

## RAPPORT D'AVANCEMENT 2021-2022

Ecole Doctorale: Sciences Fondamentales - Santé

**Monsieur Bastien BODIN**

**Financement :** Financement d'un Etablissement d'enseignement supérieur

Contrat : Contrat doctoral de droit public

Durée : du 1 octobre 2021 au 30 septembre 2024

Employeur : URCA

Origine des fonds : URCA (100%)

Année d'inscription en 2021-2022 : 1 A

Sujet : SPH4PS (SPH for Planetary Surfaces) : Modélisation, par la méthode SPH, d'écoulements liquides à la surface de Titan – Application à d'autres surfaces de satellites de glaces.

Acronyme/sigle du projet (si existant) :

Unité de Recherche : GSMA - Groupe de Spectroscopie Moléculaire et Atmosphérique

Directeur de l'Unité de Recherche : MAUD ROTGER-LANGUEREAU

Directeur de thèse : Daniel CORDIER

Porteur(s) du projet :

Partenaires éventuels :

Co-tutelle : non

Période de réalisation de la totalité du projet, année 2021-2022 : 2021-2024, année 1

## Avancement 2021-2022

### Rappel des objectifs de l'année 2021-2022 :

Octobre 2021 - décembre 2021 : Familiarisation avec la méthode SPH et le corpus scientifique du contexte planétologique de Titan.

Année 2022 : Développement du modèle de SPH adapté au contexte de Titan, dans un premier temps pour le méthane liquide (problématique hydrologique), dans un deuxième temps la conduction de la chaleur et la variation de viscosité seront incluses en vue de l'application aux cryolaves.

### Résultats de l'année 2021-2022 (hors formations suivies)

Conformément au calendrier prévisionnel, la première partie de cette première année aura été consacrée principalement à la familiarisation avec la méthode SPH, ainsi qu'au corpus scientifique du contexte planétologique de Titan.

L'objectif de cette thèse est de créer un modèle numérique d'écoulement liquide de méthane liquide ainsi que de cryolave, une lave composée de glace d'un mélange d'eau et d'ammoniac, ayant lieu sur Titan, satellite principal de Saturne. Ce modèle pourra être adapté pour correspondre aux écoulements se produisant sur d'autres satellites de glace, tels que Europe (satellite de Jupiter) et Encelade (autre satellite de Saturne).

La méthode "Smoothed-Particle Hydrodynamics" (SPH) est une méthode lagrangienne de simulation numérique permettant de résoudre les équations de la mécanique des fluides, en remplaçant le fluide par un ensemble de particules, des points d'interpolation à partir desquels les propriétés du fluide peuvent être calculées.

Cette méthode a de nombreux avantages, comparée aux méthodes aux éléments finis. Un premier avantage est sa pertinence lors de simulations d'écoulements à surface libre (rivières, lac, ...). Un autre avantage est la facilité de parallélisation de la simulation, malgré le coût de calcul initial plus important qu'avec des méthodes par maillage.

Pour ce qui est de l'implémentation du code, un premier code "test" aura été rédigé en Fortran 90, afin de découvrir totalement cette méthode numérique. Cependant, pour des raisons d'optimisation et de simplicité, notre choix final aura porté sur l'utilisation de la bibliothèque PySPH, une bibliothèque de SPH utilisable sous Python 3.7+ et facilement adaptable à tout type de problème.

La méthode SPH est basée sur l'approximation de la représentation intégrale d'une fonction mathématique. Les deux principales approximations réalisées sont :

- L'approximation d'une fonction Dirac par une fonction "de lissage" pour des raisons physiques ;
- L'approximation de l'intégrale par une somme pour des raisons de discrétisation numérique.

Un des choix les plus importants lors de l'utilisation de cette méthode est donc le choix de cette fonction de lissage. Celle-ci doit répondre à plusieurs critères :

- Le noyau doit être normalisé. Cette propriété découle de la définition de la fonction Dirac à laquelle la fonction de lissage se substitue ;
- La fonction de lissage doit être définie dans un domaine compact. Cette condition est utile pour l'implémentation du programme car elle limite la zone de recherche des particules voisines ;
- La fonction de lissage doit être positive sur le domaine. Cette condition est une condition physique, qui peut mener à des phénomènes non-physiques si non respectée ;
- La fonction de lissage doit décroître de façon monotone avec la distance. Cette condition assure que les voisins les plus proches ont une plus grande influence que les particules les plus éloignées.
- Le noyau doit tendre vers une fonction Dirac. Cette condition assure la convergence mathématique lors de la diminution de la résolution.
- La fonction de lissage doit être symétrique. Cette condition assure que deux particules à distance égale d'un point exercent la même influence
- Le noyau doit être suffisamment lisse. Cette condition assure de meilleurs résultats quand les particules sont désordonnées.

Ces critères sont les principaux critères qui guident la sélection de la fonction de lissage. Le choix de cette fonction s'est basé sur les résultats comparatifs disponibles dans la littérature, et la vérification de ces critères aura été vérifiée pour quelques fonctions, dont celle que nous aurons choisie (ici, noyau à spline quintique).

Il aura fallu se concentrer tout d'abord sur l'implémentation des équations de Navier-Stokes, équations régissant le comportement des fluides visqueux. L'aspect Lagrangien de la méthode numérique est visible ici, car nous implémentons ces équations dans leur formulation Lagrangienne, c'est-à-dire dans un repère qui suit une particule dans son mouvement. Ce système d'équations est composé de :

- Une équation de continuité (ou équation de bilan de masse)
- Une équation de bilan de quantité de mouvement.

Cette dernière aura été des plus longues à implémenter. Une première version faisait appel à une viscosité artificielle aura été choisie en première approche.

Une fois cette implémentation réalisée, une question était d'implémenter les conditions aux limites du domaine. Il faut noter que le problème des conditions aux limites dans la SPH est un problème ouvert, et il existe une multitude de solutions, présentant chacune avantage et inconvénient. Notre choix s'est arrêté sur les conditions aux limites dynamiques (ou Dynamic Boundary Conditions, DBC). Cette condition consiste en une succession de particules possédant les mêmes propriétés que le fluide, mais où l'équation de quantité de mouvement n'est pas résolue : seule l'équation de continuité l'est.

Après avoir implémenté les équations, il aura fallu procéder à l'intégration numérique, ce afin d'obtenir, pour chaque particule :

- La masse volumique à partir de l'équation de continuité, nécessitant une simple intégration ;
- La vitesse et la position à partir de l'équation de bilan de quantité de mouvement, nécessitant respectivement une simple et une double intégration.

Notre choix s'est porté sur la méthode d'intégration de Verlet symplectique, car celle-ci est adaptée aux problèmes Lagrangiens, est d'ordre 2, et la version implémentée prend également en compte l'évolution de la densité et la présence de forces visqueuses.

Tous ces éléments auront été testés et comparés aux résultats industriels de rupture de barrage, afin de confirmer leur bonne implémentation.

Après ces tests aura été implémentée la conduction thermique, ainsi qu'une nouvelle implémentation de la viscosité dans l'équation de continuité, afin de prendre en compte une viscosité physique ainsi que le couplage entre viscosité et température. En effet, l'influence de la température ne peut être négligée et a une importance majeure sur la viscosité du fluide, ce qui a un impact direct sur la quantité de mouvement résultante.

En lien avec la conduction thermique auront été implémentées la convection thermique sous deux formes (naturelle et forcée) ainsi que les pertes de chaleur par radiation (où l'on considère que le fluide considéré se comporte comme un corps noir) afin de correspondre à la physique ayant lieu sur Titan.

Une dernière implémentation est celle de la solidification. Celle-ci aura été implémentée grâce à l'ajout d'un paramètre, représentant la fraction de chaleur latente gagnée/perdue durant la transition de phase.

À ce stade, nous commençons donc une première étape de mise en production sur les supercalculateurs ROMEO, de l'URCA, et HAL, du CNES.

## **METHODES ET MOYENS**

Année 2023 :

- Mise en production des programmes sur supercalculateur ;
- Début de rédaction des articles.

Année 2024 :

- Fin de rédaction des articles et soumissions ;

- Rédaction du manuscrit de thèse et préparation de la soutenance.

## **OUVERTURE INTERNATIONALE**

### **Objectifs de l'année 2022-2023 : 1 page maximum (Planning 2022-2023 Prévisions, Achèvement des manips, rédaction, soutenance)**

Le programme est conforme aux attentes, nous conservons donc le planning établi en début de thèse, c'est-à-dire :

- Mise en production des programmes sur supercalculateur
- Début de rédaction des articles.

À cela s'ajoutent la rédaction et la présentation d'un poster pour le colloque quadriennal du Programme National de Planétologie (PNP) à Lyon fin juin, ainsi que la préparation d'un poster pour une possible présentation lors du Congrès Européen de Science Planétaire (EuroPlanet Science Congress, EPSC) se déroulant à Grenade, Espagne, fin septembre 2022.

## Valorisation 2021-2022

### PLAN INDIVIDUEL DE FORMATION

#### FORMATIONS SUIVIES

##### Méthodologie et outils de la thèse

- BU Réussir sa rédaction de thèse - 10 mars 2022 - 3 heures - Crédits/Points : 1
- BU Etre publié aujourd'hui - 17 mars 2022 - 3 heures - Crédits/Points : 1
- La protection du droit d'auteur dans un environnement scientifique ouvert - 05 avril 2022 - 3 heures - Crédits/Points : 1
- BU Trouver et organiser sa documentation - 26 avril 2022 - 3 heures - Crédits/Points : 1

##### Formations générales

- Prévention des risques et sécurité - 14 février 2022 - 3 heures - Crédits/Points : 1

##### Autres dispositions permettant l'octroi des crédits

- JRED - Journée de Rentrée des Ecoles doctorales de l'URCA - 11 février 2022 - 4 heures - Crédits/Points : 1

#### Compétences techniques

Programmation : Fortran, Python, C/C++

Calcul Haute Performance : openMP, MPI

Modélisation multiphysique : RAMSES, COMSOL Multiphysics

#### Compétences transversales

Gestion de projet

Ingénierie

#### Projet professionnel

enseignant-chercheur, enseignant du supérieur\*chercheur en milieu académique\*chercheur en entreprise, R&D du secteur privé\*

#### Directeur de thèse : Daniel CORDIER

Formations : Avis et remarques sur les formations suivies par votre doctorant :

les formations suivies par Bastien sont vraiment pertinentes et m'ont pu que lui être profitables.

Formations : Proposition de formations que vous jugez intéressantes pour votre doctorant :

Bastien a suivi une formation CNRS en machine learning et une autre à l'IDRIS concernant le calcul HPC

sur GP GPA. Ces formations sont en instance de validation par l'ED.

- ☒ Avis favorable pour la ré-inscription  
☐ Avis défavorable pour la ré-inscription (motivation du refus)  
☐ Avis réservé

**En cas d'avis réservé ou défavorable, l'ED organisera un RDV**

- ☐ Demande de rendez-vous avec la Direction de l'ED

Avis motivé sur le déroulement et la poursuite du travail de thèse :

Bastien s'est bien engagé de son sujet de thèse, en particulier des aspects numériques, les outils mis au point doivent maintenant être exploités.

A.....Reims....., le 07/06/2022.

Signature du Directeur de thèse Daniel CORDIER :

