonction coût.

un débit constant tandis qu'à la sortie le niveau de hauteur est fixé. Ces conditions aux limites constantes au cours du temps, conduisent à un état permanent en moyenne. Les particules observées sont des confettis disséminés à la surface de l'eau et filmés par une caméra vidéo (séquence de 35s). Un exemple d'image extraite d'une séquence est donné sur la figure 5.21. Les trajectoires "brutes" sont ensuite filtrées à l'aide de la méthode présentée précédemment ($N_m = 150$ trajectoires au total).

Écoulement St-Venant de référence. On calcule une solution de "référence" avec le solveur direct de DassFlow, en prenant en compte toutes les informations disponibles sur l'écoulement, et ceci afin de pouvoir comparer la solution St-Venant avec les observations recueillies. Cette comparaison permet de mettre en évidence les erreurs modèle, voir Fig. 5.22. On note que le modèle Saint-Venant représente correctement les hauteurs d'eau. Ensuite, on calcule la vitesse débitante calculée à partir de la valeur du débit imposé $\bar{q}$ et des observations de hauteur d'eau h^{obs} par la formule : $u^{obs} = \frac{\bar{q}}{L \times h^{obs}}$ (L largeur du canal). On remarque alors une grande différence entre cette vitesse débitante et les vitesses de surface observées (après filtrage et dérivation des positions observées). En amont de l'obstacle, cette différence peut s'expliquer par l'hypothèse "eaux peu profondes" (pression hydrostatique et moyennisation des vitesses verticales). Par contre, au-dessus et en aval de l'obstacle, l'hypothèse "eaux peu profondes" n'est plus valable : nous sommes en présence d'une recirculation et d'un jet dit de surface, [N. Rivière, communication personnelle], voir Fig. 5.23.

Un meilleur modèle pour un tel écoulement serait bien sûr les équations

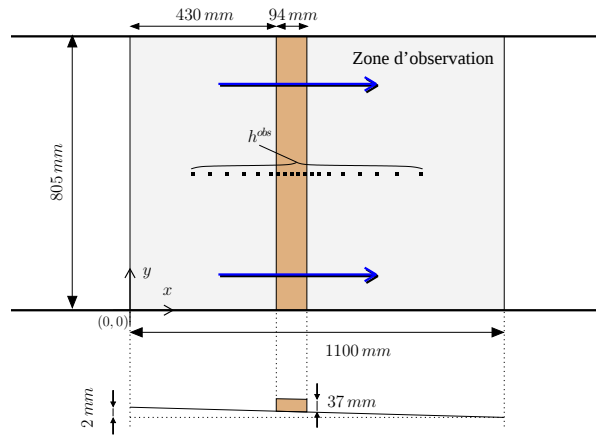


FIG. 5.20 – Montage expérimental.

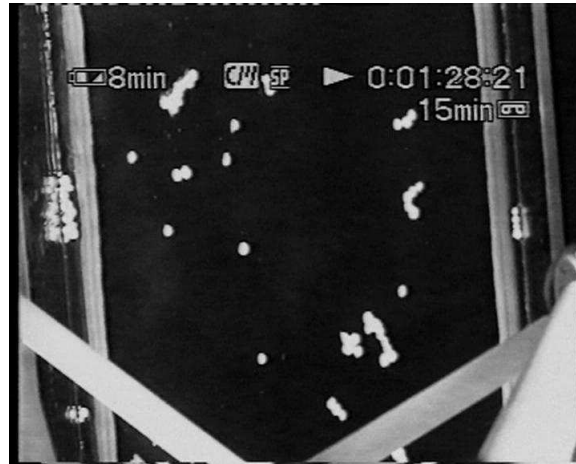


FIG. 5.21 – Image extraite d'une séquence vidéo utilisée pour l'expérience. On y voit les confettis à la surface de l'eau (point blancs) ainsi que la planche au fond du canal servant d'obstacle.

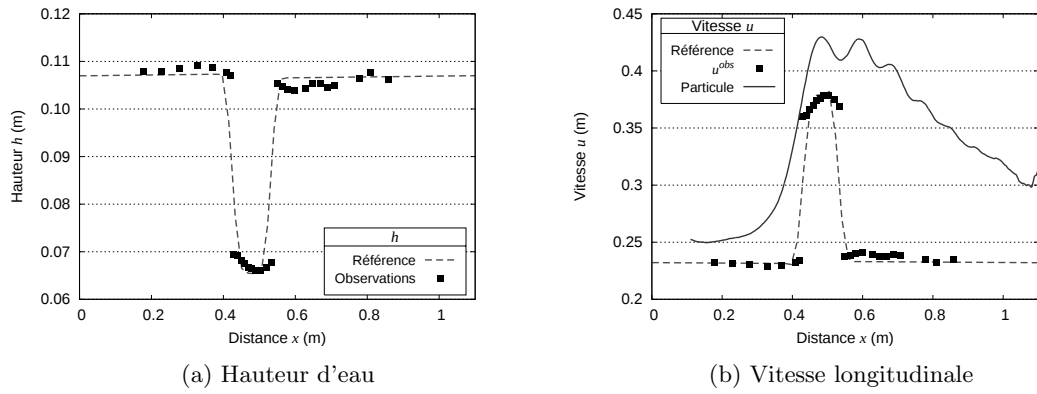


FIG. 5.22 – Comparaison entre l'écoulement de référence simulé et les observations. Trait en pointillés : simulation Saint-Venant de référence. Points noirs : observations issues de l'écoulement réel à partir des mesures de hauteur d'eau. Trait continu : vitesse d'une particule observée.

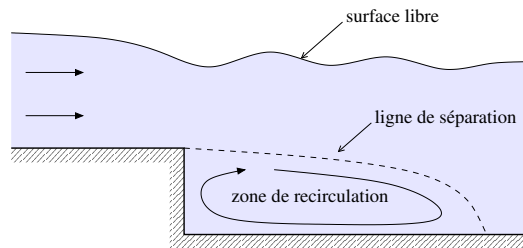


FIG. 5.23 – Vue schématique d'une zone de recirculation en aval d'une marche descendante avec surface libre.

de Navier-Stokes 3D avec surface libre. Cependant, nous obtenons avec notre modèle de Saint-Venant un résultat intéressant d'identification de la zone de recirculation, comme le montre l'expérience suivante. Nous cherchons à identifier la valeur de la topographie z_b (forme de la planche de bois en travers), du coefficient de Manning n (découpé selon 9 zones prédéfinies), des conditions initiales de l'écoulement, ainsi que la valeur du coefficient γ du modèle de transport. On remarque sur la figure 5.24 (a) que la topographie identifiée ne correspond pas à l'obstacle réel mais à un obstacle plus étalé et d'amplitude maximale semblable. L'interprétation que nous pouvons en faire est la suivante [N. Rivière, communication personnelle]. Au sein de la zone de recirculation 3D, le débit est globalement nul or du point de vue des équations de Saint-Venant, le débit en un point correspond à l'intégration sur la verticale du débit 3D. Cette analyse se vérifie d'un point de vue quantitatif à partir de la formule établie expérimentalement qui exprime le rapport : $\frac{L_r}{h_p} = 6.8 \frac{h_s}{h_p} (1 - \frac{h_s - h_p}{h_e - h_p})^{\frac{1}{6}}$, où L_r est la longueur de la recirculation, h_p est la hauteur de l'obstacle, h_e et h_s sont les hauteurs d'eau respectivement en amont et en aval de l'obstacle. Dans notre configuration expérimentale, ce rapport vaut aux alentours de 11 ; valeur que nous retrouvons approximativement à partir de nos résultats numériques (proche de 12).

Concernant les autres variables identifiées, les conditions initiales correspondent quasiment à l'écoulement permanent ; en revanche, la valeur du coefficient γ et celle du coefficient de Manning n'ont pu être clairement interprétée d'un point de vue mécanique des fluides.

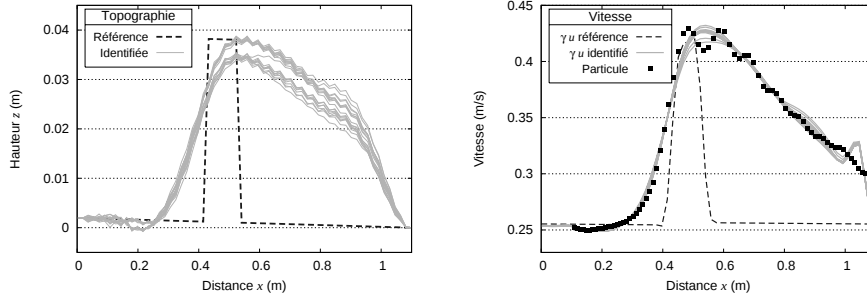


FIG. 5.24 – (a) Topographie équivalente identifiée z_b ; (b) Comparaison des vitesses de surface : des particules filtrées, de la vitesse de surface identifiée, de la vitesse de référence.

En conclusion, la topographie identifiée rend compte de la présence de l'obstacle réel ainsi que des recirculations de part et d'autre de celui-ci (en identifiant ces dernières comme étant une topographie équivalente).

5.5 Superposition locale d'un modèle de zoom et assimilation simultanée

Ce paragraphe est tiré de l'article [GeMo07] et de l'article en cours de rédaction [FeMaMo07] ; voir également les communications dans des congrès internationaux.

5.5.1 Idée de base

Les modèles opérationnels d'hydraulique fluviale décrivent généralement un réseau de rivières avec les équations St-Venant 1D et termes sources modélisant d'éventuels débordements (ces modèles sont appelés modèles 1D casier ou encore modèles 1.5D, voir [10]). Un intérêt majeur de ces modèles (réseau de branches 1D, voir par exemple le code Mage [36]) est leur faible coût de calcul, et donc la potentialité d'effectuer des simulations nécessitant un faible temps CPU. Les "casiers" (typiquement des zones inondées) sont modélisés par les termes sources qui expriment une perte/gain de masse et charge. Par construction, ces équations ne modélisent pas la dynamique de l'écoulement à l'intérieur des casiers. Dans les cas où la dynamique au sein d'un casier est intéressante, nous proposons de superposer un modèle 2D St-Venant (modèle local de zoom), voir Fig. 5.1. Dans le cas d'une zone inondée, l'intérêt potentiel d'un tel couplage est évident ; mais cela peut présenter également un intérêt dans un contexte de calibration vi assimilation de données pour le modèle 1.5D global lui-même. En effet, les observations (des hauteurs d'eau essentiellement) ne sont pas nécessairement disponibles en tout temps dans le lit mineur (voir par exemple le cas de la crue de la Moselle) mais peuvent par contre l'être dans le lit majeur (zone inondée). Dans une telle configuration, bien évidemment un modèle 1.5D n'est pas apte à assimiler de telles données puisque non représentées. La superposition d'un modèle local de zoom à un modèle global peut donc trouver son intérêt dans l'assimilation de données non représentées par le modèle global mais utiles à son calage. L'intérêt d'un tel principe de superposition reste vrai pour d'autres type d'écoulements comme par exemple les écoulements de glace (voir chapitre suivant). A noter que le modèle global représente à priori une physique moins complète (et sur une grille spatio-temporelle plus grossière) que le modèle local de zoom (physique plus complète et grilles plus fines).

Si l'objectif n'est que le couplage des deux modèles (superposition du modèle local de zoom sur le modèle global), il semble naturel d'envisager une algorithmique de couplage du type Schwarz (global en temps par exemple). Par contre, si nous nous plaçons dans un contexte d'assimilation variationnelle de données existant (modèle adjoint et processus d'optimisation existants), il devient intéressant d'effectuer le couplage de manière faible type méthode des joints ("Mortar") en utilisant le processus de contrôle optimal. C'est cette idée-ci que nous développons dans le contexte de la superposition d'un modèle 2D St-Venant par-dessus un casier du modèle 1.5D. Cela conduit à l'algorithme de couplage-assimilation simultanés JAC (JAC pour "Joint Assimilation Coupling"). Notons pour terminer qu'une notion similaire de couplage via un contrôle "virtuel" avait été introduite dans [21] ou encore [12].

Hydraulique fluviale : transferts d'information 1D-2D

Le couplage considéré peut être qualifié d'inhomogène dans le sens où : a) les équations 1D ne peuvent fournir toute l'information au modèle 2D ; b) d'un point de vue discret, les grilles spatio-temporelles sont largement discordantes de ratios $10^1 - 10^2$ en espace et $10^2 - 10^3$ en temps, voir par exemple les logiciels [36], [38]. Ces difficultés sont facilement prises en compte du fait que dans le cadre du contrôle optimal, le couplage est effectué de manière faible (condition

de continuité au sens faible).

Transfert d'information 1D vers 2D. Les informations échangées entre les deux modèles (conditions de couplage) ont déjà été décrites dans le paragraphe précédent traitant des modèles directs. Le modèle 1D fournit aux interfaces Γ_l , $l = 3, 4$, les caractéristiques entrantes au modèle 2D (notées w_k), ce qui consiste à imposer la relation de continuité suivante :

$$W_k = \int_{\Gamma_l} w_k ds \quad k = 1, 2 \quad l = 3, 4$$

où W_k désigne les caractéristiques 1D. Ces relations de continuité sont imposées de manière forte ou faible selon si le couplage s'effectue via une méthode de décomposition de domaine de type Schwarz global en temps (superposition de domaine de fait), ou bien via le processus de contrôle optimal.

Transfert d'information 2D vers 1D. Comme décrit précédemment, cela s'effectue au niveau des termes d'apport latéraux dans les équations St-Venant 1D, voir (5.3)

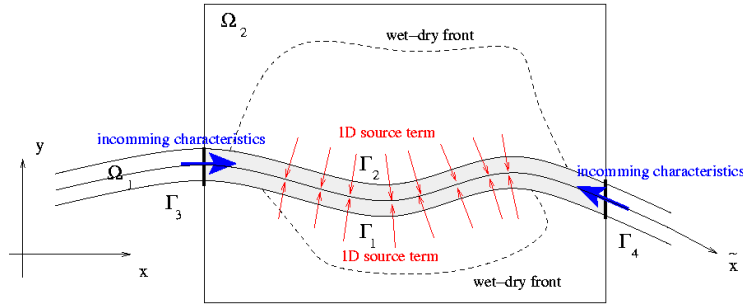


FIG. 5.25 – Lit majeur 1D, zone inondée 2D, interfaces de couplage.

5.5.2 L'algorithme de couplage et assimilation simultanés

Je présente ci-dessous l'algorithme qui permet simultanément de coupler et assimiler des données locales 2D dans le modèle 1D global. L'algorithme est basé sur le processus de contrôle optimal mis en oeuvre pour l'assimilation variationnelle de données. Pour cela, on considère les caractéristiques entrantes au modèle 2D comme variables de contrôle supplémentaires et on ajoute à la fonction coût la condition de continuité (sous forme faible) aux interfaces :

$$\int_0^T [W_k - \int_{\Gamma_l} w_k ds] dt \quad k = 1, 2 \quad l = 3, 4$$

Après convergence, on obtient un couplage 1D-2D avec conditions de "raccord faible", tandis que le modèle global est calibré à l'aide des observations disponibles. L'algorithme est représenté sur la figure 4.6.

FIG. 5.26 – L'algorithme de couplage et assimilation simultanée

5.5.3 Cas tests

Nous supposons disponibles les hauteurs d'eau aux instruments de mesures A et B, Fig. 5.27, et en chaque instant. On considère ici des expériences jumelles (les observations sont créées préalablement par le modèle). Etant données ces mesures, on couple les deux modèles tout en identifiant l'onde de crue entrante (il s'agit ici non pas d'un débit entrant mais de la caractéristique entrante W_1 , ce qui revient au même). Les grilles spatiales 1D-2D présentent un ratio de 0.1 tandis que les grilles temporelles présentent un ratio de 0.01 (le modèle 1D global est résolu sur une grille spatio-temporelle plus grossière).

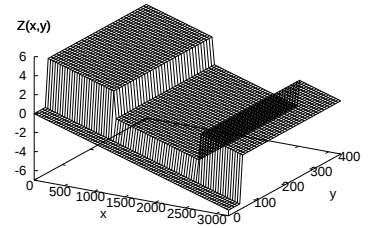
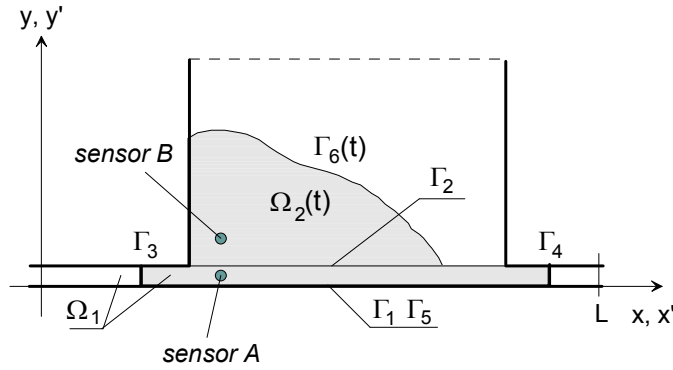


FIG. 5.27 – (a) Géométrie du cas test. (b) Bathymétrie.

On représente sur la figure 5.28(G) la condition au bord entrante de référence W_1 (trait pointillé) et sa valeur identifiée après k itérations de l'algorithme JAC

(trait continu). Sur la figure 5.28(D), on représente la fonction coût ainsi que ses différents termes au cours des itérations. Après convergence, nous avons obtenu le couplage des deux modèles tout en identifiant l'onde de crue entrante. Sur la figure 5.29 est représenté l'état du système après calibration.

Nous remarquons que l'onde de crue entrante identifiée (après convergence) ne correspond pas parfaitement avec l'onde de crue de référence (celle utilisée pour la génération des observations avec le modèle 2D grille fine). Cette erreur sur la valeur de la variable de contrôle obtenue est due à la dégradation effectuée sur la grille spatio-temporelle 1D. En effet, dans le cas de grilles concordantes et égales à celle de la solution de référence, l'identification obtenue est excellente (les deux courbes obtenues après convergence coïncident parfaitement).

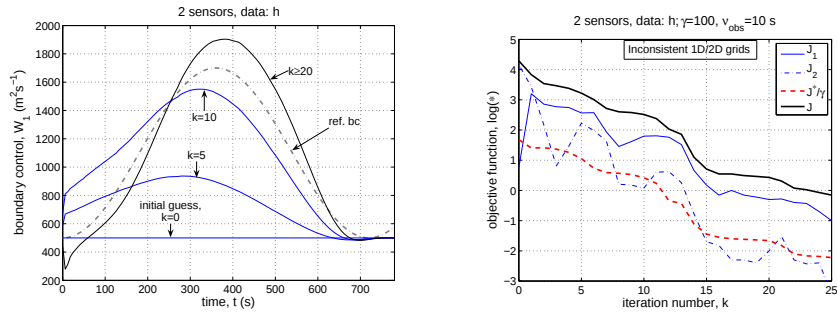


FIG. 5.28 – Algorithme JAC. Grilles non concordantes. (G) Identification de l'onde de crue entrante après k itérations. (D) Convergence de l'algorithme.

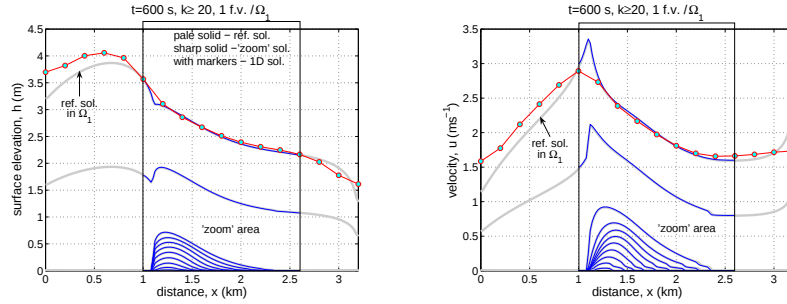


FIG. 5.29 – JAC. Grilles non concordantes. Ecoulement après couplage et calibrage simultanés. (G) hauteur. (D) vitesse.

Comparaison avec une décomposition de domaine Schwarz global en temps.

Bien sûr, dans le cas d'un couplage simple (sans identification) à l'aide d'un algorithme de Schwarz (global en temps), la condition entrante au modèle 1D global (onde de crue entrante) doit être donnée. Cependant, il est intéressant de comparer l'état du système (l'écoulement) obtenu à l'aide de l'algorithme de Schwarz, Fig. 5.30, avec celui obtenu précédent avec l'algorithme JAC, Fig. 5.29. Nous remarquons alors que les solutions obtenues pour chacune des approches sont semblables; et ces solutions approchent bien la solution de référence (2D en grille fine partout). La différence que nous pouvons observer entre la solution

couplée et la solution de référence dans le canal principal hors de la zone de zoom, est à nouveau due à la grille grossière 1D. En effet, dans le cas de grilles concordantes et égales à celle de la solution de référence, après couplage nous retrouvons parfaitement la solution de référence.

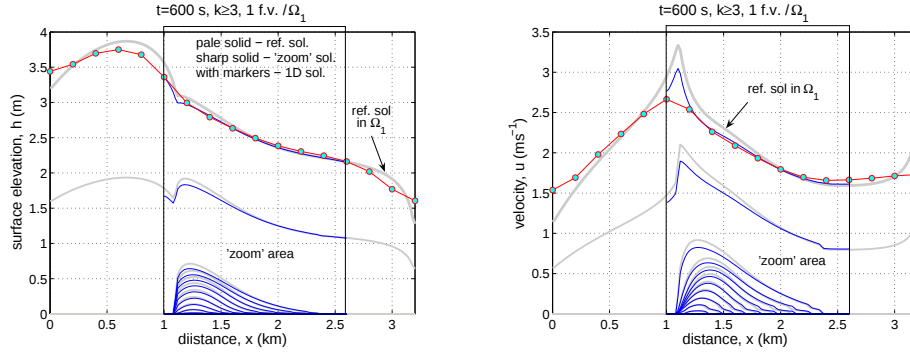


FIG. 5.30 – Schwarz. Grilles non concordantes. Ecoulement après couplage. (G) hauteur .(D) vitesse.

Calage du modèle global via l'assimilation de données disponibles uniquement via le modèle de zoom.

A présent, nous montrons les potentialités de la méthode JAC pour assimiler des données non représentées par le modèle 1D global néanmoins utilisées pour le calibrer. On assimile la hauteur d'eau (en tout instant) mesurée à l'instrument de mesure B uniquement (situé à 100m du canal principal, voir Fig.5.27). Les grilles spatio-temporelles 1D et 2D sont concordantes. L'onde de crue entrante de référence est représentée sur la figure 5.31(G) (ligne en pointillés). Jusqu'à $t \approx 300s$, sa valeur est inférieure au seuil critique de débordement. Les mesures de hauteurs d'eau correspondantes (mesures au point B) sont représentées en rouge. Jusqu'à l'instant $t \approx 600s$, aucune information sur l'écoulement n'est disponible (la hauteur d'eau mesurée est nulle).

La solution obtenue après convergence de l'algorithme JAC est représentée sur la figure 5.31(D). La méthode permet d'identifier correctement l'onde entrante durant la période où celle-ci induit un débordement détecté par les mesures au point B. Bien sûr, du fait du temps de propagation de l'onde entre la condition au bord entrante et le point de mesure B, aucune identification valable ne peut être espérée en fin de période temporelle.

Cet exemple montre que le modèle 2D superposé simultanément au processus d'identification, a permis de caler le modèle global avec des données non représentées par ce dernier. Ce type d'application de la méthode de couplage - assimilation simultanés (algorithme JAC) peut bien sûr être appliqué à d'autres types d'écoulements.

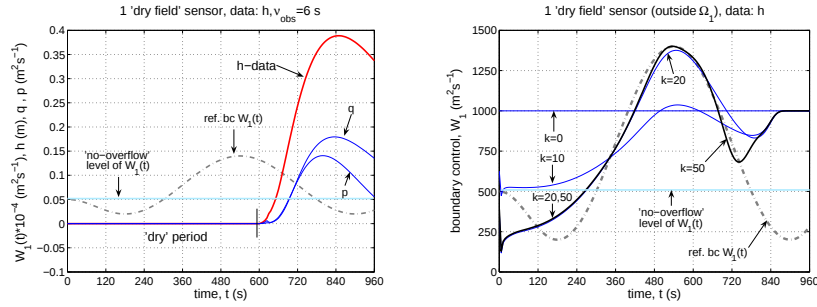


FIG. 5.31 – (G) Onde entrante de référence et mesures correspondantes (au point B). (D) Onde crue identifiée au cours des itérations k de l’algorithme JAC.

5.6 DassFlow : développements et applications à court terme

Nous terminons ce chapitre traitant de modélisation directe et inverse en hydraulique fluviale et dont les calculs sont basés sur notre logiciel DassFlow, par une présentation de projets en cours de développements (projets en collaboration mais se déroulant hors du LJK-Moise). Le premier est lié à l’assimilation de données de flotteurs dérivants (trajectoires lagrangiennes à grande échelle) ; le second à l’assimilation de données issues de mesures altimétriques pour de grands bassins hydrologiques. Ces deux projets de développements portés respectivement par un chercheur post-doctorant de l’université de Berkeley et un doctorant du LEGOS Toulouse, poussent un peu plus loin l’aspect applicatif de notre travail, et fera peut-être évoluer le logiciel DassFlow vers des versions plus sophistiquées. A noter que les deux problèmes abordés considèrent de grandes échelles d’espace et de temps, et de fait requièrent un solveur direct inconditionnellement stable (quitte à être moins précis que notre solveur actuel HLLC). C’est un aspect que nous allons étudier sous peu (LJK-Moise). Parmi les développements en cours notons également que nous étudions actuellement l’aspect bien équilibré pour un schéma volumes finis HLLC appliqué au système couplé 1.5D - 2D, voir la section 1 de ce chapitre et l’article en préparation [FeMaMo07].

Enfin je terminerais sur un développement également en cours et qui traite de l’assimilation de fronts par lignes de niveau ; les fronts constituant un type de données qui potentiellement peut être extrait d’images des écoulements.

Flotteurs lagrangiens à grande échelle

A l’automne dernier, Alexandre Bayen (Ass. Prof. à l’université de Berkeley, dept civil and environmental engineering) a souhaité expérimenter DassFlow dans le cadre de son projet d’instrumentation et modélisation des écoulements dans le delta formé par les fleuves San-Joaquin et Sacramento (zone hydrologique majeure de Californie). La zone étudiée étant proche de l’estuaire, la dynamique de l’écoulement est largement influencée par les conditions des marées, voir Fig. 5.32. Ce large projet de recherche, [2], a pour ambition d’aborder aussi bien la partie instrumentation, que la partie communication des données en temps

réel, qu'enfin la partie modélisation et simulation numérique (en temps réel si possible...). C'est bien évidemment sur la partie modélisation numérique que notre collaboration s'est établie. Du point de vue instrumentation, il s'agit essentiellement d'effectuer des lachers réguliers de flotteurs dérivants possédant de multiples capteurs embarqués (position-vitesse, température, sédiments, salinité). Dans un premier temps, seules les données de position (via GPS) seront exploitées. Du point de l'assimilation de données, le problème proposé consiste finalement à assimiler des données lagrangiennes (et eulériennes) dans un modèle St-Venant 2D. Ces travaux se situent dans la prolongation de ceux développés au cours de la thèse de Marc Honnorat, [14], [HoLeDiMo07]. Du fait de l'influence des marées, les conditions aux bords (frontières ouvertes) à identifier peuvent être exprimées ainsi :

$$h_{bord}(t) = h_0 + h_L \frac{t}{T} + \sum_{k=1}^P h_k \sin(\omega_k t + \phi_k)$$

Ce qui conduit à $2(P+1)$ paramètres à identifier par frontière ouverte, où P est le nombre d'harmoniques des marées considéré.

La difficulté restante à surmonter est essentiellement liée aux grandes échelles d'espace et de temps considérées. L'échelle spatiale peut être estimée à partir de la figure 5.32, et les échelles de temps considérées sont de quelques jours. A partir de la version actuelle de DassFlow, deux actions doivent être menées.

1) La résolution des EDOs de transport sur un maillage déstructuré triangle - quadrangle (le solveur actuel des EDOs n'est valable que sur un maillage structuré). Ce point-ci est actuellement à l'étude par O.P. Tossavainen, chercheur post-doctorant Berkeley.

2) L'élaboration d'un solveur 2D-Venant permettant des pas de temps relativement grands, autrement dit un solveur inconditionnellement stable. En effet, les solveurs directs actuels implémentés dans DassFlow sont basés sur des schémas volumes finis avec une discrétisation temporelle Euler explicite. La condition de stabilité qui en découle conduit à des temps CPU de calcul trop importants. Dans le cadre d'une collaboration avec le Mox, Politecnico di Milano (E. Miglio, L. Bonaventura), nous envisageons d'adapter leur solveur qui est basé sur un schéma éléments finis semi-implicite où le terme de transport est traité par une méthode des caractéristiques, voir [13]. Une telle approche permet de considérer des pas de temps plus raisonnables.

Données altimétriques satellitaires (à grandes échelles)

Les recherches autour des potentialités de l'altimétrie spatiale appliquée aux eaux de surface continentales (zones inondées notamment) ont grandement avancées ces dernières années. Citons le programme européen "Water mission" initié à Toulouse en 2003 et auquel le LEGOS Toulouse participe activement, voir par exemple [7].

Ces travaux ont notamment abouti à des séries temporelles de hauteurs d'eau déduites de l'altimétrie spatiale dans plusieurs grands bassins hydrographiques. L'objectif pouvant être d'étudier la réponse des eaux de surface à la variabilité climatique saisonnière et interannuelle. Citons comme exemple étudié les inondations saisonnières des plaines du delta du Mékong liées à la mousson, Fig. 5.33; ou encore des estimations de débit de l'Amazone. Pour plus de détails,

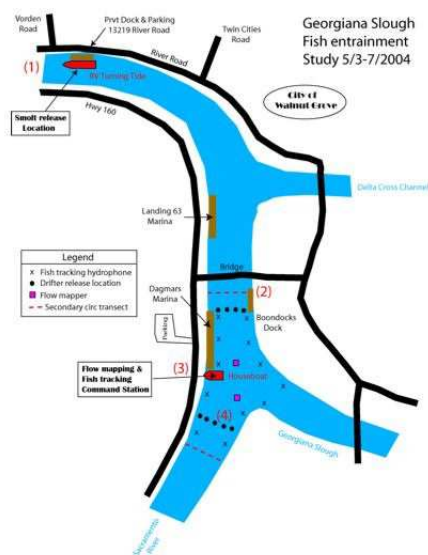


FIG. 5.32 – Portion de rivière Sacramento instrumentée (Courtesy of USGS & A. Bayen Berkeley). Les flotteurs dérivants sont lâchés aux points noirs. Des mesures de vitesses sont effectuées aux lignes rouges.

nous renvoyons le lecteur aux sites web du LEGOS, thématique « Hydrologie spatiale sur les fleuves et zones d'inondation » ^{1 2}.

Sur cette thématique, nous prévoyons une collaboration avec A. Cazenave, N. Mognard et JF Crétaux du LEGOS, autour de l'utilisation de leurs données extraites des mesures altimétriques dans nos modèles d'écoulement St-Venant (DassFlow). L'étude s'intégrerait au travail de thèse de S. Biancamaria (06-09) intitulé «Préparation à la mission WatER : comparaison des altimètres actuels et de nouvelle génération, pour estimer des paramètres hydrologiques des modèles hydrologiques et hydrodynamiques». Un objectif étant de montrer les apports potentiels de la mission spatiale WatER (Water Elevation Recovery) dédiée à l'hydrologie pour une meilleure compréhension de l'hydraulique de plaines d'inondation et de bassins fluviaux. Le travail de Sylvain porte sur une modélisation du bassin de l'Ob en Sibérie occidentale (6ème plus grand bassin versant mondial). L'Ob contribue pour 15 % de l'apport annuel d'eau douce dans l'océan arctique ; l'arctique étant la région la plus touchée par le réchauffement climatique et les apports d'eaux douces pouvant influencer la circulation océanique thermo-haline.

D'un point de vue solveur numérique, la même difficulté que précédemment apparaît, à savoir considérer de grandes échelles de temps (de l'ordre de l'année avec des données de l'ordre de l'heure). Nous pensons alors à nouveau au développement d'un solveur St-Venant (1.5D et 1D-2D couplé) basé sur un schéma semi-implicite semi-lagrangien (ie le terme de transport est traité par une méthode des caractéristiques), approche développée par exemple par nos

¹[http://www.legos.obs-mip.fr/fr/equipes/gohs/resultats/e hydrologie](http://www.legos.obs-mip.fr/fr/equipes/gohs/resultats/e%20hydrologie)

²<http://www.legos.obs-mip.fr/fr/recherches/missions/water>

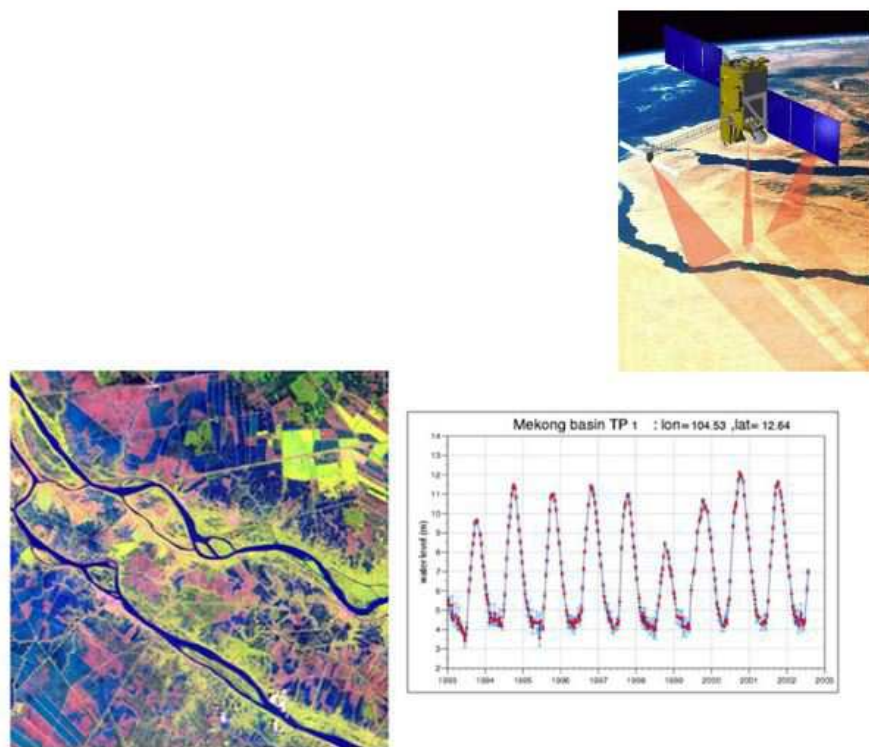


FIG. 5.33 – Grands bassins versants. Données satellitaires obtenues au LEGOS Toulouse.

collègues de Milan, voir [13], [14].

Assimilation de fronts par lignes de niveau

Dans le cadre de l'ACI Assimage (2003-06), FX Le Dimet suggérait d'exploiter les images de fluides géophysiques dans les modèles ; ou autrement dit établir des méthodes d'assimilation de données permettant d'insérer de manière quantitative ce volume croissant d'images disponible dans les modèles d'écoulements. Nous avons déjà vu dans ce document deux exemples d'assimilation de données issues du traitement de l'image. Le premier, relatif aux images vidéos de confettis, a conduit après traitement des images par E. Huot (INRIA Clime et univ. Versailles), à l'assimilation d'un ensemble de trajectoires lagrangiennes, voir [HoLeDiMo07] [HoHuLeDiMoRi07]. Le second, relatif à la crue de la Moselle, a conduit après traitement des images par R. Hostache et C. Puech (Cemagref Montpellier) à l'assimilation de données eulériennes classiques, avec toutefois une répartition spatio-temporelle bien particulière, voir [LaMo07] [HoLaMoPuPa07]. Voir également les actes de conférence [LeHeHuMeMo06-c] [HoLaLeDiMo07-b] [HoLaLeDiMo07-b].

Un type de structure qui peut directement être observé dans les images d'écoulements sont les fronts. Citons par exemple, les limites de la nappe d'eau

pour une plaine inondée, ou les limites d'un polluant dans une étendue d'eau (grands fleuves, lacs, océans) ou encore, exemple plus complexe, le contour de nuages dans l'atmosphère. Cependant passer du "on voit que" à l'assimilation d'une information quantifiée et viable est très loin d'être trivial.

Outre l'extraction d'une information quantitative de l'image (sujet de recherche relevant essentiellement du traitement de l'image), une difficulté majeure réside dans la modélisation du champ de vitesse lié à la dynamique de la structure observée. Nous en avons vu un premier exemple simple avec les confettis à la surface de l'écoulement dans un canal, champs de vitesse à relier avec un champ de vitesse moyen St-Venant du modèle d'écoulement.

Un outil mathématique désormais classique pour représenter les fronts est la méthode des lignes de niveau, [30] ("level set"). En 2D (contexte des images), cette approche consiste à représenter une courbe plane Γ_{front} dans le domaine Ω comme la ligne de niveau zéro d'une fonction scalaire ϕ . Ce qui s'écrit : $\Gamma_{front}(t) = \{(x, y) \in \Omega, \phi(x, y; t) = 0\}$. Cette approche est couramment employée dans les domaines du traitement de l'image et de la modélisation numérique des fluides. Son grand avantage réside dans sa capacité à représenter implicitement des changements de topologie complexes.

Dans les buts de suivi de contours d'objets dans une séquence d'images et/ou d'évaluation de champs de vitesse denses, les auteurs de [31] [32] ont développés une méthode qui s'appuie sur l'assimilation variationnelle de données. Ils obtiennent par exemple la reconstitution de champs de vitesse turbulents à partir de séquences d'images partielles et bruitées.

Nous nous proposons ici d'utiliser de tels résultats issus des images (suivis de contours et/ou champs denses reconstitués) comme données dans un modèle d'écoulement, St-Venant 2D par exemple. On peut alors ajouter au modèle direct St-Venant 2D l'équation de transport du front qui, sans le terme lié à la courbure, revient tout simplement à l'équation de transport linéaire : $\frac{d}{dt}\phi = 0$ dans $\Omega \times [0, T]$ (avec conditions aux frontières ouvertes et conditions initiales). La vitesse de transport du front w_{front} pourrait être extraite de la séquence d'images via un modèle à priori comme par exemple le transport de la vorticit   et de la divergence, voir [32]. Ce champ de vitesse w_{front} doit ensuite   tre mis en relation avec le champ de vitesse du mod  le d'  coulement St-Venant $\mathbf{u}$ (question de mod  lisation).

Si l'on consid  re l'assimilation de la position du front observ   $\Gamma^{obs}(t)$, on peut alors ajouter le terme suppl  mentaire suivant    la fonction co  t :

$$J_{front}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \int_0^T \|\phi(t) - \phi^{obs}(t)\|_{\star}^2 dt$$

o   $\phi^{obs}(t)$ est une fonction de niveau associ  e    l'observation $\Gamma^{obs}(t)$ et $\|\cdot\|_{\star}$ une norme dans Ω    d  finir. On pourra choisir de r  -initialiser les fonctions de niveau ϕ et ϕ^{obs} comme fonction de distance aux seuls instants d'observation. Aussi, en guide d'  bauche pour la condition initiale, nous pourrions utiliser le champ de vitesse reconstitu      partir de l'image.

Dans le cas o   l'on veuille assimiler   galement les champs de vitesse denses reconstitu  s    partir de la s  quence d'images et d'un mod  le    priori (comme

celui de [31] [32]), il semble indispensable d'ajouter un terme d'erreur ε_{obs} sur les observations : $\varepsilon_{obs} = \mathbf{u} - \mathbf{u}_{image}^{obs}$. Ce terme d'erreur inclurait l'erreur modèle de reconstitution du champ dense, et pourrait d'ailleurs lui-même faire partie de la variable de contrôle, voir à ce sujet [33].

Nous envisageons alors d'identifier une condition initiale ainsi que des conditions aux frontières ouvertes selon cette approche, pour un écoulement atmosphérique simple analysé à partir d'une séquence d'images disponible.

Nécessité d'un solveur non diffusif. Notons que si l'on veut assimiler la dynamique d'un front, le solveur direct pour l'équation de transport correspondante se doit d'être le moins diffusif possible. Dans le cas de grilles régulières structurées, un schéma de type WENO d'ordre élevé (5) associé à un schéma d'intégration en temps de Runge-Kutta d'ordre élevé est facilement implémentable. Par contre dans le cas de grilles déstructurées, le choix d'un solveur non diffusif peut s'avérer plus délicat. Une possibilité serait d'adopter une approche basée sur une formulation semi-langrangienne (caractéristiques) associée à une discrétisation type Galerkin discontinue, voir par exemple [14]. Cela permettrait de combiner la précision et les propriétés conservatives d'une méthode Galerkin discontinue avec la robustesse (en terme de condition de stabilité) d'une approche semi-langrangienne.

Diffusion, contacts actuels et collaborations à venir

Le mode de diffusion de DassFlow choisi est le suivant. Nous distribuons gratuitement le code direct avec documentations via notre site web, Fig. 5.34. Par contre, le code complet (incluant le processus complet d'assimilation variationnelle de données et de minimisation) est distribué uniquement dans le cadre d'une collaboration bien définie ou éventuelle.

A ce jour (juin 2007), une douzaine de départements disposent du code direct (universités ou instituts de recherche liés à l'eau répartis dans le monde entier : Bénin, Californie, Chine, Espagne, Floride, Grèce, Italie, Japon, Irlande, Luxembourg, Mali etc). Seuls deux équipes proches possèdent le code complet : le MOX du Politechnico Milano et le centre de recherche public G. Lippmann du Luxembourg. Bien sûr nos partenaires français et notamment ceux du projet région ont accès au code.

A terme plusieurs développements extérieurs devraient pouvoir être insérés dans les prochaines versions. Citons ceux de E. Fernandez-Nieto de l'université de Séville (solveurs volumes finis) et ceux de O.P. Tossavainen de Berkeley (flotteurs lagrangiens sur maillage déstructuré).

Notons enfin des contacts établis avec le SHAPI Toulouse (J.M. Tanguy) et la Sogreah Grenoble (LHF, P. Sauvaget).

Par ailleurs, avec les collègues du MOX - Milano (E. Miglio, L. Bonaventura), les collègues de Séville (E. Fernandez-Nieto) et Malaga (C. Pares), nous envisageons la fusion de nos savoir-faires respectifs (schémas et/ou codes sources) au sein d'une plate-forme commune traitant de la modélisation directe et inverse en hydrologie (voir DassHydro au chapitre suivant). Le processus d'assimilation variationnelle de données sera copié sur celui de DassFlow. Joël Marin, ingénieur associé INRIA (06-08), a largement participé à la modularité des versions ac-

tuellement diffusés ainsi qu'à la structure du code à venir.

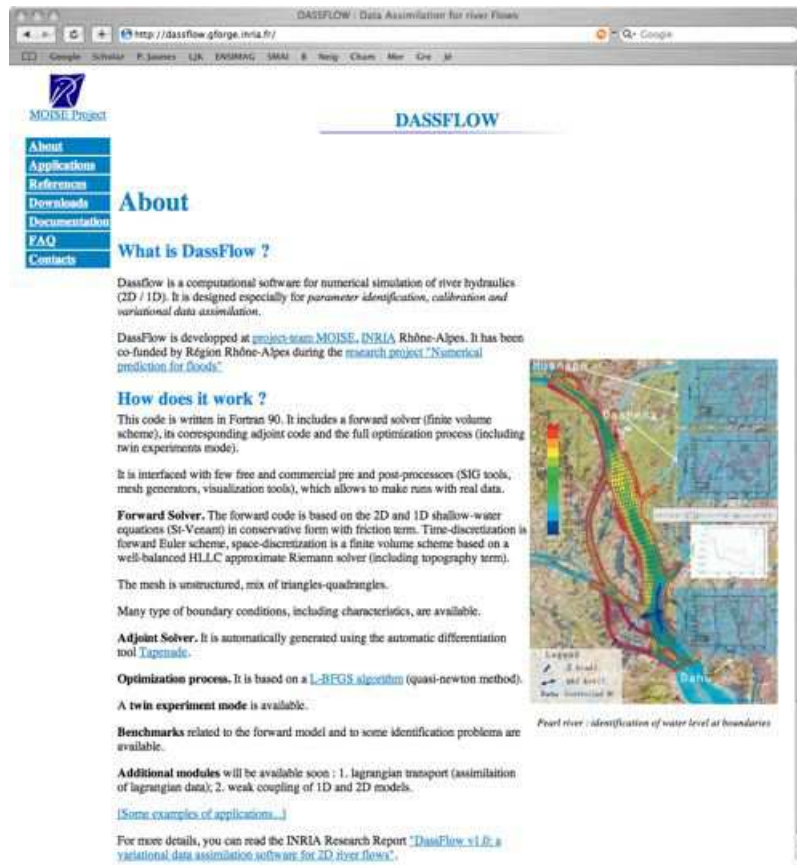


FIG. 5.34 – DassFlow : page principale du site web de diffusion. Forge INRIA (maintenue par J. Marin).

Références personnelles ou en collaboration

Revue internationale à comité de lecture

- [HoHuLeDiMoRi07] M. Honnorat, E. Huot, FX Le Dimet, J. Monnier, N. Rivière. "Assimilation of lagrangian floaters in an open channel". A soumettre.
- [FeMaMo07] E. Fernandez-Nieto, J. Marin, J. Monnier. "Coupling 1D-2D shallow-water river models : a global well-balanced HLLC scheme". En préparation.
- [LaMo07] X. Lai, J. Monnier "Assimilation of spatial distributed water levels into a shallow-water flood model. Part I : method and toy test case". A soumettre.

- [HoLaMoPuPa07] R. Hostache, X. Lai, J. Monnier, C. Puech, A. Paquier. "Assimilation of spatial distributed water levels into a shallow-water flood model. Part II : using one satellite image of Moselle river. En préparation.
- [FeBrMo07] E.D. Fernandez-Nieto, D. Bresch, J. Monnier. "A consistent intermediate wave speed for a well-balanced HLLC solver". Notes CRAS Paris Série I.
- [GeMo07] I. Gejadze, J. Monnier. "On a 2D zoom for 1D shallow-water model : coupling and data assimilation". Accepted in Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. (CMAME). To appear in 2007.
- [HoLeDiMo07] M. Honnorat, FX Le Dimet, J. Monnier. "Lagrangian data assimilation for river hydraulics simulations".

Logiciels : rapports de recherche INRIA

- [FeMaMo-b] E. Fernandez-Nieto, J. Marin, J. Monnier. "Well-balanced solver and benchmarks". Report INRIA RR-, 2007. En préparation.
- [HoMaMoLa07-b] M. Honnorat, J. Marin, J. Monnier, X. Lai. "DassFlow v1.0 : a variational data assimilation software for 2D river flows". Report INRIA RR-6150, march 2007
- [LoHoLeDiMo05-b] Y. Loukili, M. Honnorat, FX LeDimet, J. Monnier. "DassFlow V0 : un modèle direct et inverse d'écoulements St-Venant 2D". Report INRIA RR-5756, november 2005
- [LoHoMo05-b] Y. Loukili, M. Honnorat, J. Monnier. "T2DInverse : Towards calibration and sensitivity analysis into Telemac2D using automatic differentiation". Report INRIA RR-5618, July 2005.

Congrès internationaux avec actes publiés dans des revues à comité de lecture

- [CaDaHoLeDiLoMo05-b] W. Castaings, D. Dartus, M. Honnorat, FX Le Dimet, Y. Loukili, J. Monnier. "Automatic Differentiation : a tool for variational data assimilation and adjoint sensitivity analysis for flood modeling". In "Automatic Differentiation : Applications, Theory, and Tools", Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Bucker-Corliss-Hovl-Naumann-Norris Editors, Springer, 2005.

Congrès internationaux avec actes avec comité de lecture

- [HoLaLeDiMo07-b] M. Honnorat, X. Lai, FX Le Dimet, J. Monnier. "Assimilation of remote sensing data for river flows". MAMERN'07 Granada, July 2007. Extended abstract.
- [HoLaLeDiMo07-b] M. Honnorat, X. Lai, FX Le Dimet, J. Monnier. "Assimilation of images for river hydraulics simulations". Invited talk. ICIAM Zurich, July 2007.
- [GeMo07-b] I. Gejadze, J. Monnier. "Superposition of a local zoom model using optimal control. Application to 1D-2D river flows". ECCOMAS 'Coupled problems'. Ibiza, May 2007.
- [GeMo06-b] I. Gejadze, J. Monnier. "A joint data assimilation coupling algorithm applied to shallow-water flood models". ECCOMAS CFD, Egmond aan Zee, September 2006.
- [HoLeDiMo06-b] M. Honnorat, FX Le Dimet, J. Monnier. "Lagrangian data assimilation for river hydraulics simulation". ECCOMAS CFD, Egmond aan Zee, september 2006.

- [HoGeLeDiMo06-b] M. Honnorat, I. Gejadze, FX Le Dimet, J. Monnier. "*On variational data assimilation methods for 1D and 2D fluvial hydraulics*". Invited talk. 14th European Conference on Mathematics for Industry ECMI. Madrid, july 2006.
- [GeMo06-b] I. Gejadze, J. Monnier. "*On data assimilation for a 1D-net river model with 2D zoom areas*". CMWR XVI-Computational Methods for Water Ressources. Copenhagen, june 2006.
- [HoLaLeDiMo06-b] M. Honnorat, X. Lai, FX Le Dimet, J. Monnier. "*Variational data assimilation for 2D fluvial hydraulics simulation*". Invited talk. CMWR XVI-Computational Methods for Water Ressources. Copenhagen, june 2006.
- [HoLeDiMo05-b] M. Honnorat, FX Le Dimet, J. Monnier. "*On a river hydraulics model and lagrangian data assimilation*". Invited talk. ICAMS, ADMOS05, Barcelona, september 2005.
- Congrès nationaux avec actes**
- [MoGeHoLe06-c] J. Monnier, I. Gejadze, M. Honnorat, FX Le Dimet "*Assimilation de données variationnelle pour des modèles d'hydraulique fluviale*". Colloque National sur l'assimilation de données, Toulouse, 9-10 mai 2006.
- [LeHeHuMeMo06-c] F.-X. Le Dimet, I. Herlin, E. Huot, E. Mémin, J. Monnier "*AssImage : étude de techniques d'assimilations de données image dans des modèles de simulation de fluides géophysiques*". Colloque National sur l'assimilation de données, Toulouse, 9-10 mai 2006.

Références principales du chapitre

- [1] E. Audusse, F. Bouchut, M.O. Bristeau, R. Klein, B. Perthame. *A fast and stable well-balanced scheme with hydrostatic reconstruction for shallow water flows*. SIAM J.Sci. Comp 25, 6, 2050-2065 (2004).
- [2] A. Bayen and M. T. Stacey, *Calibration-free approach to modeling delta flows and transport*. UC Berkeley, 2006.
- [3] E. Belanger and A. Vincent. *Data assimilation (4D-VAR) to forecast flood in shallow-waters with sediment erosion*. Journal of Hydrology, 300(1) :114-125 (2005).
- [4] A. Bermúdez, M. E. Vázquez Cendón. *Upwind Methods for Hyperbolic Conservation Laws with Source Terms*. Computers Fluids 23-8 1049-1071 (1994).
- [5] E. Blayo, L. Debreu *Revisiting open boundary conditions from the point of view characteristic variables*, Ocean Modelling, 9 (2005) 231-252.
- [6] J. Blum, F.-X. Le Dimet, *Assimilation de données pour les fluides géophysiques*, Revue Matapli, 67, 33-55, 2002.
- [7] Cazenave A., P.C.D. Milly, H. Douville, J. Benveniste P. Kosuth, D.P. Lettenmaier, *Space techniques used to measure change in terrestrial waters*. EOS, Vol. 85, N°6, 2004.
- [8] T. Chacón Rebollo, A. Dominguez Delgado, E.D. Fernandez-Nieto, *Asymptotical balanced schemes for non-homogeneous hyperbolic systems- application to Shallow Water equations*, *C.R. Acad. Sci. Paris*. 338, 85-90(2004).
- [9] J. D. Creutin and M. Muste and A. A. Bradley and S. C. Kim and A. Kruger, *River gauging using PIV techniques : a proof of concept experiment on the Iowa River*, Journal of Hydrology, 277, 182-194, 2003.
- [10] Cunge, J.A., Holly, F.M., Verwey. A. *Practical Aspects of Computational River Hydraulics*. Pitman, London,(1980).
- [11] J.-F. Gerbeau and B. Perthame, *Derivation of viscous Saint-Venant system for laminar shallow water.Numerical validation*, Discrete and Continuous Dynamical Systems – Series B, 1 (1) 89-102, 2001.
- [12] P. Gervasio, J.L. Lions, A. Quarteroni, *Heterogeneous coupling by virtual control methods*, Numer. Math., 90 (2001) 241-264.
- [13] J.Ch. Gilbert, C. Lemarechal, *Some numerical experiments with variable storage quasi-Newton algorithms*, Mathematical Programming, 45 (1989) 503-528
- [14] M. Honnorat, *Assimilation de données Lagrangiennes pour la simulation numérique en hydraulique fluviale*, Thèse INP-Grenoble, Lab LMC-IMAG, 2007.

- [15] R. Hostache, Analyse d'images satellites d'inondations pour la caractérisation tridimensionnelle de l'aléa et l'aide à la modélisation hydraulique, PhD thesis. Engref - Cemagref, 2006.
- [16] R. Hostache, C. Puech, Estimation de niveaux d'eau en plaine inondée à partir d'images satellites RADAR et de données topographiques fines, *Revue Télédétection*, 2007.
- [17] Le Dimet, F.-X. and Mazauric, C. and Castaings, W. *Prospects for the use of data assimilation for flood prediction* Workshop on Flood Prevention and Control on the Yangtze River (FOCYR). (2004)
- [18] Le Dimet, F.X. and Talagrand, O. *Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations : theoretical aspects*, *Tellus A*, 38, 97-110, 1986.
- [19] R.J. LeVeque Balancing Source Terms and Flux Gradients in High-Resolution Godunov Methods : The Quasi-Steady Wave-Propagation Algorithm. *J. Comput. Phys.* 146, 346-365 (1998).
- [20] J.-L. Lions, Contrôle optimal de systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles, Dunod, 1968.
- [21] J.-L. Lions, O. Pironneau, *Sur le contrôle parallèle des systèmes distribués*. CRAS Paris, Série I, p 993-998, 1998.
- [22] Luong, B. and Blum, J. and Verron, J., A variational method for the resolution of a data assimilation problem in oceanography. *Inverse Problems*, 14 (4), 979-997, 1998.
- [23] C. Mazauric, Assimilation de données pour les modèles d'hydraulique fluviale. Estimation de paramètres, analyse de sensibilité et décomposition de domaine. Thèse Université Joseph Fourier Grenoble, Lab LMC-IMAG, 2003.
- [24] E Miglio, A Quarteroni, F Saleri, *Finite element approximation of Quasi-3D shallow water equations*. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 174 (3-4), pp 355-369, 1999.
- [25] M. Restelli, L. Bonaventura, R. Sacco, *A semi-Lagrangian discontinuous Galerkin method for scalar advection by incompressible flows*. *Journal of Computational Physics*, 216, pp. 195-215, 2006.
- [26] A. Barré de Saint-Venant, Théorie du mouvement non permanent des eaux, avec application aux crues des rivières et à l'introduction des marées dans leur lit, *Comptes-Rendus de l'Académie des Sciences*, Paris, **73**, pp147-154, 237-240 (1871).
- [27] E.F. Toro, *Shock-capturing methods for free-surface shallow flows*. J. Wiley and Sons (2001)
- [28] J. Yang, Assimilation de données variationnelle pour les problèmes de transport des sédiments en rivière, Thèse Université Joseph Fourier Grenoble, Lab LMC-IMAG, 1999.
- [29] — Fronts issus d'images —
- [30] S. Osher R. Fedkiw, *Level set methods and dynamic implicit surfaces*. Springer, 2003.
- [31] N. Papadakis and E. Mémin and F. Cao, *A variational approach for object contour tracking*. ICCV'05 Workshop on Variational, Geometric and Level Set Methods in Computer Vision, China, 2005.

- [32] N. Papadakis, E. Mémin. *A variational framework for spatio-temporal smoothing of fluid motions*. Scale Space and Variational Methods, Italy, 2007.
- [33] A. Vidard, *Vers une prise en compte de l'erreur modèle en assimilation de données 4D-variationnelle*. Thèse de l'Université Joseph Fourier, 2001.
- [34] — Logiciels —
- [35] *HEC-RAS software : 1D hydraulic calculations for a full network of natural and constructed channels*. <http://www.hec.usace.army.mil/software/hecras/>
- [36] *Mage : 1.5D numerical model for river flows*. Cemagref Lyon, France. <http://www.lyon.cemagref.fr/hh>
- [37] A. Hascoet, V. Pascual, TAPENADE 2.1 user's guide, Technical Report RT-300, INRIA, 2004
- [38] *Telemac : numerical modeling system for hydraulics developed by EDF-DRD*. <http://www.telemacsystem.com>.

Chapitre 6

Vers l'hydrologie et la glaciologie. Perspectives et travaux en cours

En guise de perspectives, je présente les travaux que j'ai récemment initié et qui devraient constituer l'essentiel de mes recherches à court et moyen terme. Ces travaux s'articulent autour de méthodes mathématiques et schémas numériques performants pour la modélisation numérique directe et inverse d'écoulements en glaciologie (calottes polaires) et en hydrologie (avec une ouverture vers l'infiltration dans les sols). A noter que ces deux thématiques font partie des thématiques majeures en vue d'une modélisation plus fine du système climatique global. Les difficultés mathématiques soulevées pour ces deux types d'écoulements sont multiples : réduction de modèle requis, couplage de phénomènes multi-échelles, sensibilité des modèles aux erreurs et aux paramètres, assimilation de données et calibrage.

Pour chacune de ces thématiques applicative, je développe les directions de recherche définies suite aux discussions menées avec les collègues glaciologues, hydrologues et hydrauliciens. Chaque axe de recherche sera développé en collaboration étroite avec eux et en s'appuyant sur des thèses et séjours post-doctoraux à venir.

6.1 Hydrologie des sols : infiltrations à l'échelle d'un bassin versant

A partir de début 2006, j'ai commencé à m'intéresser aux écoulements dans les sols. J'ai pu entrer dans cette nouvelle thématique applicative, qui est connexe à celle du projet région que j'ai mené précédemment, grâce à une collaboration avec I. Braud (Cemagref Lyon) et S. Anquetin (LTHE). Nous avons alors co-encadré un stage de fin d'études d'ingénieur (E. Neveu, 6 mois en 2006) au cours duquel j'ai pu m'initier d'une part au modèle traité (loi de Darcy et équations de Richards) et d'autre part prendre connaissance des méthodes actuellement employées au sein de la plate-forme Liquid, plate-forme développée par la start-up grenobloise HydroWide. Suite aux nombreuses discussions avec les collègues

hydrologues, j'ai petit à petit pu isoler quelques problèmes de modélisation et de schémas numériques qui me semblaient abordables à moyen terme. Nous avons défini un sujet de stage post-doctoral (Cemagref - LTHE, financement projet Européen). Ce stage est toujours à la recherche d'un candidat. J'ai participé à la rédaction de la proposition du projet ANR 2006 (non retenu) intitulé "Plate-forme de modélisation, hydrologie, intégration, couplage de modèles" et porté par I. Braud. Ces recherches en hydrologie s'effectuent également dans le cadre du plateau SOMME (Synergie Observation Modélisation en Modélisation de l'Environnement) d'Environnement (resp. I. Braud et FX Le Dimet), région Rhône-Alpes, et regroupant le Cemagref Lyon, le LTHE, le LJK et la Start-up Hydrowide.

Notons que l'ensemble de ces discussions et travaux préliminaires s'est avéré plus complexe que dans le cas d'un contexte de mécanique plus classique (hydraulique fluviale par exemple) du fait de la multiplicité et de l'hétérogénéité des problèmes pointés, de l'aspect multi-échelles spatio-temporels des écoulements et de la complexité des données sous-jacentes. La modélisation de tels écoulements par des EDPs, avec une prise en compte des contraintes hydrologiques, semble loin d'être évidente.

A l'automne dernier, j'ai proposé le stage M2R qu'effectue actuellement A. Martinez, et que nous co-encadrons avec M. Nodet (LJK). Ce stage traite de l'étude d'une formulation originale des équations de Richards (formulation due à P.J. Ross, voir [7] [8]).

Contexte hydrologique.

Les processus hydrologiques sont complexes, hétérogènes, multi-échelles et couplés. Parmi ces processus nous pouvons citer les précipitations (vues comme un terme source), l'infiltration dans les sols (nappes), les écoulements de surface (ruissellement, rivières), l'évapo-transpiration (évaporation du sol, transpiration des végétaux, évaporation de l'eau interceptée par la végétation), le transport de matière (polluants, sédiments), et ce que nous qualifierons de singularités à savoir la modification des chemins de l'eau par des éléments anthropiques (parcelles drainées, fossés, haies, routes, urbanisation etc).

Par ailleurs, les observations disponibles sont tout aussi complexes et hétérogènes. Nous pouvons citer très brièvement les mesures in-situ (hauteurs d'eau, débits), la scintillométrie (évapotranspiration sur un transect), la télédétection ; et nous disposons que de très peu voire de pas du tout de données sur les propriétés des sols.

Le passage de l'échelle locale où les modèles d'EDP semblent appropriés à l'échelle du bassin versant constitue une réelle difficulté. Les collègues hydrologues distinguent classiquement une échelle intermédiaire qui est une modélisation fine à l'échelle d'un sous-bassin versant (REW pour "Representative Elementary Watershed") avec pour objectif de passer à une paramétrisation des flux d'échanges à l'échelle du bassin versant, voir Fig. 6.1. Les cellules élémentaires du point de vue hydrologiques sont représentées par les RECs (Representative Elementary Columns), zones supposées homogènes du point de vue occupation et type de sols. Cet aspect multi-échelle est encore complexifié avec la présence des "singularités" (haies, fossés etc) mentionnés précédemment.

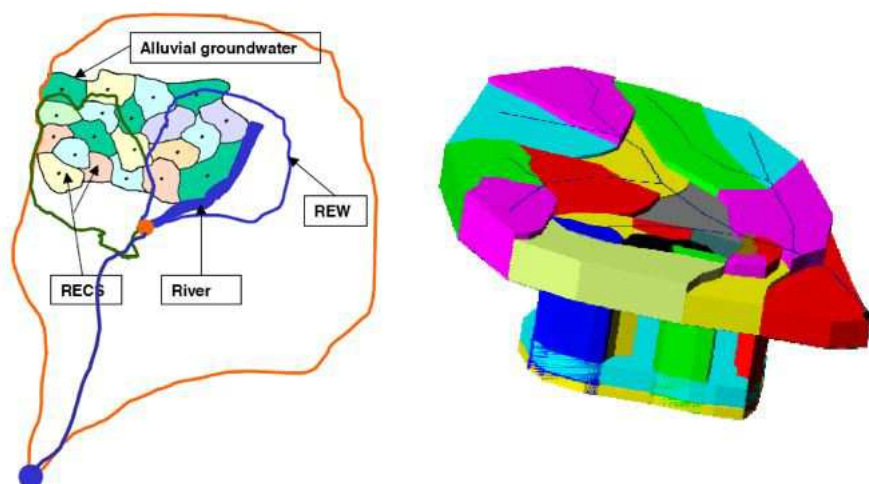


FIG. 6.1 – Représentation d'un bassin versant sous forme de RECs et REWs. Images issues du Cemagref Lyon.

Modélisation numérique d'écoulements grande échelle en sols saturés-insaturés.

Dans ce contexte hydrologique, nous commençons à étudier un modèle d'infiltration des eaux dans les sols : les équations de Richards 3D saturé - non-saturé, EDPs paraboliques fortement non linéaires avec lois à seuil éventuelles. Du fait des grandes échelles en vue (échelle d'un sous-bassin versant REW), une résolution des équations 3D de manière "frontale" est extrêmement coûteuse en temps de calcul. On se propose alors avec M. Nodet de revisiter et/ou d'élaborer une nouvelle formulation au problème (tant mathématique que numérique et algorithmique) qui permettrait de simuler numériquement l'infiltration des eaux à l'échelle d'un REW.

Commençons par les équations de Richards 1D (sujet M2R d'A. Martinez en cours). Ces équations peuvent être formulées de plusieurs manières différentes. Une formulation largement utilisée dans la communauté des hydrologues est celle établie dans [4], voir également [2], formulation en variable mixte taux de saturation - "pression". Cette formulation ne distingue à priori pas les zones saturées des zones insaturées. Elle présente l'avantage d'une formulation relativement synthétique mais présente l'inconvénient de requérir une finesse de maillage élevée du fait de la formulation "directe" des fortes non-linéarités présentes dans les équations. La formulation originale élaborée dans [7] (voir également [8]) conduit à deux formulations distinctes selon si l'on se situe dans

une zone saturée ou insaturée, sachant que le front de saturation (position de la nappe) fait partie de l'inconnue du système. Cette formulation basée sur une variable issue de la transformée de Kirchoff permet de découpler deux difficultés présentes, à savoir les fortes non-linéarités et la présence du front ou non. A. Martinez a montré au cours de son stage de M2R que la formulation de [7] est, à grille donnée, plus précise que la formulation plus classique issue de [4]. Autrement présenté, à précision donnée cette formulation conduit à des temps de calcul bien moins importants, voir [6].

Nous nous proposons à présent d'étudier les possibilités d'extension au 3D de cette formulation originale des équations de Richards, qui est basée sur la transformée de Kirchoff. Une extension au 3D devra prendre en compte la très forte anisotropie des sols et des écoulements. En effet, les cellules sont typiquement de l'ordre de l'hectare en horizontal pour quelques décimètres en profondeur, tandis que les dynamiques d'écoulement verticales et horizontales peuvent être de nature très différentes selon si le sol est saturé ou non.

Ensuite, plutôt que de raisonner en termes de schémas volumes finis, ce qui est actuellement le cas pour notre schéma 1D, nous nous proposons d'élaborer une discrétisation de ces équations à l'aide d'éléments finis type Galerkin discontinue, et ceci en vue de h-p-raffinements. Ces schémas (qu'ils soient du type VF ou DG) pourront être implémentés sur la base d'algorithmes de splitting, permettant de traiter les dynamiques différemment selon les directions privilégiées de l'écoulement (matrice de perméabilité dans les lois de Darcy). A terme une étude autour de la réduction d'ordre de ce modèle direct semble une direction complémentaire intéressante afin de pouvoir aborder l'échelle d'un sous-bassin versant REW.

A noter que le code de calcul correspondant pourra être développé dans le cadre de la plate-forme de modèles hydrologiques DassHydro (plate-forme commune à venir LJK - MOX Milano - univ. Malaga et Sevilla; voir paragraphe suivant). Un transfert des solveurs élaborés pourrait également être effectué auprès de la start-up grenobloise Hydrowide.

Analyse de sensibilité et assimilation de données. Aussi, une fois une formulation 3D efficace développée, nous pourrions aborder le couplage écoulement dans les sols - écoulement de surface (St-Venant 1D-2D). Un couplage de ces écoulements hydrologiques passera aussi par des analyses de sensibilités préalables. Dans la continuité, le calage des modèles pourra être effectué par assimilation de données.

Collaboration pays du Sahel.

J'ai effectué à quelques reprises des missions de formation et surtout d'aide à la mise en place de mathématiques appliquées au sein du département de mathématiques et informatique de l'université de Bamako (Mali). Suite à ces séjours, nous avons avec O. Diallo (resp. du département) échangés autour de modèles mathématiques en hydrologie. Il est à présent prévu que nous déposions auprès de l'AUF une demande de bourse de thèse en co-tutelle, sur cette thématique d'infiltration dans les sols et couplage sols 3D - rivière 1D, Fig. 6.1.

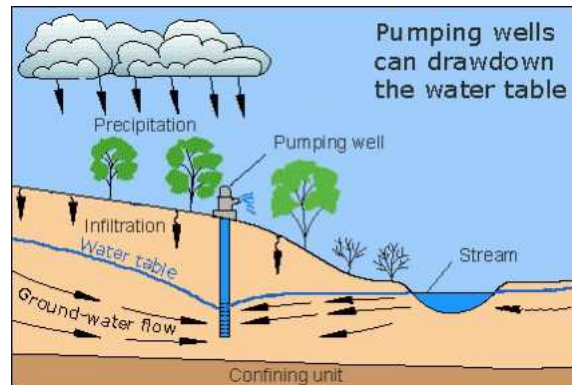


FIG. 6.2 – Schéma d’infiltration dans les sols et interactions sol-surface. Image issue du US Geological Survey.

6.2 Hydrologie : vers une plate-forme intégrée commune

Suite aux travaux en hydraulique fluviale précédemment décrits, nous avons initié avec E. Miglio, L. Bonaventura (MOX, Politecnico di Milano), une collaboration autour de la modélisation numérique des écoulements d’hydraulique fluviale et d’hydrologie (infiltrations). Aussi, suite aux travaux communs avec E. Fernandez-Nieto (univ. Sevilla), nous avons prévu d’élargir la collaboration avec les collègues de Malaga (M. Castro, C. Parès) autour de ce même type d’écoulements et schémas numériques.

Les collègues de Milan ont développé un modèle Shallow-Water quasi-3D (formulation éléments finis semi-implicite, semi-lagrangienne), voir [13], et plus récemment un modèle avec transports de sédiments, voir [12]. Aussi, ils ont élaborés pour l’équation de transport linéaire un nouveau schéma conservatif Galerkin discontinu basé sur une formulation semi-implicite semi-lagrangienne, [14]. Ce solveur semble intéressant du fait de sa stabilité inconditionnelle et de son aspect très peu diffusif. Ces modèles et solveurs ont tous été implémentés en Fortran 90.

Les collègues d’Andalousie ont quant à eux développé un large logiciel, dénommé DamFlow, et regroupant des modèles 1D - 2D - 3D (solveurs essentiellement volumes finis explicites, code en C++), voir [15] [10] [11].

J’ai alors proposé aux collègues de rapprocher nos savoir-faires, voire de fusionner nos codes dans certains cas, autour des écoulements de surface. Cette initiative a conduit à la mise en place actuelle de la plate-forme commune DassHydro, avec comme support et administration actuel J. Marin (ingénieur associé INRIA). Outre un travail de coordination, ma contribution porte aussi bien sur les solveurs directs que sur l’analyse de sensibilité, l’identification ou l’assimilation de données (processus de contrôle optimal). Une première action, relativement directe, consiste à insérer les solveurs de nos collègues de Milan (semi-implicites, écrits en Fortran 90) au sein de cette nouvelle plate-forme de calcul DassHydro. L’architecture logicielle de base est calquée sur celle de DassFlow, voir Fig. 6.2. Les nouveaux solveurs directs à insérer sont en cours d’étude,

et les travaux préliminaires d'architecture logicielle sont actuellement effectués par J. Marin. Du point de vue de la différenciation automatique, il est probable que deux difficultés se présentent. La première est liée à la différenciation des algorithmes type Newton-Raphson ou Picard, présents dans ces solveurs semi-implicites. La seconde est liée à la différenciation du calcul de pied des caractéristiques (solveurs semi-lagrangiens). Ces deux aspects devront être abordés avec le plus grand soin.

Le financement des actions futures relative à cette plate-forme commune reste à définir.

Très brièvement, les modèles et solveurs directs à potentiellement intégrer traitent d'écoulements avec sédiments, d'écoulements St-Venant multi-couches et d'équations de transports (polluants, fronts). Plusieurs couplages entre ces modèles sont envisagés. Aussi, au sein de nos trois équipes, nous disposons actuellement de solveurs différents pour un même type de modèle, chacun possédant ses avantages et inconvénients et pouvant être plus ou moins bien adapté à une configuration donnée. Citons à titre d'exemple le solveur volumes finis HLLC bien équilibré développé dans DassFlow qui s'avère très précis mais contraint par une condition de stabilité restrictive, tandis que le solveur St-Venant 2D semi-implicite semi-lagrangien du MOX s'avère plus diffusif mais inconditionnellement stable.

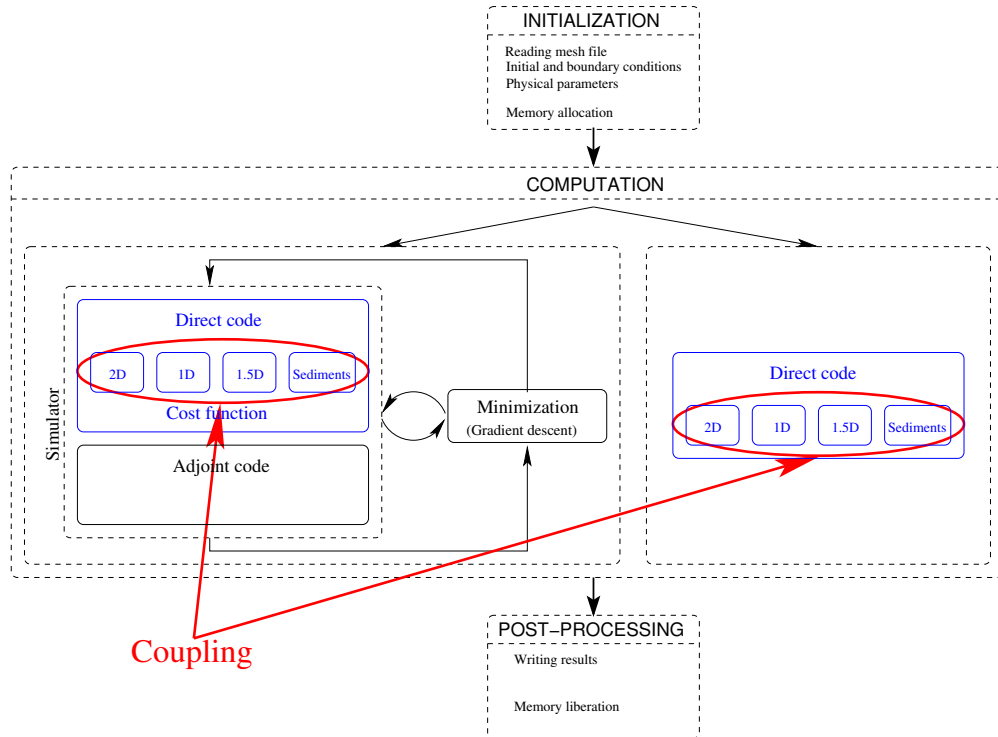


FIG. 6.3 – Structure du code commun DassHydro à venir. Gestion commune LJK - MOX -Univ. Malaga et Sevilla à venir. Support actuel : J. Marin (ingénieur associé INRIA).

A noter également que je participe à une proposition "Marie-Curie Initial Training Networks (ITN)" récemment déposé et qui rassemble un groupe de collègues européens plus large. L'objectif étant de collaborer autour de schémas numériques pour des écoulements environnementaux.

6.3 Glaciologie : modèles global et local d'écoulement de la calotte polaire

A l'automne 2005, j'ai commencé à m'intéresser à des écoulements issus d'une autre thématique applicative : la glaciologie. J'ai alors commencé par participer au projet ANR jeune chercheur MIDIGA (Modelling and Identification for Drilling Interpretation in Greenland and Antarctica, 2006-08) mené par F. Parrenin du LGGE Grenoble, [PaEtal06-c]. Suite à nos réunions de travail (avec O. Gagliardini, C. Ritz, F. Parrenin et E. Blayo notamment), les problèmes exposés ci-dessous seront abordés dans le cadre du BQR INP-G 07-10 que nous avons récemment obtenu (bourse de thèse notamment), et aussi de manière connexe dans le cadre d'un stage post-doctoral MIDIGA - LGGE à venir à l'automne 2007 ; le tout appuyé par un soutien développement de la part de J. Marin, ingénieur associé INRIA 06-08.

Le contexte scientifique. Le climat de notre Terre est un système d'une très grande complexité et notre capacité à prédire son évolution future passe par une meilleure compréhension des interactions entre le soleil, les océans, les surfaces terrestres, l'atmosphère et la cryosphère. Les calottes polaires jouent un rôle très important dans ce système, puisqu'elles sont à la fois des enregistrements, des témoins et des acteurs de l'évolution du climat. Nous nous intéressons tout particulièrement à deux problématiques, toutes deux liées aux écoulements des calottes.

- 1) Les forages glaciaires en Antarctique ont déjà révélé de nombreuses informations telles que la corrélation entre gaz à effet de serre et climat, et présence de rapides variations de température. L'interprétation de ces forages est en partie basée sur des modèles thermo-mécaniques d'écoulement de glace (modèles de datation). Cependant ces modèles d'écoulement doivent être améliorés pour pouvoir pleinement exploiter les nombreuses informations disponibles dans les carottages.
- 2) Les calottes polaires en tant que composante du système climatique représentent d'énormes réservoirs d'eau douce dont les variations agissent directement sur la salinité et le niveau des mers. L'estimation de l'état d'équilibre (en termes de gain ou de perte de masse d'ensemble) de ces grandes calottes représente donc un défi scientifique majeur pour notre futur. Dans cet équilibre, les glaciers côtiers émissaires jouent un rôle prépondérant puisqu'on estime qu'en Antarctique ils évacuent plus de 70% de la masse alors qu'ils ne représentent que 10% de la ligne de côte, Fig. 6.3. Des observations récentes mettent en évidence une accélération de ces glaciers. Les causes de cette accélération sont à ce jour uniquement spéculatives. Un effort de modélisation, couplé à des mesures de terrain semble intéressant pour comprendre les mécanismes régissant l'écoulement de ces glaciers émissaires.

L'objet de la thèse BQR INP-G 07-10 sera de contribuer à l'obtention de

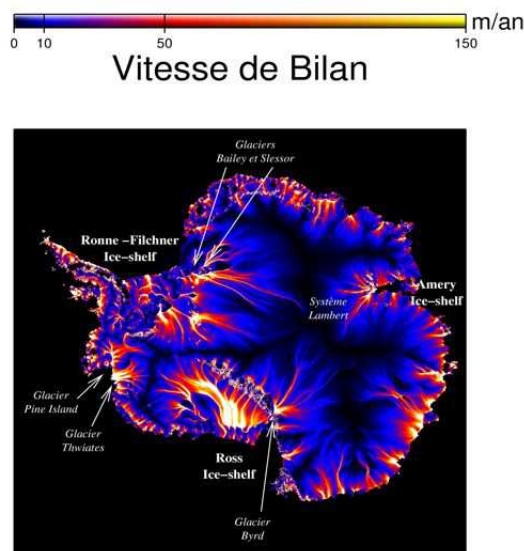


FIG. 6.4 – Antarctique. Vitesses de bilan (flux sortants). Image LEGOS Toulouse.

meilleurs modèles d'écoulements de la glace polaire tant au niveau local (modèle 3D frontières ouvertes) qu'au niveau global (modèle asymptotique "shallow-ice"). L'objectif serait ensuite l'assimilation d'un maximum de données disponibles (contribution du chercheur post-doctorant à venir). L'ensemble contribuerait à de meilleurs modèles de datation et à une meilleure compréhension des systèmes glaciaires côtiers.

Nous aborderons les problèmes suivants :

- 1) l'analyse de sensibilité et l'identification des conditions aux bords (latérales et basales) pour un modèle local haute résolution (Stokes non-linéaire surface libre) ;
- 2) le modèle asymptotique global grande échelle revisité avec conditions basales réalistes ;
- 3) le couplage de ces deux modèles (local Stokes et asymptotique global grande échelle) combiné à l'assimilation des données disponibles.

Les points 1) et 3) seront abordés avec une approche basée sur du contrôle optimal de système, et des algorithmes similaires à ceux présentés dans la chapitre précédent (hydraulique fluviale). Le point 2) sera abordé à partir des travaux de C. Ritz [21], [20] et aussi en collaboration avec D. Bresch (LAMA, Chambéry).

Les modèles d'écoulements locaux et globaux actuellement utilisés.

Nos études s'appuieront sur les deux modèles directs d'écoulements de calottes polaires actuellement utilisés par le LGGE :

1. Le modèle de Stokes 3D surface libre (anisotrope ou isotrope et avec viscosité non linéaire) co-développé par O. Gagliardini en collaboration avec le Center for Scientific Computing (CSC, Helsinki, Finlande). Les variables sont la vitesse,

la pression, les contraintes et la position de la surface libre (cas isotherme). Ce modèle est dit local et haute résolution car précis mais coûteux en temps de calcul, [18] [17].

2. Le modèle global grande échelle GRISLI (GRenoble Ice Shelf Land Ice) basé sur une asymptotique couche mince et développé par C. Ritz. Ce modèle «réduit» couche mince possède l'avantage, du fait de son faible coût de calcul, de pouvoir être utilisé pour l'intégralité de la calotte («grande échelle») et pour des simulations en temps longs (plusieurs centaines de milliers d'années). Par contre, l'hypothèse "shallow-ice" effectuée n'est plus valable lorsque le socle rocheux induit des effets majeurs ou encore dans un voisinage de la côte où se cotoient des écoulements rapides et lents, Fig. 6.3, [18] [21].

Nous considérons ici que des modèles d'écoulements isothermes. Les aspects thermiques sont indispensables en vue d'une modélisation fine mais ne pourront être envisagés qu'à moyen terme.

Etude 1. Modèle de Stokes frontières ouvertes, analyse de sensibilité et identification.

Si nous souhaitons développer les méthodes d'analyse de sensibilité et d'identification de paramètres (conditions aux frontières ouvertes et conditions basales) basées sur les techniques de contrôle optimal, une première étape consiste à obtenir le code adjoint du modèle de Stokes. Le LGGE utilise actuellement Elmer, code éléments finis Fortran 90, développé par le Center for Scientific Computing à Helsinki. Ce code (de 130 000 lignes environ) présente cependant l'inconvénient d'être fortement basé sur des pointeurs et n'est donc pas différentiable à l'aide d'un outil de différenciation automatique source-à-source tel que Tapenade (INRIA Sophia-Antipolis). Nous récupérerons alors l'ensemble des pré- et post-processeurs d'Elmer, et ré-écrivons un nouveau code de résolution du système de Stokes non-linéaire surface libre utilisé en 2D puis à terme en 3D. Ce travail de programmation se basera sur nos connaissances des schémas numériques écoulement surface libre (en faibles déformations) voir le chapitre précédent "écoulements surface libre" et [17], des normes de programmation nécessaires à la différenciation automatique.

Ce travail de programmation du noyau de calcul et d'interfaçage logiciel sera en partie effectué par J. Marin, ingénieur associé.

Les directions de recherche pourront alors porter sur l'analyse de sensibilité aux conditions aux bords ainsi que l'identification (quantitative) de ces conditions aux bords, et ceci à partir d'observations disponibles. Les bords concernés sont les bords latéraux (frontières ouvertes, vitesses ou contraintes) et le fond (glissement - friction, présence de lacs ou pas).

Les observations "brutes" disponibles et à potentiellement assimiler sont : la topographie de surface (altimétrie+GPS), des échos radars (socle rocheux, épaisseur de glace, présences de lacs, isochrones), des vitesses de surface et à terme l'anisotropie de la glace (au niveau des forages).

Les questions d'assimilation d'échos radars seront abordées dans le cadre du stage post-doctoral LGGE (supervisé par F. Parrenin, [19], [20], [PaEtal06-c]).

Etude 2. Modèle asymptotique global grande échelle revisité.

Nous aborderons une re-dérivation du modèle d'écoulement couche mince

isotherme issu d'une asymptotique 2nd ordre sur les équations type Stokes isotrope/anisotrope (newtonien/non-newtonien) avec surface libre (modèle global isotherme grande échelle Grisli de C. Ritz). Les inconnues du modèle sont la vitesse, la pression, les contraintes et la position de la surface libre. La difficulté de cette re-dérivation réside dans le passage à l'asymptotique mathématique, d'une part des conditions aux frontières ouvertes, d'autre part des conditions basales non triviales. Cette étude constitue une étape importante du couplage des modèles global et local (étude 3). Ce travail s'effectuera avec C. Ritz (LGGE) et D. Bresch (LAMA) et s'appuiera sur leurs compétences respectives en modélisation couche mince et dérivations asymptotiques.

Etude 3. Couplage modèles et assimilation de données simultanée.

Ce dernier point constitue un objectif final du travail de thèse. Il s'agit d'une part de coupler le modèle Stokes haute résolution (étude 1) au modèle asymptotique grande échelle (étude 2) au travers des « meilleures » conditions aux frontières ouvertes établies précédemment. L'algorithmique de couplage sera basée sur un processus de contrôle optimal (couplage faible type méthode des joints). Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent (contexte hydraulique fluviale), une telle approche présente plusieurs avantages parmi lesquels :

- a) couplage de deux modèles hétérogènes et de grilles spatio-temporelles fortement disparates ;
- b) assimilation de données simultanée (processus commun de contrôle optimal) conduisant à un couplage "optimal" ;
- c) assimilation de données locales (ex. forages ou écoulements côtiers) dans le modèle global (calibrage de ce dernier).

L'ensemble de ces travaux débutera véritablement en septembre 2007.

Références personnelles ou en collaboration

Congrès internationaux avec actes avec comité de lecture

- [HoLaLeDiMo07-b] M. Honnorat, X. Lai, FX Le Dimet, J. Monnier. "*Assimilation of remote sensing data for river flows*". MAMERN'07 Granada, July 2007. Extended abstract.
- [HoLaLeDiMo07-b] M. Honnorat, X. Lai, FX Le Dimet, J. Monnier. "*Assimilation of images for river hydraulics simulations*". Invited talk. ICIAM Zurich, July 2007.

Congrès nationaux avec actes

- [LeHeHuMeMo06-c] F.-X. Le Dimet, I. Herlin, E. Huot, E. Mémin, J. Monnier "*AssImage : étude de techniques d'assimilations de données image dans des modèles de simulation de fluides géophysiques*" Colloque National sur l'assimilation de données, Toulouse, 9-10 mai 2006.
- [PaEta106-c] F. Parrenin, E. Blayo, L. Debreu, FX Le Dimet, O. Gagliardini, J. Jouzel, B. Legrésy, B. Lemieux, J. Monnier, F. Rémy, C. Ritz, M. Sa "*Conjonction de modèles et données pour l'étude des calottes polaires*".

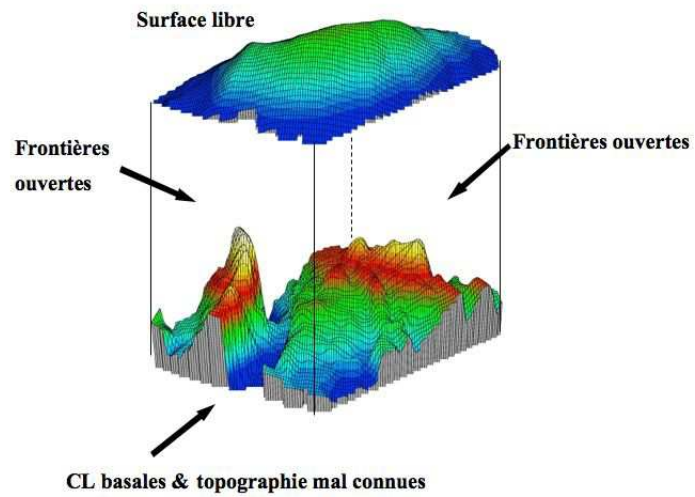


FIG. 6.5 – Modèle local 3D (non linéaire, surface libre) et conditions aux bords à identifier. Image LGGE.

Colloque National sur l'assimilation de données, Toulouse, 2006.

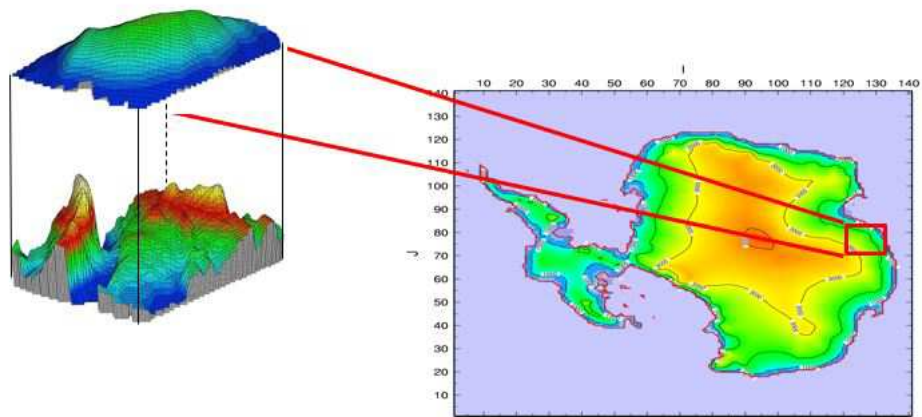


FIG. 6.6 – Superposition du modèle local Stokes 3D au modèle global asymptotique Grisli ("shallow-ice"). Images LGGE.

Références principales du chapitre

- [1] — Hydrologie : équations de Richards —
- [2] R. Ababou. Three-dimensional flow in random porous media. *Thesis (PhD), Massachusetts Institute of Technology, Dept. of Civil Engineering*, 1988.
- [3] Bui-Thanh, T., Willcox, K., Ghattas, O. Bloemen Waanders, B. (2007), *Goal-Oriented, Model-Constrained Optimization for Reduction of Large-Scale Systems*. Journal of Computational Physics. To appear.
- [4] M.A. Celia, E.T. Bouloutas, R.L. Zarba, *A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation*. Water Resource Res. 26 (1990) 1483-1496.
- [5] Li, H., M.W. Farthing, C.N. Dawson, and C.T. Miller (2007) *Local Discontinuous Galerkin Approximations to Richards' Equation*. In press, Advances in Water Resources.
- [6] A Martinez. *Modélisation numérique d'écoulements grande échelle en hydrologie-sols saturés / insaturés*. Memoire de stage M2R, LJK, 2007.
- [7] P. J. Ross, *Modeling Soil Water and Solute Transport—Fast, Simplified Numerical Solutions*. Agron. J. 95 :1352–1361 (2003).
- [8] N. Varado, I. Braud, P.J. Ross, R. Haverkamp. *Assesement of an efficient numerical solution of the 1D Richards' equation on bare soil*. J. of Hydrology, 323, pp 244-257, 2006.
- [9] — Solveurs plate-forme DassHydro —
- [10] M.J. Castro Diaz, E.D. Fernandez Nieto, A.M. Ferreiro Ferreiro, *Some Well-Balanced Shallow Water-Sediment Transport Models*. Numerical Mathematics and Advanced Applications. Proceedings of Enumath 2005, Berlin. Springer-Verlag. Vol. 1. pp 190-197. 2006.
- [11] M.J. Castro, A.M. Ferreiro, J.A. Garcia, J.M. González, J. Macias, C. Parés and M.E. Vázquez. *On the numerical treatment of wet/dry fronts in shallow flows : applications to one-layer and two-layer systems*. Math. Comput. Model, vol. 42, no3-4, pp. 419-439. 2005.
- [12] A. Deponti, L. Bonaventura, L. Fraccarollo, E. Miglio, G. Rosatti *Analysis of Hyperbolic Systems for Mobile-Bed, Free-Surface Flow Modelling in Arbitrary Cross Sections*. Research report MOX, june 2007.
- [13] E Miglio, A Quarteroni, F Saleri, *Finite element approximation of Quasi-3D shallow water equations*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 174 (3-4), pp 355-369, 1999.

- [14] M. Restelli, L. Bonaventura, R. Sacco, *A semi-Lagrangian discontinuous Galerkin method for scalar advection by incompressible flows*. Journal of Computational Physics, 216, pp. 195-215, 2006.
- [15] Modular software package for the simulation of hydrodynamic flows in rivers, channels, estuaries, lakes and seas. Univ. of Malaga and Sevilla. <http://www.damflow.org>.
- [16] — Glaciologie —
- [17] Gagliardini O., D. Cohen, P. Raback and T. Zwinger. *Finite-element modeling of subglacial cavities and related friction law*. Journal of Geophysical Research, Earth Surface, to appear, 2007.
- [18] Le Meur E., O. Gagliardini, T. Zwinger and J. Ruokolainen. *Glacier flow modelling : a comparison of the Shallow Ice Approximation and the full-Stokes solution*. C.R. physique, 5, p. 709-722, 2004.
- [19] Parrenin F., Hindmarsh R., Rémy F., *Analytical solutions for the effect of topography accumulation rate and lateral flow divergence on isochrone layer geometry*. J. Glacio., 52 (177) pp 191-202, 2006
- [20] Parrenin, F., Remy, F., Ritz, C., Siegert, M. J., and Jouzel, J., *New modeling of the Vostok ice flow line and implication for the glaciological chronology of the Vostok ice core*. J. Geophys. Res., 109(D20), D20102, 2004.
- [21] Ritz, C, V. Rommelaere and C. Dumas, 2001. *Modelling the evolution of Antarctic ice sheet over the last 420,000 years : implications for altitude changes in the Vostok region*. J. Geophys. Res., 106(D23), p. 31943-31964.

Récapitulatif références personnelles ou en collaboration

Revue internationale à comité de lecture

9. I. Gejadze, J. Monnier. "On a 2D zoom for 1D shallow-water model : coupling and data assimilation". "An existence and uniqueness result in bone remodeling theory". Comp. Meth. Appl. Mech. Engr. (CMAME). Accepted, to appear in 2007.
8. M. Honnorat, J. Monnier, FX Le Dimet. "Lagrangian data assimilation for river hydraulics simulations". Comput. Visu. Sc. (CVS). Accepted, to appear in 2007.
7. J. Monnier, A. Benselama, I. Cotoi. "Flow patterns in the vicinity of triple line dynamics arising from a local surface tension model". Int. J. Comput. Multiscale Comput. Eng. (IJCMCE). Accepted, to appear in 2007.
6. J. Monnier, P. Witomski. "Analysis of a Local Hydrodynamics Model with Marangoni effect". J. Sc. Comp. (JSC), 21 (3) : 369-403, 2004
5. J. Monnier. "Shape sensitivities in a Navier-Stokes flow with gray bodies thermal transfer". Optim. Control Appl. Meth. (OCAM). 24 (5), pp 237-256, 2003
4. D. Chenais, J. Monnier, J.P. Vila. "A shape optimal design problem with convective and radiative thermal transfer. Analysis and implementation". J. Optim. Theory Appl. (JOTA). 110 (1) 2001.
3. J. Monnier. "Free convection with radiative thermal transfer of grey bodies. Analysis and approximation by finite element methods". Math. Models and Meth. in Appl. Sc. (M3AS). 9 (10), 1383-1424, 2000.
2. J. Monnier, J.P. Vila. "Convective and radiative thermal transfer with multiple reflections. Analysis and approximation by a finite element method". Math. Models and Meth. in Appl. Sc. (M3AS). 2 (11) 2001.
1. J. Monnier, L. Trabucchi. "Existence and uniqueness of solution to an adaptive elasticity model". Mathematics and Mechanics of Solids (M2S). 3 (2), 217-228, 1998.

Articles soumis

4. X. Lai, J. Monnier. "Assimilation of spatial distributed water levels into a shallow-water flood model. Part I : mathematical method and toy test case". J. Hydrology.
3. M. Honnorat, N. Rivière, J. Monnier, E. Huot, FX Le Dimet. "Assimilation of lagrangian floaters in an open channel". Comput. Visu. Sc. (CVS).
2. E.D. Fernandez-Nieto, D. Bresch, J. Monnier. "A consistent intermediate wave speed for a well-balanced HLLC solver". C.R. Acad. Sc. Paris, Série I.
1. J. Monnier, P. Witomski, P. Chow-Wing-Bom, C. Scheid. "Numerical modelling of electrowetting by a shape inverse approach". SIAM Appl. Math. Version révisée en cours de review (soumis en 2005).

Preprints (articles à soumettre)

2. R. Hostache, X. Lai, J. Monnier, C. Puech, A. Paquier. "Assimilation of spatial distributed water levels into a shallow-water flood model. Part II : using one satellite image of Moselle river".
1. E. Fernandez-Nieto, J. Marin, J. Monnier. "Coupling 1D-2D St-Venant river models : global well-balanced finite volume scheme".

Revues internationales à comité de lecture : actes de congrès internationaux publiés dans

4. W. Castaings, D. Dartus, M. Honnorat, FX Le Dimet, Y. Loukili, J. Monnier. "Automatic Differentiation : a tool for variational data assimilation and adjoint sensitivity analysis for flood modeling. In "Automatic Differentiation : Applications, Theory, and Tools", Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Bucker-Corliss-Hovl-Naumann-Norris Eds, Springer, 2006.
3. J. Monnier, P. Witomski. "A local surface model applied to contact line dynamics. Nonlinear Analysis, 63, pp1551-1559, 2005.
2. J. Monnier, L. Trabuco. "An existence and uniqueness result in bone remodeling theory". Comp. Meth. Appl. Mech. Engnr. (CMAME). 151 (1998) 539-544.
1. D. Chenais, J. Monnier, J.P. Vila. "Shape optimal design for a fluid-heat coupled system". Appl. Math. and Comp. Sc. 1996, vol. 6, No2, 245-261.

Logiciels : rapports de recherche INRIA

5. A. Benselama, J. Monnier. "Navier-Stokes ALE free surface flow with generalized Navier slip conditions. Droplet impact and attempt using Comsol Multiphysics 3.2. Report INRIA RR-6175, april 2007.
4. M. Honnorat, J. Marin, J. Monnier, X. Lai. "DassFlow v1.0 : a variational data assimilation software for river flows. Report INRIA RR-6150, march 2007
3. Y. Loukili, M. Honnorat, FX LeDimet, J. Monnier. "DassFlow : un modèle direct et inverse d'écoulements St-Venant 2D. Report INRIA RR-5756, november 2005
2. J. Monnier, P. Chow-Wing-Bom "ElectroCap : A shape inverse model for an electro-capillary process. Report INRIA RR-5617, July 2005.
1. Y. Loukili, M. Honnorat, J. Monnier. "T2DInverse : Towards calibration and sensitivity analysis into Telemac2D using automatic differentiation. Report INRIA RR-5618, July 2005.

Congrès internationaux avec actes à comité de lecture

- . J. Monnier, M. Honnorat, X. Lai, FX Le Dimet. "Assimilation of remote sensed data for river hydraulic simulations". Invited talk. ICIAM Zurich, July 2007.
- . J. Monnier, M. Honnorat, X. Lai, FX Le Dimet. "Assimilation of remote sensing data for river flows". MAMERN'07 Granada, July 2007. Extended abstract.
- . I. Gejadze, J. Monnier. "Superposition of a local zoom model using optimal control. Application to 1D-2D river flows". ECCOMAS 'Coupled problems'. Ibiza, May 2007.

- . I. Gejadze, J. Monnier. "A joint data assimilation coupling algorithm applied to shallow-water flood models". ECCOMAS CFD, Egmond aan Zee, September 2006.
- . M. Honnorat, FX Le Dimet, J. Monnier. "Lagrangian data assimilation for river hydraulics simulation". ECCOMAS CFD, Egmond aan Zee, september 2006.
- . J. Monnier, M. Honnorat, I. Gejadze, FX Le Dimet. "On variational data assimilation methods for 1D and 2D fluvial hydraulics". Invited talk. 14th European Conference on Mathematics for Industry ECMI. Madrid, july 2006.
- . I. Gejadze, J. Monnier. "On data assimilation for a 1D-net river model with 2D zoom areas". CMWR XVI-Computational Methods for Water Ressources. Copenhagen, june 2006.
- . M. Honnorat, X. Lai, J. Monnier, FX Le Dimet. "Variational data assimilation for 2D fluvial hydraulics simulation". Invited talk. CMWR XVI-Computational Methods for Water Ressources. Copenhagen, june 2006.
- . M. Honnorat, FX Le Dimet, J. Monnier. "On a river hydraulics model and lagrangian data assimilation". Invited talk. ADMOS05. Barcelona, sept. 2005.
- . J. Monnier, P. Witomski. "A shape inverse approach modelling electro-wetting". 6th WCSMO Brazil, May 2005.
- . J. Monnier, P. Witomski. "A hydrodynamic model with local Marangoni effects arising from microfluidics." Eds P. Neittaanmäki, T. Rossi, K. Majava, O. Pironneau, S. Korotov, E. Oñate, J. Périaux, D. Knörzer. ECCOMAS'04. Jyväskylä, Finland, July 2004.
- . J. Monnier. "Shape optimal design problem in fluid mechanics with thermal transfer". Invited talk. ECCOMAS'98, Eds : Papailiou-Tsahalis-Periaux-Knorzer, John Wiley-Sons, vol. 2 (1998) 142-147.
- . J. Monnier, D. Chenais, J.P. Vila. "Shape optimization for an aerothermic problem". In : "Structural and Multidisciplinary Optimization", Pergamon, Eds N. Olhoff and G. Rozvany, pp. 757-764, 1995.

Congrès nationaux avec actes

- . J. Monnier, I. Gejadze, M. Honnorat, FX Le Dimet "Assimilation de données variationnelle pour des modèles d'hydraulique fluviale. Colloque National sur l'assimilation de données, Toulouse, 9-10 mai 2006.
- . F.-X. Le Dimet, I. Herlin, E. Huot, E. Mémin, J. Monnier "AssImage : étude de techniques d'assimilations de données image dans des modèles de simulation de fluides géophysiques Colloque National sur l'assimilation de données, Toulouse, 9-10 mai 2006.
- . F. Parrenin, E Blayo, L Debreu, FX Le Dimet, O Gagliardini, J Jouzel, B Legrésy, B Lemieux, J Monnier, F Rémy, C Ritz, M Sa "Conjonction de modèles et données pour l'étude des calottes polaires Colloque National sur l'assimilation de données, Toulouse, 9-10 mai 2006.

Documents de cours (école d'été CEA)

- . J. Monnier. "Modélisation numérique de la dynamique de la ligne triple". Ecole d'été CEA "Interfaces Fluide-Fluide". SLB-SBS-DSIS-LETI-CEA Grenoble, Septembre 2003.

Thèse et mémoire de DEA

- . J. Monnier. " *Conception optimale de forme pour un système couplé fluide-thermique. Application à l'aérothermique d'un véhicule.*" Thèse de l'Université de Nice - Sophia-Antipolis (Contrat CIFRE Renault-Simulog). Décembre 1995.
- . J. Monnier. " *Système des équations de la dynamique des gaz compressibles. Implémentation de schémas éléments finis avec diffusions artificielles issues de symétrisations entropiques*". J. Monnier. Rapport de DEA de mathématiques, Université de Nice - Sophia-Antipolis. Juillet 1992.

Récapitulatif encadrements

Thèses

- T. Mastro Simone. Thèse INP-G. Bourse ministère BQR INP-G oct. 2007 - 2010.
"Couplage de modèles et assimilation pour les écoulements de calotte polaire".
Co-encadrement avec O. Gagliardini (MCF LGGE HDR, 30%).
- M. Honnorat Thèse INP-G. Bourse CNRS BDI-CNES déc. 2003 - déc. 06.
"Assimilation de données lagrangiennes pour la simulation numérique en hydraulique fluviale". Co-encadrement avec FX LeDimet (Pr UJF, 20%).
Terminé en déc. 06, soutenue oct. 07. Rapporteurs : JC Gilbert (DR INRIA), O. Thual (Pr Univ. Toulouse).
M. Honnorat est actuellement en postdoc au LJK - Moise (resp. L. Debreu).

Stages M2R (DEA)

- A. Martinez DEA UJF Grenoble- Univ. Bordeaux. Juillet 2007.
"Modélisation numérique d'écoulements grande échelle en sol saturés / non-saturés (infiltration, équations de Richards)".
Co-encadrement avec M. Nodet (MCF UJF, 50%).
- M. Honnorat DEA UJF Grenoble- Insa Rouen. Juillet 2003.
"Schémas éléments finis d'écoulements à surface libre en eaux peu profondes".
Co-encadrement avec FX LeDimet (Pr UJF, 10%).
- B. Leteurtre, DEA UJF Grenoble - Ensimag. Juillet 2003.
"Modélisation fine de la dynamique du contact liquide-solide-gaz. Effet Marangoni local".
Co-encadrement avec P Witomski (Pr UJF, 10%).
- P. Chow-Wing-Bom, DEA UJF Grenoble - Ensimag. Juillet 2003.
"Modélisation numérique d'une lentille adaptative. Approche par optimisation de forme".
Co-encadrement avec P Witomski (Pr UJF, 10%).
- J. Etienne, DEA UJF Grenoble - Ensimag. Juillet 2001.
"Simulation d'écoulements visqueux axisymétrique avec tension de surface ; reformulation ALE des équations de Navier-Stokes".
Co-encadrement avec P Saramito (CR Cnrs, 40%).
- B. Blanchard, DEA UJF Grenoble - Ensimag. Juillet 1999.
"Calcul d'un écoulement diphasique par la méthode des lignes de niveau".
Co-encadrement avec P Witomski (Pr UJF, 20%).
- S. Putot, DEA UJF Grenoble - Ensimag. Juillet 1997.

"Contrôle de la température lors d'un procédé de cristallisation de matériaux semi-conducteurs".

Co-encadrement avec P Witomski (Pr UJF, 20%).

Chercheurs postdoctorants

- Y. Loukili (ingénieur Canada). 2004 (10 mois).
"Différenciation automatique de Telemac2D".
Encadrement 100%.
- I. Gejadze (univ. Strathclyde). 2005 (16 mois).
"Couplage et assimilation simultanée de modèles de St-Vennat 1D-2D".
Encadrement 100%.
- X. Lai (Ac. Sc. Chine, Nandging). 2006 (10 mois).
"Assimilation d'images satellites dans un modèle d'hydraulique fluviale".
Encadrement 100%.
- A. Benselama (CEA et UJF). 2006 (10 mois).
"Modèle de dynamique de ligne triple pour l'impact de gouttelettes".
Co-encadrement 80% (CEA-Leti 20%).

Ingénieur associé INRIA (CDD 2 ans)

- J. Marin (Ingénieur Ensimag 2006). CDD 2006-08.
"DassFlow. Schémas numériques, co-développement, maintenance et diffusion logiciel".
"Glaciologie. Schémas numériques, code de calcul direct et adjoint.".
Encadrement 100%.

Stages Ingénieurs

- E. Neveu. Ensimag 3A. Sept. 2006.
"Analyse numérique d'un modèle 3D d'écoulements d'eau dans le sol".
Co-encadrement avec I. Braud (DR Cemagref Lyon, 40%) et Sté Hydro-wide (Grenoble, 30%) .
- R. Vignes. Ensimag 2A . Sept. 2005.
"Schémas surface libre ALE".
- I. Cheddadi. Ensimag 2A . Sept. 2004.
"Différenciation automatique de Telemac2D".
- P. Tchendjou. Ensimag 2A . Sept. 2003.
"Calcul de courbure à petite échelle en C++".
- S. Graillat. Ensimag 2A . Sept. 2000.
"Simulation numérique d'un procédé de mouillage d'un solide".

Notons enfin l'encadrement de très nombreux projets ingénieurs Ensimag 2A

(durée de 1 mois en binôme).