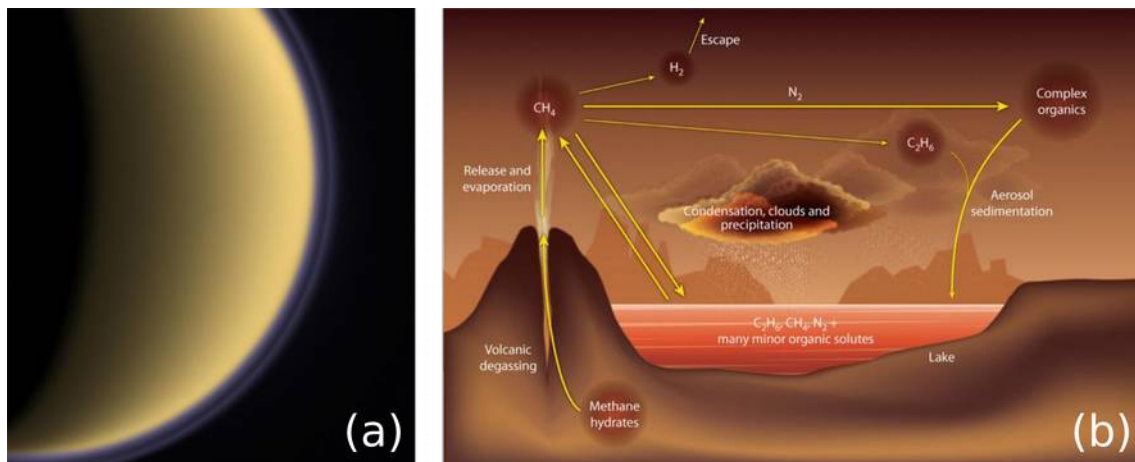


# Modélisation, par la méthode SPH, d'écoulements liquides à la surface de Titan

## – Projet SPH4PS –



**Fig. 1 :** (a) Une image de Titan prise, le 3 juillet 2004, avec la caméra à champ étroit de l'instrument ISS de la sonde Cassini. Contrairement aux autres lunes du système solaire, on n'observe pas une surface cratérisée, mais une atmosphère brumeuse qui donne son allure si caractéristique à Titan. (b) Vue schématique du cycle du carbone sur Titan, avec un cycle « hydrologique » du méthane et un éventuel dégazage via un « cryovolcanisme » (d'après Lopes et al.).

## I- ETAT DE L'ART

### Généralités

Par sa masse, Titan est le principal satellite de Saturne. Ce corps a une taille comparable à celle de la Lune, mais contrairement à cette dernière, il est **en grande partie composé de glace d'eau**. Cette caractéristique lui confère une **géodynamique dont l'étude est intéressante en elle-même**. Titan possède également une **atmosphère dense d'azote et de méthane** (voir Fig. 1, a), il est le seul satellite du système solaire à posséder une telle caractéristique. La densité de cette atmosphère est comparable à celle de l'atmosphère terrestre avec une **pression au sol de 1,5 bar**. Néanmoins, les températures titaniennes restent très basses, avec une **moyenne un peu supérieure à 90 K au sol**. Ces températures, conséquences d'un éloignement au Soleil d'environ 10 unités astronomiques, font que Titan peut être qualifié de « monde cryogénique ». A haute altitude, les rayons ultra-violets solaires et les particules énergétiques piégées dans la magnétosphère kronienne<sup>1</sup>, dissocient les molécules de méthane et de diazote. Ce phénomène est à l'origine d'une chimie organique complexe qui est une des grandes originalités de ce satellite (voir Fig. 1, b). Les modèles d'atmosphère prédisent des précipitations exotiques à la surface, dont l'espèce chimique la plus abondante semble, d'après les modèles, être l'éthane. En se basant sur des estimations de taux de précipitation, on a, au début des années 80, suspecté l'existence d'un océan global d'hydrocarbures (Flasar 1983, Lunine et al., 1983). Des observations RADAR menées depuis le sol (Muhleman et al., 1995), puis infra-rouge (West et al., 2005), ont cependant été en défaveur de la présence d'un tel océan. En 2005, la mission *Cassini-Huygens* a largué son atterrisseur, *Huygens*, vers les régions équatoriales de Titan. Cet événement a montré l'absence

<sup>1</sup> de Saturne

l'absence d'océan global. Lors de ses survols, l'orbiteur *Cassini* a imagé la surface en utilisant son RADAR. Les cartes ont révélé en 2006 (Stofan *et al.*, 2007) des zones de très forte réflexion spéculaire en micro-onde, dans la région du pôle nord (voir figure 1, panel a). Ces motifs, dont l'allure est similaire à celle des grands lacs terrestres, ont été interprétés comme étant des lacs et mers d'hydrocarbures. Une découverte similaire a été faite un peu plus tard dans la zone du pôle sud (Turtle *et al.*, 2009). Un deuxième type d'indice fort, en faveur de la présence de lacs dans les régions polaires, a été apporté par l'observation d'un reflet spéculaire, à 5  $\mu\text{m}$ , grâce à l'instrument VIMS<sup>2</sup>, à bord de *Cassini* (Stephan *et al.*, 2010).

En plus de l'éthane ( $\text{C}_2\text{H}_6$ ) produit dans la haute atmosphère, les conditions thermodynamiques de l'atmosphère de Titan, et la présence de quelques pourcents de méthane, font qu'on y attend un cycle « hydrologique » du méthane, dont on a observé de nombreuses signatures : chenaux d'écoulement, nuages de méthane liquide, lits asséchés, etc.

## Esquisse d'une hydrologie titanienne

### Composition chimique des lacs et mers de Titan

Bien que la présence d'éthane ait été détectée dans un de ces lacs (Brown *et al.*, 2008), leur composition chimique exacte reste mal connue, bien que dans ces grandes lignes cette composition doit être principalement un mélange de  $\text{CH}_4$  et  $\text{C}_2\text{H}_6$ , dans lequel se dissout un peu de diazote atmosphérique. Dans le cadre d'un scénario d'équilibre chimique entre les phases liquides et l'atmosphère, des modèles numériques ont permis de prédire une composition chimique actualisée des lacs et mers (Cordier *et al.*, 2009, 2013) et de discuter le rôle éventuel de ces derniers dans la très faible abondance de gaz rares dans l'atmosphère de Titan (Cordier *et al.*, 2010). Les influences des différentes sources de variabilité et d'incertitude ont été explorées dans Cordier *et al.* (2012). Cette dernière étude a démontré le besoin d'expériences de laboratoire, de simulations *in vitro* des lacs de Titan. C'est la raison pour laquelle le porteur de cette demande a travaillé en collaboration étroite avec V. Chevrier de Arkansas Center for Space and Planetary Sciences de l'Université d'Arkansas (Fayetteville, USA). Dans son laboratoire, V. Chevrier a développé une chambre cryogénique dans laquelle des expériences sur des hydrocarbures liquides sont réalisables. Nous avons ensemble encadré une étudiante en thèse, Adrienn Luspay-Kuti. C'est à cette occasion que le porteur a développé une implémentation de l'équation d'état PC-SAFT1. Cette équation d'état, particulièrement adaptée aux mélanges d'hydrocarbures, a vu son principe publié en 2001 (Gross & Sadowski, 2001) et se trouve au cœur d'innombrables travaux de génie chimique. Ainsi un modèle d'évaporation du méthane liquide, reposant sur PC-SAFT, a pu être construit. Via ce modèle, et grâce aux taux d'évaporation estimés à partir des observations de Titan, nous avons pu fournir une évaluation de la composition d'Ontario Lacus (Luspay-Kuti *et al.*, 2015).

### Formation des champs évaporitiques de Titan

L'observation des régions polaires de Titan à l'aide du RADAR de la sonde Cassini, révèle également des motifs, que leur morphologie conduisent à être interprétés comme étant des lits de lacs asséchés. En effet, Barnes *et al.* (2011) ont découvert une forte corrélation entre ces lits et des zones brillantes dans l'infrarouge vers 5  $\mu\text{m}$ . Ces observations suggèrent une faible teneur en glace d'eau par rapport aux terrains avoisinants. Ces auteurs, ainsi que MacKenzie *et al.* (2014, 2016) proposent que ces lits secs soient recouverts d'une couche d'évaporites, probablement d'origine organique, mais d'une composition qui ne peut pas être déterminée par les observations. La construction d'un modèle numérique de formation des évaporites, par évaporation du méthane, a été menée en vue d'estimer la nature et la structure de ces évaporites. Ce modèle numérique est entièrement original, et permet d'obtenir une estimation de la composition du matériau déposé au fond d'un lac d'hydrocarbures au cours du temps. Une fois le solvant (un mélange ternaire  $\text{CH}_4 + \text{C}_2\text{H}_6 + \text{N}_2$ ) évaporé, on obtient la composition de ce qui est susceptible d'être observé. Ainsi

dans [Cordier et al. \(2013, 2016b\)](#) il a pu être montré que l'acétylène et le butane, tous deux à l'état solide, sont de bons candidats comme composants principaux des évaporites de surface. [Cordier et al. \(2013\)](#), premier article proposant un modèle de formation d'évaporites extraterrestres, a été remarqué par *Nature Geoscience* et le magazine *La Recherche*. Il a, par ailleurs, fait l'objet d'une communication de la part de l'INSU. Il est à noter que les dépôts évaporitiques ne présentent pas seulement un intérêt géologique, mais leur existence apporte également des contraintes sur le climat de Titan, et donc sur les modèles de GCM qui permettent de l'appréhender.

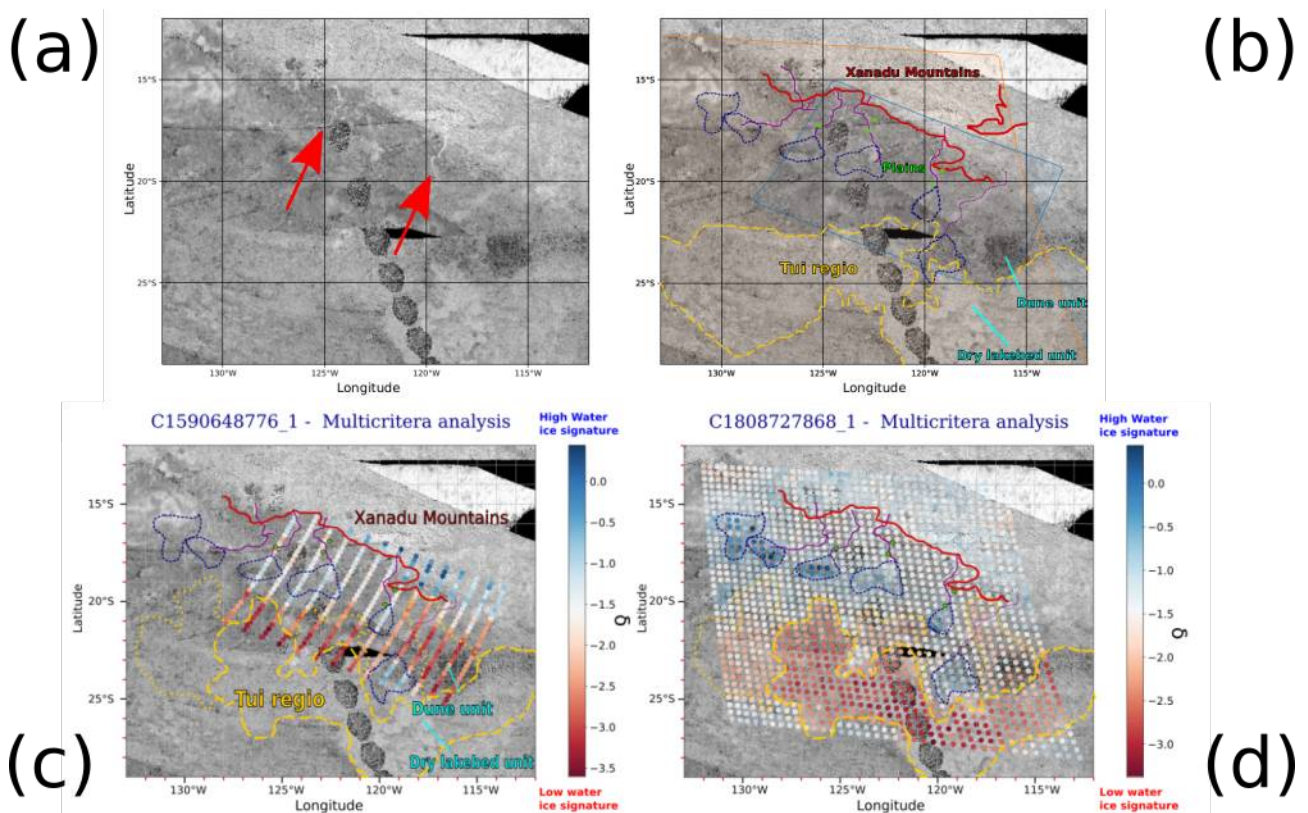
Les premiers travaux sur les évaporites, réalisés par [Cordier et al. \(2013\)](#), ont été prolongés par d'autres, plus sophistiqués, dans lesquels la structure 1D (*i.e.* en profondeur) ainsi que 2D (*i.e.* reflétant la formation de «bathtub rings» sur les rivages, ont été explorées. A cette occasion, le modèle numérique de dissolution des solides organiques a été complètement revu, en reposant alors sur une implémentation de l'équation d'état PC-SAFT, précédemment mentionnée.

Suivant le scénario retenu, il a donc été montré que HCN pourrait dominer les régions externes des «bathtub rings» et être présent dans les couches les plus profondes des évaporites. L'existence, en surface, d'une cristallisation en deux phases indépendantes de C<sub>5</sub>H<sub>10</sub> et C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, pourrait être à l'origine des sur-brillances RADAR, observées dans les parties centrales des zones évaporitiques. Finalement, nous avons pu évaluer, lors de cette étude, l'épaisseur des dépôts évaporitiques : à savoir de quelques micromètres à quelques dizaines de centimètres. Les évaporites peuvent être vus, en termes géophysiques, comme le complémentaire de certains terrains karstiques. Dans le cas des premiers, de la matière initialement dissoute est déposée. Dans celui des seconds, un terrain préalablement solide, est modelé par la dissolution. Sur Terre le solvant est l'eau, sur Titan le rôle est tenu très probablement par le méthane liquide. C'est avec Thomas Cornet, alors Post-Doc à l'ESA, que le porteur a mené un projet d'estimation de l'âge des terrains karstiques observés à la surface de Titan. Les résultats ont été publiés dans *Journal of Geophysical Research* ([Cornet et al., 2015](#)) ; de plus, il a été remarqué par la communauté en faisant l'objet d'un *Research Highlights* dans la prestigieuse revue *Nature Geoscience*.

## Curiosités dynamiques des mers de Titan

Les lacs et les mers d'hydrocarbures, découverts dans les régions polaires de Titan, montrent plusieurs aspects très intrigants. Deux retiennent particulièrement l'attention : (1) l'absence apparente de vagues ([Wye et al., 2009](#), [Zebker et al., 2014](#), [Grima et al., 2017](#)), (2) l'apparition d'éphémères sur-brillances RADAR (surnommées « Magic Islands ») à la surface de Ligeia Mare ([Hofgartner et al., 2014, 2016](#)). Comme déjà indiqué, la composition des mers de Titan pourrait être dominée par trois espèces : CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> et N<sub>2</sub>. Si les équilibres thermodynamiques Liquide-Vapeur, impliquant au moins deux de ces molécules, ont été étudiés d'un point de vue théorique ou expérimental, la possibilité d'équilibre Liquide-Liquide-Vapeur (LLVE) n'a jamais été considérée. Un équilibre LLVE met en jeu deux liquides de compositions différentes, ainsi qu'une phase vapeur. Ce type d'équilibre thermodynamique est bien connu dans l'industrie pétrolière ([Ramírez-Jiménez et al., 2012](#)) ; il a été mis en évidence expérimentalement pour le mélange ternaire CH<sub>4</sub>+C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>+N<sub>2</sub> ([Lu et al., Nature, 1970](#), [Yu, 1972](#)). L'existence de LLVE dans les mers de Titan pourrait être favorisée par la pression régnant en profondeur, supérieure de quelques bars à celle de la surface. Le porteur a donc, avec deux collègues de l'Institut Mexicain du Pétrole, et Gérard Liger-Belair de l'équipe «effervescence» du GSMA, mené une étude qui marie résultats expérimentaux et modèles thermodynamiques numériques. Ce travail montre la possibilité de formation de bulles de N<sub>2</sub> dans les mers de Titan, ces bulles pouvant être suffisamment grosses pour être de bons réflecteurs des ondes radar. Ce phénomène qui pourrait expliquer l'apparition de sur-brillances RADAR (voir figure 3, panel b), a fait l'objet d'un article dans la prestigieuse revue *Nature Astronomy* ([Cordier et al., 2017](#)). Ces résultats ont été complétés en 2018 par un nouvel article, dans *The Astrophysical Journal* cette fois, étudiant dans le détail les possibilités cinétiques (nucléation et croissance) de formation des bulles de diazote ([Cordier & Liger-Belair, 2018](#)), ainsi que leur signature radar.

L'autre aspect très marquant de la dynamique des mers de Titan est justement ... une très faible dynamique apparente de la surface, où une quasi-absence de vagues a été constaté lors de nombreuses observations radar ([Wye et al., 2009](#), [Zebcker et al., 2014](#), [Grima et al., 2017](#)) ou infrarouges ([Jaumann et al., 2010](#), [Barnes et al., 2011](#)). Ceci hormis durant les brefs épisodes «Magic Islands» sus-mentionnées. Une question qui n'avait jamais été abordée dans la littérature, est celle de l'interaction éventuelle entre les phases liquides présentes dans les mers, et les aérosols organiques produits en grande quantité dans l'atmosphère, lui donnant son aspect brumeux si caractéristique. La première forme d'interaction réside dans la flottabilité des particules d'aérosol. Un inventaire a été fait des différents produits, plus ou moins directs, de la chimie atmosphérique susceptibles de sédimenter à la surface des mers de Titan, et d'y former un dépôt plus ou moins épais. Sur Terre, ce genre de nappe flottante (on pense aux marées noires, mais aussi, de façon plus commune, au dépôt de matière organique créée par l'activité biologique marine) produit un amortissement notable des vagues. Ce phénomène est connu depuis l'Antiquité (voir Aristote, *Problematica Physica*, 23, no. 38), et se trouve détecté de nos jours par les radars embarqués sur les satellites océanographiques ([Zuti et al., 1981](#), [Lancelot & Mathot, 1987](#), [Alpers & Liu, 2003](#)). L'étude des films marins est un champ scientifique en elle-même (voir par exemple le livre *Marine surface films*, 2006, Springer) et il était intéressant d'appliquer le formalisme développé dans ce domaine au contexte titanien. Les résultats des simulations numériques ont montré que l'effet d'amortissement d'un film, présent à la surface des mers, serait beaucoup plus fort sur Titan qu'il ne l'est sur Terre. Cet effet est notable y compris pour les dépôts d'épaisseur monomoléculaire, qu'on pourrait rencontrer avec des analogues titaniens des surfactants terrestres. Cette étude a fait l'objet d'un article dans *Nature Geoscience* ([Cordier & Carrasco, 2019](#)) qui a eu une forte visibilité médiatique internationale.



(a) Chenaux fluviaux (flèches rouges) entre les régions de Xanadu et Tui, vus par le radar de Cassini. (b) La même vue mais annotée de données géographiques. (c) La région d'intérêt sur laquelle on a superposé une image VIMS (chaque pixel est un point) avec en encodage couleur correspondant à la signature de l'eau. (d) La même chose mais avec une autre spectro-image VIMS acquise à une autre date. Figures extraites de [Coutelier et al., \(2021\)](#).

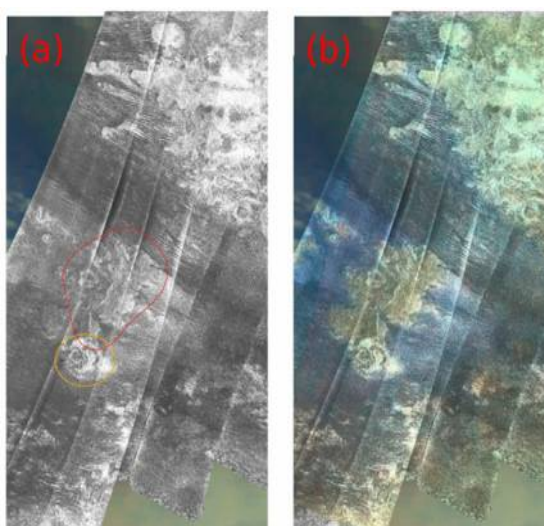


## Les rivières de Titan

On termine cette revue de certains aspects de l'hydrologie titanienne par le cas des rivières de Titan, actives ou aux lits asséchés. Ces systèmes ont jusqu'à présent fait l'objet que de très peu d'études. Le radar de l'orbiteur Cassini a révélé dans les régions équatoriales de Titan, tout comme dans les régions polaires, l'existence de structures géomorphologiques en lien avec la présence passée ou actuelle de liquide : des deltas alluviaux et de nombreuses vallées fluviales (Le Gall *et al.*, 2010, Birch *et al.*, 2016). Dans la région située entre le sud de *Xanadu* et *Tui Regio*, deux très larges (~20 km de largeur) chenaux asséchés, brillants au radar, ont été étudiés grâce aux instruments de Cassini (Le Gall *et al.*, 2010, voir aussi Fig.2 a) ce qui a permis d'indiquer que les lits sont probablement jonchés de « galets » de taille de l'ordre de quelques centimètres. Ce site a été également étudié par notre équipe, grâce à notre doctorante Maélie Coutelier, qui a montré en exploitant les données du spectro-imageur VIMS (voir Fig. 2), que les chenaux déjà considérés par Le Gall *et al.* (2010) présentaient des affleurements de glace d'eau. Cette étude, de caractérisation, a nécessité la mise au point d'un modèle de transfert radiatif de l'atmosphère et la mobilisation du **supercalculateur régional ROMEO** installé sur le campus de Reims. Voir la figure 2 extraite de Coutelier *et al.* (2021).

## Le cryovolcanisme

La possibilité d'une forme exotique de volcanisme, appelé « cryovolcanisme » en raison du milieu glacial dans lequel il est supposé prendre place, a été discuté bien avant l'arrivée de la mission *Cassini-Huygens* en 2005 (Lorenz, 1993, 1996). Ces travaux très préliminaires, et spéculatifs, allaient jusqu'à discuter l'influence possible de l'atmosphère sur le « cryomagma ». Lors de la descente de l'atterrisseur *Huygens* en 2005, de l'argon 40 a été détecté dans l'atmosphère (Niemann *et al.*, 2005). Contrairement à l'argon 38 qui est une relique de la formation du système solaire, et donc de celle de Titan, l'isotope 40 est un produit de désintégration du potassium 40 présent dans les roches. Cette détection est clairement en faveur d'échanges entre l'intérieur de Titan et l'atmosphère. Bien que Sotin *et al.* (2005) proposèrent que la structure appelée « Tortola Facula » soit d'origine cryovolcanique, ceci a été infirmé ensuite par les observations radar SAR (Lopes *et al.*, 2013).



**Fig. 3 :** (a) Le site de Sotra Patera vu par le radar de Cassini, la caldera en entourée de jaune, la coulée de rouge. (b) le même site avec une image du spectro-imageur VIMS superposée à celle du radar. Ces données VIMS sont encodées en couleur, ce qui donne une indication quant à la composition des terrains : la coulée semble bien avoir une composition bien différente des terrains environnants (figure extraite de Lopes *et al.*, 2013).

Les premiers travaux, aussi exhaustifs que possible, consistant à identifier et répertorier les figures morpho-géologiques de Titan conduisirent à un petit nombre de structures candidates (Lopes *et al.*, 2007). Dans ces dernières on trouvait Ganesa Macula qui pouvait être un dôme et plusieurs calderas associées à des marques d'écoulements. L'interprétation de ces observations radar a été

sujet de débats, tout comme celle d'observations faites avec le spectro-imageur infrarouge VIMS, utilisé par certaines équipes (Nelson *et al.*, 2009a,b) pour proposer des candidats volcans. Dans le cas des données infrarouges, des interprétations ne confirmant pas la présence de systèmes volcaniques ont été publiées (Soderblom *et al.*, 2009, Solomonidou *et al.*, 2016).

A ce jour, les éléments les plus solides en faveur de la présence de structures volcaniques à la surface de Titan reposent sur des mesures de topographie, d'imagerie radar SAR et infrarouge avec l'instrument VIMS (Lopes *et al.*, 2013). Parmi quelques candidats cryovolcans, le plus prometteur est sans doute Sotra Patera (voir Fig. 3). En effet, le caractère peu circulaire des dépressions, ainsi que leur profondeur, ceci réuni dans un espace assez petit, plaide en faveur d'une origine volcanique plutôt qu'une formation liée à plusieurs impacts de météorites (phénomènes rares sur Titan, voir Neish & Lorenz, 2014). De plus, l'analyse des données spectroscopiques VIMS ont montré que la nature chimique de la « coulée » était différente de celle de l'environnement, notamment le champ de dunes voisin (Solomonidou *et al.*, 2018). Des variations temporelles de cette composition de surface, associées au voisinage du cryovolcan, semblent également avoir été détectées (Solomonidou *et al.*, 2016).

Pour finir, les calculs d'effet de marée dans la croûte de Titan (Sohl *et al.*, 2014) indiquent l'existence d'une forte contrainte mécanique dans la région de Sotra Patera, renforçant encore la probabilité d'avoir là un véritable cryovolcan titanien.

Outre que le cryovolcanisme possède un intérêt en tant que forme exotique de volcanisme, son existence dans le contexte de Titan a également deux implications très importantes : (1) **de façon générale le cryovolcanisme participe aux potentiels échanges entre la croûte** (et possiblement l'océan d'eau interne) et la surface (ou l'atmosphère) riche en matière organique, on a là un clair intérêt exobiologique ; (2) **le méthane présent dans l'atmosphère** (et source de la chimie organique que complexe qui s'y développe) est rapidement détruit par photolyse, il a donc été proposé que le cryovolcanisme soit la source de méthane alimentant l'atmosphère (Sotin *et al.*, 2005, Tobie *et al.*, 2006).

Finalement, on soulignera que le cryovolcanisme n'est pas un phénomène plus ou moins hypothétique qui serait propre à Titan. Des geysers actifs sont observés à la surface d'Encelade (Porco *et al.*, 2006, Dougherty *et al.*, 2006) et d'Europe (Sparks *et al.*, 2017), des traits volcaniques ont été détectés sur Cérés (Krohn *et al.*, 2016, Ruesh *et al.*, 2016) et Pluton (Moore *et al.*, 2016) montrant que le cryovolcanisme est sans doute un phénomène géologique fondamental très courant chez les petits objets glacés.

## II- Pertinence, originalité et objectifs

Certains processus **dynamiques** internes de Titan ont été récemment modélisés, c'est le cas de la **convection dans la croûte** de glace s'étendant du sol jusqu'à une profondeur approximative de 100 km (Kalousova & Sotin, 2020) ; cela l'est également pour l'**océan souterrain** de Titan, ceci à l'occasion de travaux sur la **convection** de ce type d'océan des satellites de glaces (Soderlund, 2019). L'**atmosphère** a aussi fait l'objet de modélisation de phénomènes dynamique, et ceci depuis **fort longtemps**, au travers des études mettant en œuvre les **modèles dits « GCM<sup>3</sup>»** (pour ne citer que quelques exemples : Tokano, 1999, Lebonnois *et al.*, 2001, Rannou *et al.*, 2004, Mitchell *et al.*, 2006, Lebonnois *et al.*, 2012, Newman *et al.*, 2011; Newman, 2015). Pour ce qui est de la **surface, très peu d'aspects dynamiques ont été modélisés** : Horvath *et al.* (2016) ont simulé les flux de liquides souterrains dans le possible alcanofère polaire, ce qui n'est pas la surface au sens strict, le seul phénomène dynamique de surface modélisé est sans doute, à ce jour, les effets de marée sur les mers d'hydrocarbures polaires (Tokano *et al.*, 2014).

Dans ce projet, on propose au futur Doctorant-e de **développer**, et mettre au point, **un modèle d'écoulement des fluides à la surface de Titan**. Ce modèle, **entièrement original**, pourra être appliqué à deux types de système bien distincts :

- les **écoulements de mélanges d'hydrocarbures**, particulièrement pertinent dans les bassins versants alimentant les lacs et mers des régions polaires.

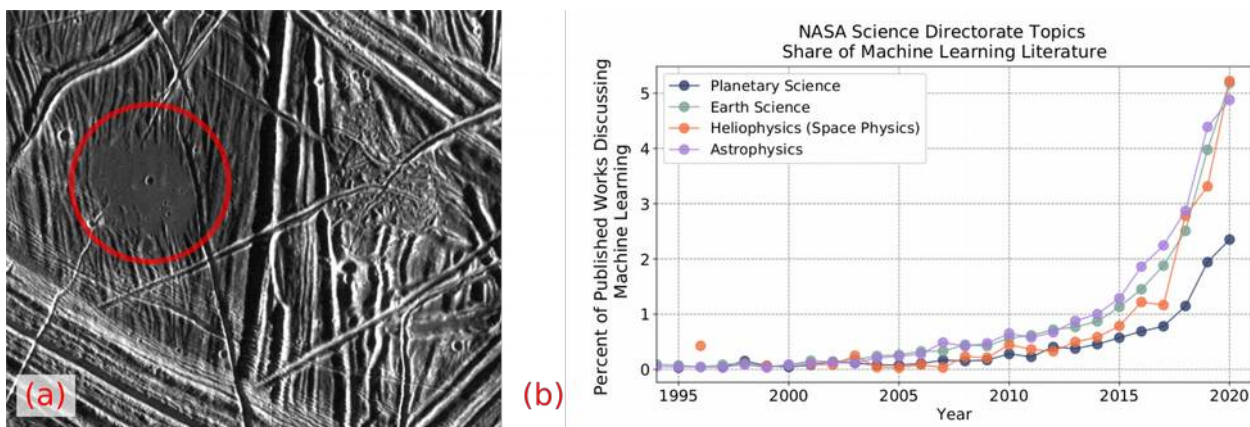
- Les **écoulements de « cryolaves »** associés aux candidates « cryovolcans » observés par le radar de la sonde *Cassini* à la surface de Titan.

Concernant les écoulement d'hydrocarbures liquides, les enjeux scientifiques sont, sous formes de questions, les suivants :

- **Formation** : comment se forment les lits de rivières détectés à la surface de Titan ? Quelles quantités de liquides doivent être mobilisées, et pendant combien de temps, pour creuser les lits qui sont observés ? Cette question de formation est particulièrement pertinente pour les régions équatoriales, où des lits de rivières asséchées sont observés (Le Gall *et al.*, 2010, Coutelier *et al.*, 2021).
- **Transport de sédiments** : quels doivent être les débits de liquide pour transporter des sédiments (matière organique ou glace d'eau) d'une taille fixée ? Le transport peut-il être compatible avec les lits de rivière « brillants au radar », ce qui implique l'existence de galets centimétriques ? Dans quelle mesure les « rivières simulées de Titan » vérifient-elles la « théorie des rivières à seuil » (cf. *thèse Daudon, 2020*) ?
- **Compatibilité avec** les précipitations prédites par les **modèles d'atmosphère** : dans quelles mesures les quantités de liquide atteignant la surface sont-elles suffisantes pour générer des débits pouvant mobiliser une quantité et/ou une taille donnée de sédiments ?

La deuxième problématique qui pourra être abordée par un modèle d'écoulement de liquides à la surface de Titan est celle des coulées de « cryolave », voici le questionnement associé :

- **Quelles énergie et quantité de matière** sont nécessaires pour reproduire l'allure morphologique des coulées observées ?
  - *Les idées estimations concernant la **composition chimique de la « cryolave »** sont-elles **compatibles**, via les propriétés physico-chimiques qu'elles impliquent (notamment la viscosité et la conduction thermique) avec l'**extension des coulées de lave titanienne** ?*



**Fig. 4** : (a) Image de la surface d'Europe prise par la sonde Galileo lors de son orbite E4, le cercle rouge indique ce qui est interprété comme une coulée de cryolave (cf. Lesage *et al.*, 2020). (b) Figure, extraite de l'article d'Azari *et al.* (2020), montrant la part d'articles utilisant le Machine Learning en fonction du temps, dans quatre domaines scientifiques (les données utilisées proviennent de la base Scopus).

Suivant le degré d'avancement de la thèse, deux extensions sont envisageables :

- **EXT 1** Il s'agit d'une extension purement planétologique, à la démarche très proche de ce qui est proposé au sujet du cryovolcanisme titanien. Le satellite de Jupiter, Europe, est également un satellite de glace, à la surface très jeune, dont l'âge est estimé à environ 70 millions d'années (Zahnle *et al.*, 2003), où on observe des signes de cryovolcanisme (voir par exemple Sparks *et al.* 2016, Lesage *et al.*, 2020). Sur la Fig. 4-a, on montre ce qui est sans doute le résultat d'une effusion de cryolave à la surface d'Europe. Le travail de cette

« **extension 1** » pourra donc être une modélisation hydrodynamique de l'écoulement qui a pu donner naissance à cette caractéristique morphologique.

◦ **EXT 2** Pour cette 2<sup>e</sup> extension, le thème retenu est un **aspect purement numérique**. En effet, de façon assez générale, les simulations numériques d'hydrodynamiques sont coûteuses en temps de calcul. Les nouvelles techniques permettant de réduire ce temps de calcul sont bienvenues, outre qu'elles réduisent le temps nécessaire pour que le chercheur obtienne un résultat, ou de manière équivalente autorise la prise en compte d'une physique plus sophistiquée à temps de calcul constant ; ces techniques innovantes ont aussi, dans le premier cas, un impact environnemental en réduisant la consommation électrique liée au numérique. On rappelle que les technologies de l'information et de la communication consomment un part appréciable de l'électricité mondiale (Morley *et al.*, 2018). Dans cette extension, on propose donc de tester un méthode de Machine Learning afin de générer des résultats de calculs d'hydrodynamique en ayant préalablement effectué une phase d'apprentissage d'un algorithme sur une grille de modèles calculés auparavant. Il s'agit typiquement d'un **problème de régression**, type de problème pour lequel de nombreux algorithmes sont disponibles. Ce genre d'approche technique est très originale, en particulier en planétologie. En effet, comme l'ont montré Azari *et al.* (2020) les applications du Machine Learning en planétologie restent, pour le moment, moins nombreuses que dans les domaines voisins de l'astrophysique (voir Fig. 4 b).

### III- Méthodologie et techniques mise en œuvre

**Choix algorithmique** Les écoulements de liquides sur une surface présentent tous une surface libre, cette particularité conditionne la nature de la méthode numérique qui sera mise en œuvre. Il existe tout un panel de solutions : des méthodes reposant sur des « grilles », suivant lesquelles on intègre les équations de Navier-Stokes, des méthodes « sans-grilles ». Comme représentant de la première famille on a par exemple les méthodes en volumes finis, une représentante du deuxième groupe est la **Smoothed-Particle Hydrodynamics** (SPH). Cette méthode, introduite à l'origine en astrophysique (Monaghan, 1992) a plusieurs avantages :

- elle a déjà été appliqué à des problèmes d'écoulements, notamment de lave, dans le contexte terrestres (voir par exemple Prakash & Cleary, 2011, Hérault *et al.*, 2011)
- en plus de la mécanique des fluides au sens strict, on peut également inclure la conduction de la chaleur et les changements d'état (Farrokhpanal *et al.*, 2017, Wang & Zhang, 2020)
- au-delà de cette thèse, d'autres développements pourraient également être faits, avec la possibilité, dans le cadre de la SPH, de modéliser des propriétés des solides comme la formation et propagation de fractures (Liu & Liu, 2003).

**Choix de l'implémentation logiciel** Bien sûr, le développement en partant d'une feuille blanche pourrait être envisagé pour implémenter SPH et ensuite l'adapter au sujet d'étude. Ce type d'approche a l'avantage de donner une maîtrise absolue du modèle, mais requière un temps de développement et mise au point très long, qui pourrait ne pas être compatible avec la durée d'une thèse. Ici on fait le choix d'utiliser un environnement où les fondements de la méthode SPH sont déjà disponibles, tout en étant suffisamment souple pour être adapté à un problème particulier. Il existe plusieurs possibilités, écrites dans différents langages de programmation (Sphysics, etc). En première intention, le choix s'est porté sur la bibliothèque Python : PySPH<sup>4</sup>. Le choix d'utilisation de Python présente plusieurs avantages :

- la large diffusion de Python parmi les cursus étudiants, ce qui augmente la probabilité de trouver un-e candidat-e doctorant-e ayant déjà des connaissances et une expérience de ce langage.
- La forte orientation objet du langage qui permet d'aborder des problèmes complexes
- la disponibilité de moyens permettant de faire du HPC (par exemple PyMPI ou Dask)

---

4 <https://arxiv.org/abs/1909.04504> et <https://pysph.readthedocs.io>



- existence d'une interface Python vers *SeaFreeze*<sup>5</sup> (Bollengier *et al.*, 2019, Journaux *et al.*, 2020). *SeaFreeze* est une librairie fournissant les propriétés thermodynamiques et élastiques de l'eau liquide, ainsi que celles de cinq formes cristallines.
- existence d'une interface vers la librairie REFPROP<sup>6</sup> du NIST qui fournit (entre autres choses) une équation d'état de NH<sub>3</sub> en solution aqueuse. De même on a également une interface vers *Coolprop*<sup>7</sup>, qui est un équivalent libre de REFPROP.
- dans le cas d'utilisation de l'IA, un grand nombre de bibliothèques dédiées au Machine Learning sont disponibles en Python : SciKit-Learn, Keras, PyTorch.
- Des compétences avancées en Python augmentera l'employabilité du/de la jeune docteur dans l'industrie

**Matériel informatique – Exécution des calculs** Les stations de travail de type PC/Linux sont amplement suffisantes pour mener à bien les développements envisagés ainsi que les premiers tests de calculs. Le passage à l'échelle vers des simulations mettant en jeu un grand nombre de particules se fera sur supercalculateur. Localement nous avons la chance d'avoir un mésocentre doté de ROMEO, un supercalculateur d'une puissance supérieure à 1 Pflops (un million de milliards de calculs par seconde). L'étudiant-e se verra, dès sa mise en place, doté d'un compte sur ROMEO. Le porteur de ce projet a une expérience de plus de 25 ans sur les stations de travail Linux et utilise des supercalculateurs (ROMEO, GENCI, ...) depuis de nombreuses années, il a, par exemple, développé un wrapper/pipeline en Python au-dessus d'un programme FORTRAN, afin d'exploiter ce dernier sur ROMEO (travail de thèse de Maélie Coutelier : Coutelier *et al.*, 2021 en cours de révision).

## IV- Ressources humaines

Le doctorant, la doctorante, sera encadré par le porteur, **Daniel Cordier, chercheur CNRS** ; durant la période considérée (*i.e.* 2021-2024) il, ou elle, sera la seule personne en thèse encadrée par le proposant qui pourra donc lui consacrer une grande partie de son temps.

Le laboratoire d'accueil (*i.e.* le GSMA) dispose d'un **ingénieur de recherche, Jérémie Burgalat**, qui pourra apporter son concours pour les éventuels problèmes techniques des calculs scientifiques. Le supercalculateur **ROMEO** dispose également d'un **staff technique**, tout comme le GENCI ou encore le supercalculateur HAL du CNES. Ces supports pourront apporter leurs concours.

Concernant les propriétés physico-chimique des fluides : soit les mélanges d'hydrocarbures liquides, soit la « cryolave », la collaboration de **David Bonhommeau, Maître de Conférences** au GSMA, pourra être sollicitée. David Bonhommeau est spécialiste des simulations de Dynamique Moléculaire (MD) et a déjà apporté une contribution majeure à Cordier *et al.* (2019) (atmosphère profonde de Vénus) et Cordier *et al.* (2021), article pour lequel il a mis au point un modèle, basé sur la MD, concernant les mélanges d'hydrocarbures liquides « titaniens ».

## VI- Résultats et impacts scientifiques potentiels

Le premier impact des travaux proposés concerne une meilleure appréhension, et compréhension, de « l'hydrologie » exotique de Titan. Pour l'heure, nos connaissances de l'hydrologie titannienne sont extrêmement embryonnaires. Rappelons encore que Titan fait partie, avec la Terre, des seuls endroits du système solaire où un cycle hydrologique est actif.

Le deuxième impact touche les mécanismes physiques à l'œuvre dans ce qui est appelé, de façon générique, « cryovolcanisme ». Sur Titan, ce cryovolcanisme représente un potentiel échange de matière de l'intérieur du satellite vers l'atmosphère. Cet aspect est fondamental, car un des « cold case » (Nixon *et al.*, 2018) majeurs concernant Titan, est la permanence dans son

5 <https://github.com/Bjournaux/SeaFreeze>

6 <https://www.nist.gov/srd/refprop>

7 <http://www.coolprop.org>

atmosphère d'une quantité appréciable de méthane, ceci au-delà d'une échelle de temps de l'ordre de la dizaine de millions d'années. En effet, le méthane doit voir sa destruction par photolyse compensée par une source, probablement le cryovolcanisme.

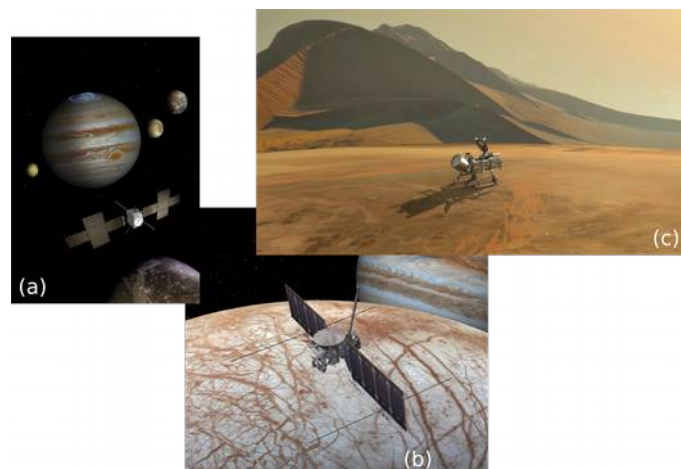
Pour la **publication des résultats**, des revues à **très haut facteur d'impact** seront visées : *Nature Astronomy*, *Nature Geoscience*, *The Astrophysical Journal*, *Astronomy & Astrophysics*, etc.

D'un point de vue technique, l'efficacité énergétique sera recherchée : d'abord par l'utilisation du calcul parallèle (CPU et/ou GPU). Suivant le degré d'avancement du travail scientifique, des expérimentations numériques impliquant le Machine Learning seront menées. Cette dernière approche vise également à rendre les simulations plus sobres en ressources.

Dans une **perspective plus générale**, le modèle physique développé, novateur pourra être mise en œuvre dans de nombreuses autres situations planétologiques, citons :

- le volcanisme de Io, satellite de Jupiter, qui est sans doute le lieu du système solaire le plus actif de ce point de vue.
- Europe, satellite de Jupiter, montrant des traces de cryovolcanisme.
- Vénus, parfois nommée planète « soeur » de la Terre, qui comporte également de très nombreuses marques d'activités volcaniques à sa surface ([Malcuit, 2015](#)).

On remarquera également que la SPH peut également être adaptée aux problèmes de déformation des solides, ce qui ouvre des perspectives quant à la modélisation des croûtes planétaires : par exemple celle d'Europe.



**Fig. 5:** (a) La mission européenne JUICE dans le système de Jupiter. (b) La sonde Europa Clipper de la NASA devant une image d'Europe. (c) Dragonfly le quadcopter qui explorera la surface de Titan dans les années 2030.

Par leur originalité et leur aspect novateur, les modèles développés offriront au docteur, à la docteure, une **expertise unique** qui pourrait être **valorisée dans le cadre de plusieurs missions spatiales** actuellement dans différents états d'avancement, citons :

- *Jupiter Icy Moons Explorer* (JUICE, voir Fig. 3 a) qui est une mission de l'Agence Spatiale Européenne (ESA) dédiée à l'exploration de 3 satellites de glace de Jupiter : Ganymède, Callisto et Europe. Le lancement est prévu en 2022, avec une arrivée dans le système de Jupiter en 2029.

- *Europa Clipper*<sup>8</sup> (voir Fig 3 b) est une mission de la NASA, complémentaire de JUICE. Avec un lancement prévu en 2024, *Europa Clipper* sera principalement dédiée à l'étude d'Europe, alors que JUICE survolera seulement deux fois Europe, Ganymède de nombreuses fois, avant de se mettre en orbite autour de Callisto.
- *Dragonfly*<sup>9</sup> (voir Fig. 3 c) est une mission révolutionnaire de la NASA consistant en un drone qui explorera la surface de Titan, dans la région du cratère Selk, dans le milieu des années 2030.

Ce projet participera également à la **promotion, au niveau national et international, du centre de calcul régional ROMEO**. On notera que, par ces travaux antérieurs, le porteur d'une **grande couverture médiatique, française et étrangère**, avec des articles ou interventions dans Le Figaro, La Croix, lemonde.fr, NRC Handelsblad (NL), Ciel & Espace, Spektrum (DE) Science & Vie, The Atlantic (US), The New Scientist (UK), RTL, France CLuture, CNN.com. Des **communiqués INSU** ainsi qu'une **alerte presse du CNRS** ont été également obtenus.

---

8 <https://europa.nasa.gov>

9 <https://dragonfly.jhuapl.edu>