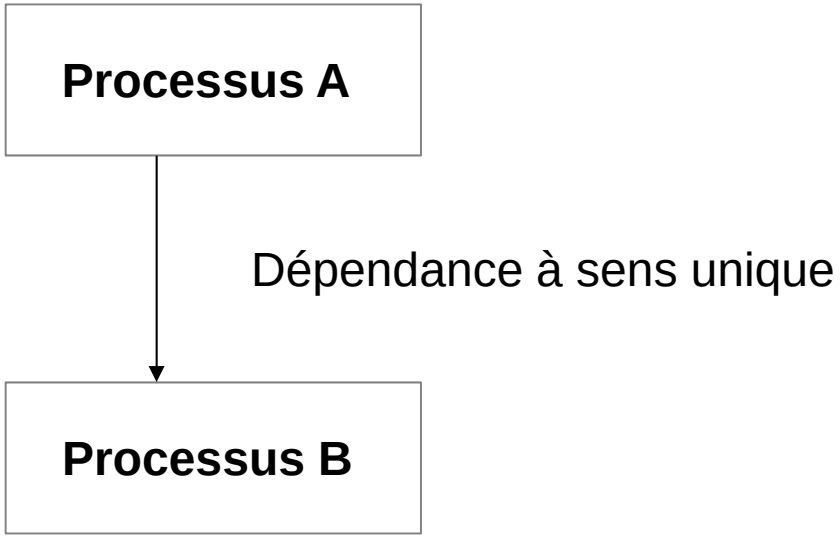
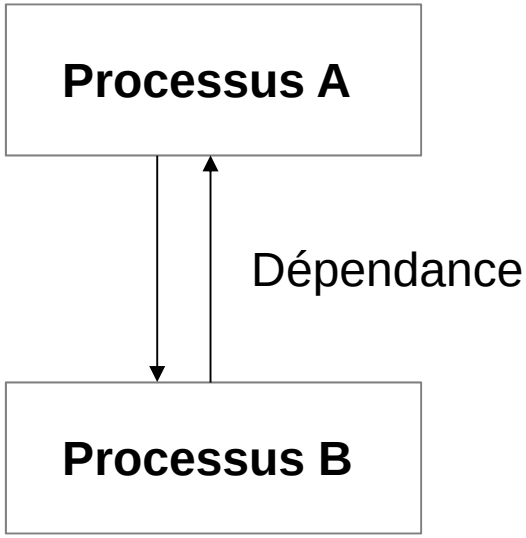
Couplage de modèles.
Exemples, problèmes, techniques.

F. Lafolie
UMR EMMAH, INRA

- Couplage de ***modèles*** ? Précisons un peu.
- Pourquoi coupler des ***modèles*** ?
- Avant de parler de couplage de ***modèles*** il faut se poser la question du couplage des ***processus*** et plus généralement de leur liens.
- Une grande diversité de problèmes de couplage : Quelques exemples.
- Quelles difficultés d'ordres divers
- Quelques « outils » ou techniques

Couplage – Dépendance de processus





Cas réel ou …..
résulte d'une simplification

Cas réel et …….
assez fréquent

Couplage – Dépendance de processus

- Dépendance à sens unique :
  - Cycle de la MO et transferts hydriques dans le sol
  - Transferts de solutés et transferts hydriques

  (*Plutôt des hypothèses*)
- Dépendance à double sens
  - Transferts hydriques et de chaleur en milieux poreux
  - Transports de substances dissoutes et réactions

  (Souvent beaucoup de dépendances de ce type)

Dépendance à double sens : forte ou faible?

Équations couplées

$$C_H(\theta)\, dH/dt = d/dz\, [\, A_H\, dH/dz + B_H\, dT/dz + D_H]$$

Modèle1

$$C_T(T)\, dT/dt = d/dz\, [\, A_T\, dT/dz + B_T\, dH/dz + D_T]$$

Modèle2

$$F(T_s) + G(H_s) = K(t)$$

C.L surface

Couplage : termes croisés, conditions aux limites, paramètres.

Résolution : Inconnues = H & T. Ensemble avec des itérations. Pas de temps unique

Pourquoi ne pas résoudre ensemble ? *Instabilité, lourdeur, temps de calcul,,...*

Avantages ? *Souplesse pour changer une représentation*

Est-ce que je peux considérer « deux modèles » et les coupler ensuite et comment les coupler ? Itérations ou pas ?

Quelle erreur par rapport à au cas « équations liées »?

$$C_H(\theta)\, dH/dt = d/dz\, [\, A_H\, dH/dz + B_H\, \cancel{dT/dz} + D_H]$$

Modèle1

$$C_T(T)\, dT/dt = d/dz\, [\, A_T\, dT/dz + B_T\, \cancel{dH/dz} + D_T]$$

Modèle2

$$F(T_s) + G(H_s) = K(t)$$

C.L surface

Un premier niveau de simplification : *gradients calculés au pas de temps précédent*

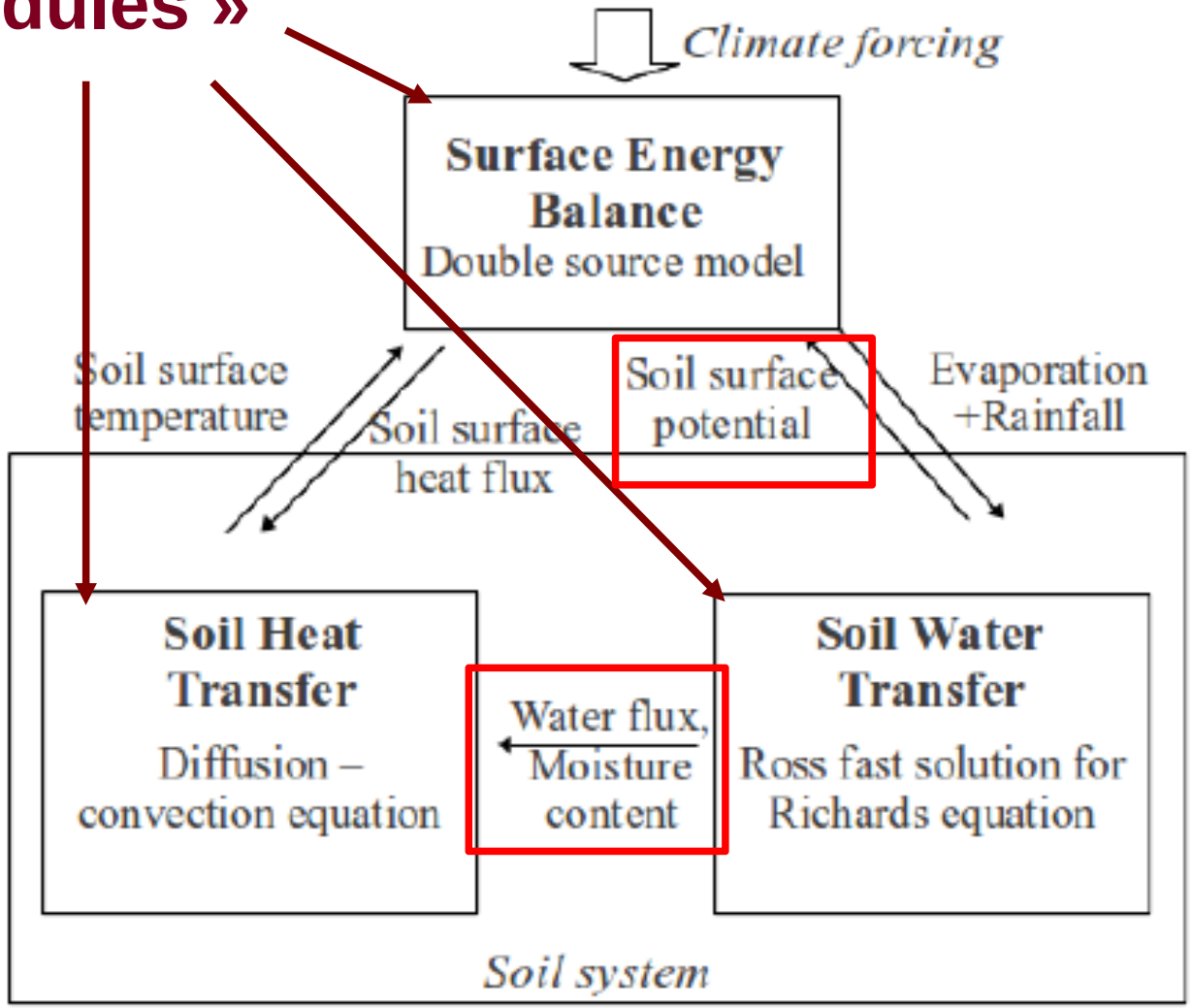
Une simplification plus forte : *gradients ignorés.*

Plusieurs stratégies possibles : *objectifs, situation simulée ,sensibilité, etc..*

Pas de temps

Exemple modèle faiblement couplé *(A-J. Tinet 2013)*.

Les composants disponibles sous forme de « modules »

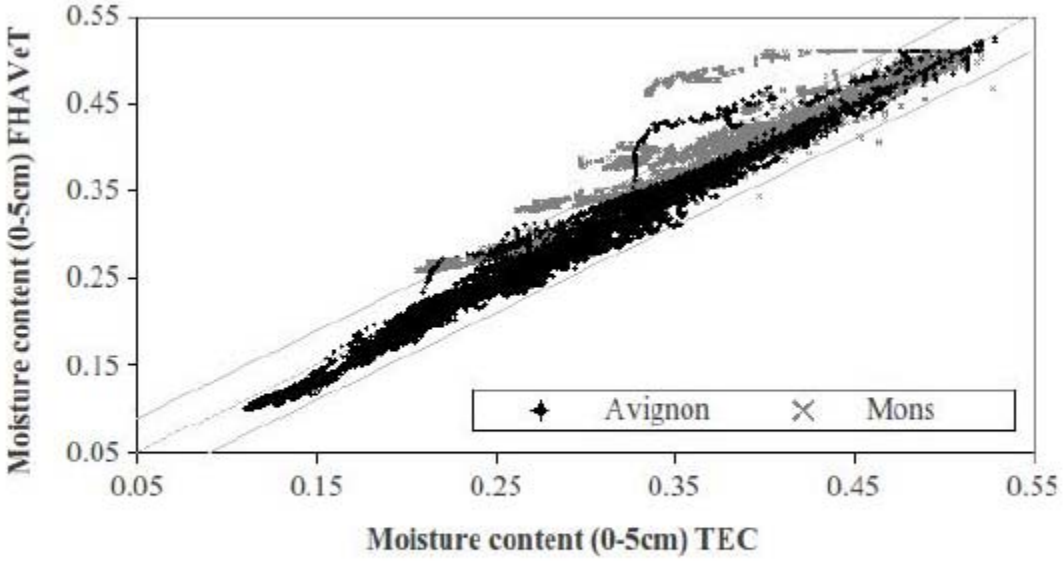


Pas de termes croisés

Dépendance à double sens : exemple.

TEC : Modèle totalement couplé

FHAVeT : Modèle faiblement couplé ***(Tinet et al. soumis)***



(a) 0-5 cm layer

Petite conclusion

- Coupler cela peut vouloir dire simplifier
- Coupler ce peut être aussi choisir
  - Choisir un ou des modèles
  - Choisir des schémas de couplage
- Plusieurs niveaux de simplification
- Pas de réponse simple pour choisir
- Expertise du « constructeur », « modélisateur »
- **Connaissance de la physique, chimie, etc.. et des interactions est essentielle.**

Couplage par terme puits/source.

K dC/dt = L(C) + P(C,...) Modèle1

P(C) = aC

P(C) = aC^n Modèle2

P(C) = A*(C-S)

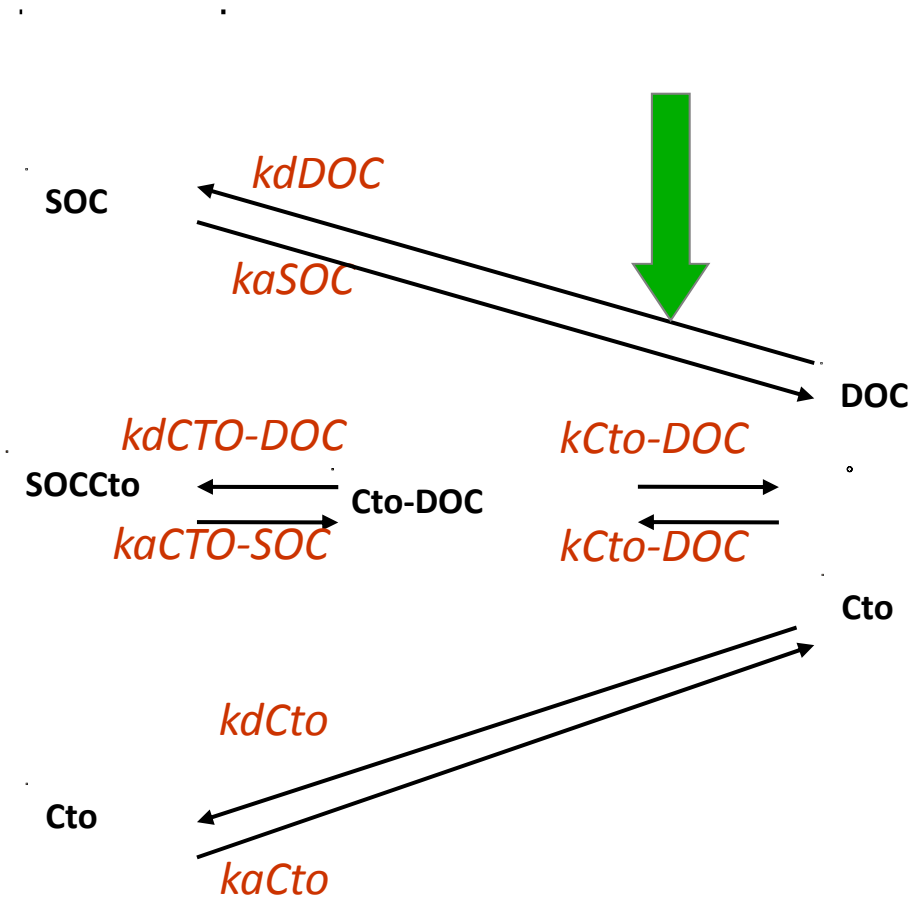
P(C,...) = non linéaire en C et autres et cinétique.

Résolution séparée pourquoi :
- P(C) très compliqué
- pas le choix
- tester différentes formulations de P

Questions :
- itérations requises ou pas ?
- temps caractéristiques des mécanismes

Exemples (Sol) :
- **Transferts et cycle MO**
- **Transferts et réactivité chimique**
- **Transferts et absorption racinaire**
- **Transferts et devenir de colloïdes**

Transport de « Trace Organic Contaminant » et de « Dissolved Organic Carbon »



- **Trois processus**:

1/ Transport

2/ Réaction en solution

3/ Sorption

Modèle transport pour plusieurs espèces.

Les termes puits et sources apparaissant dans les équations sont calculés par des modules.

Petite Conclusion

- Attention aux temps caractéristiques des phénomènes
  - Il faut capturer l'échelle de temps du mécanisme
- Itérations pas forcément requises
  - Non – linéarité
  - Intensité du puits / intensité de l'autre mécanisme
- Communication entre modèles
  - Chaque pas de temps (*dt commun*)
  - Chacun son *dt* ? Non de préférence. Le plus petit.

Couplage spatialisé

Objectifs : On a des modèles 1D de fonctionnement d'un sol que l'on veut utiliser pour simuler à l'échelle d'un territoire (BV, région, etc...).

Pourquoi :

Pas nécessaire d'avoir un vrai 3D
Économie de temps de calcul
Taille du problème.
Modularité

Problèmes et choix :

Relations entre les « entités » ?
Couplage atmosphérique (modèle de chimie/dispersion atmos, modèle de circulation locale) ?
Couplage en profondeur (modèle hydrodynamique des nappes) ?
Couplage de surface (hydrologie, ruissellement) ?

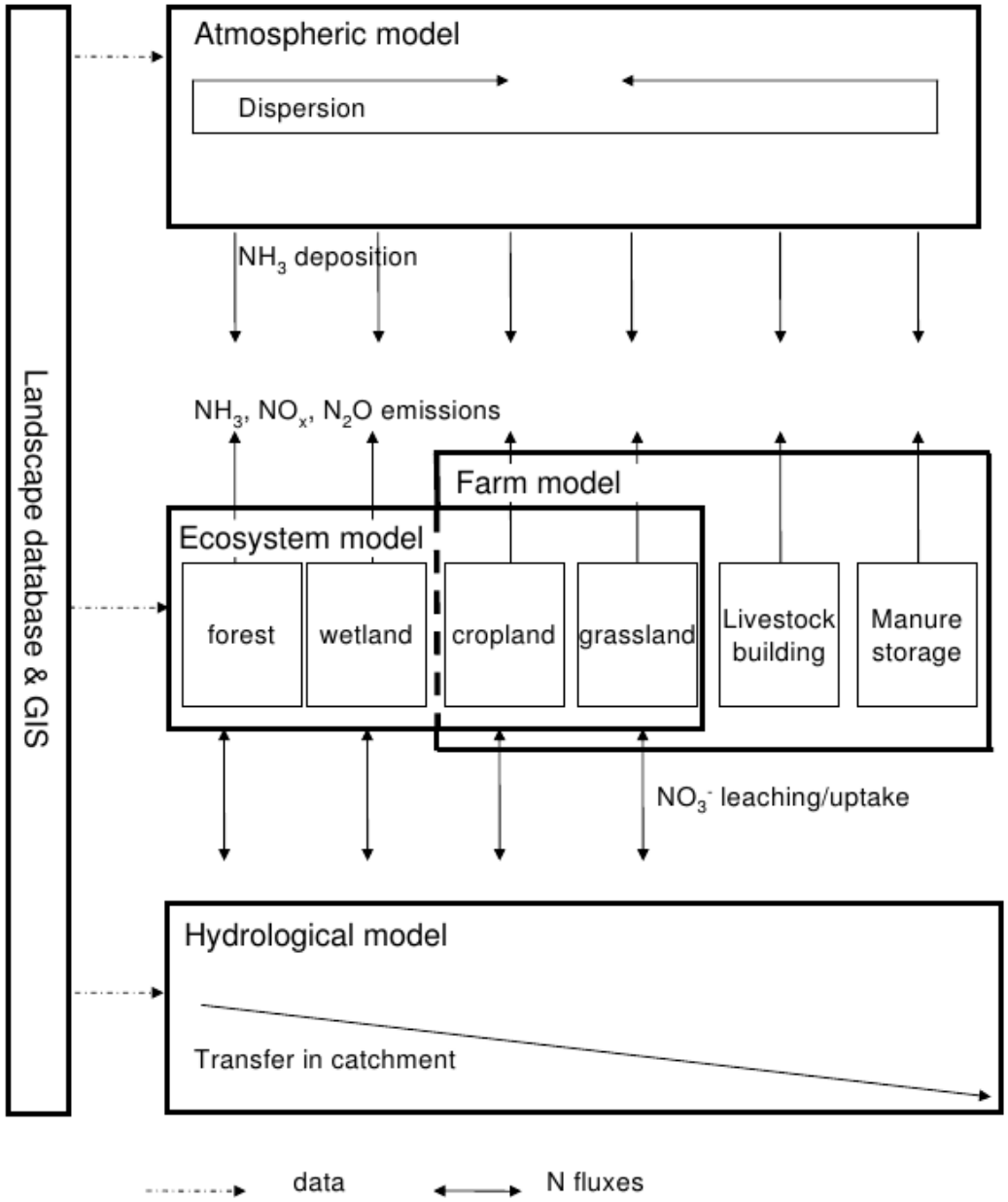
NITROSCAPE
Drouet et al. 2012

Objectif

Modèle atmo : OPS
Modèle hydro : TNT
Modèle agro : CERES
Modèle ferme : FASSET

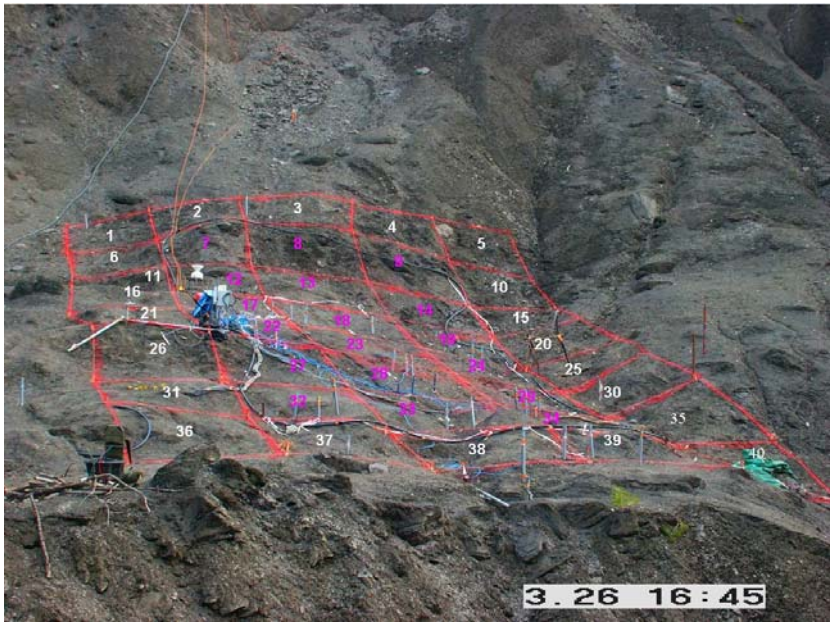
Outil de couplage

Compétences ?



Infiltration dans un milieu 3D avec un modèle 1D

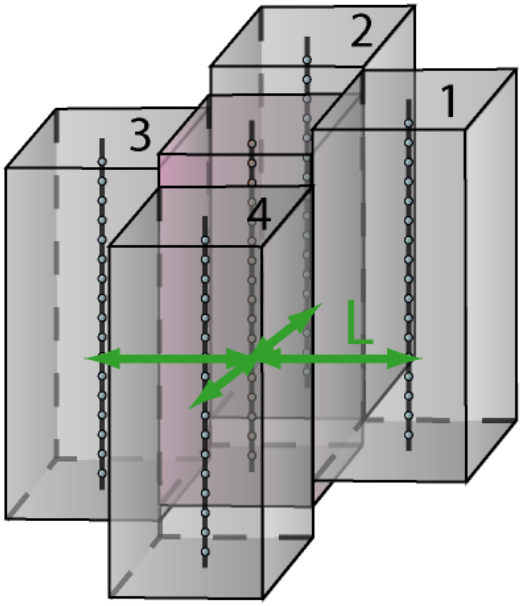
Emilie Garel 2009



Pourquoi ?

Comment ?

Prise en compte du transfert latéral entre les colonnes intéragissant simultanément entre elles :



-> Equation de Richards + Fonction de transfert $\Gamma_{pastis3D}$ [L.T^{-1}]

$$\frac{\delta\theta}{\delta t} = \frac{\delta}{\delta x}\left(K(\theta)\left(\frac{\delta h}{\delta z} - 1\right)\right) + \Gamma_{pastis3D}$$

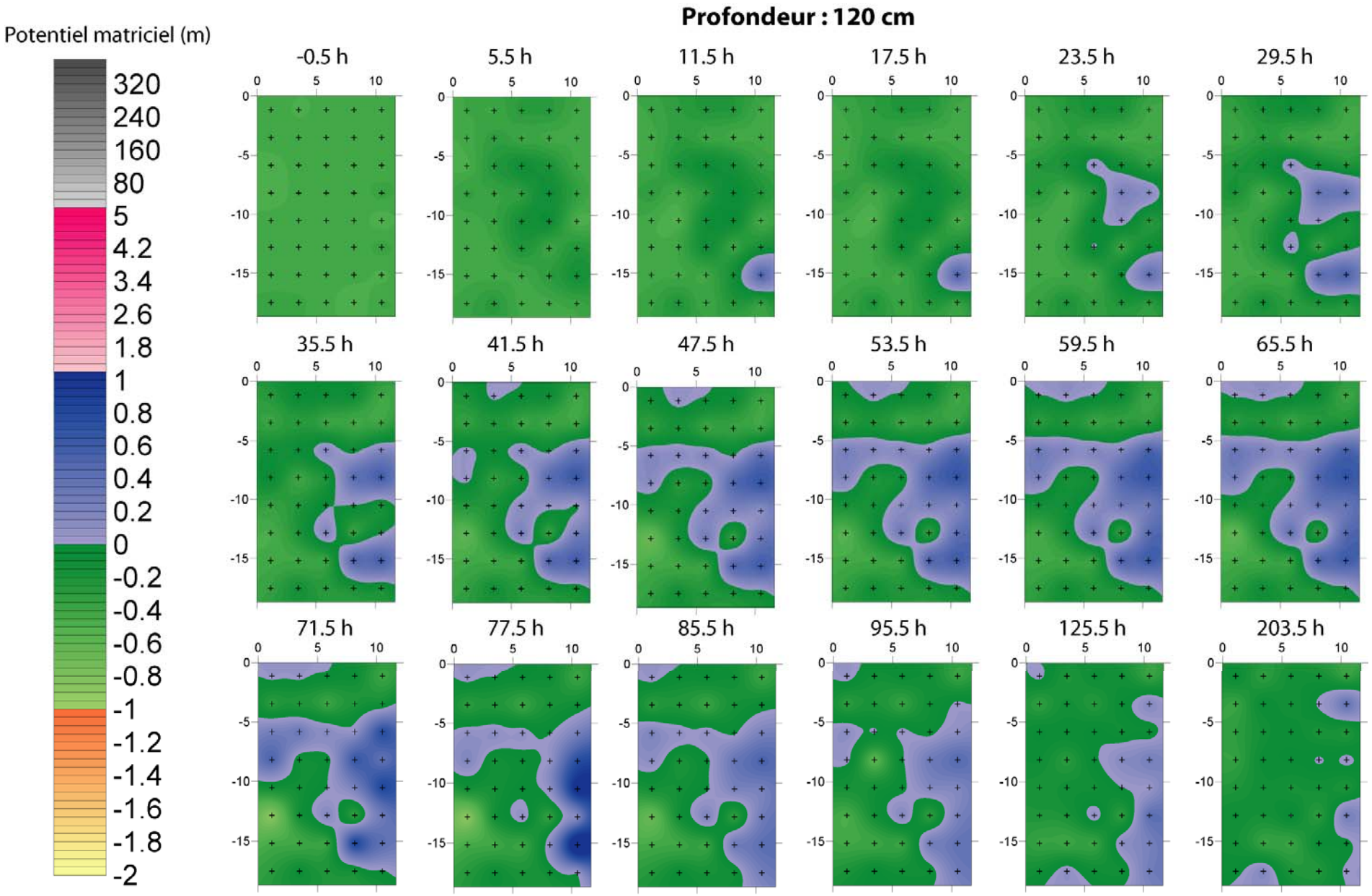
$$\Gamma_{pastis3D} = \frac{1}{L^2} K_{mean}(\theta) \frac{\delta h}{\delta x}$$

θ : teneur en eau [L3.L-3]

K_{mean} : conductivité hydraulique moyenne des 2 colonnes [L.T^{-1}]

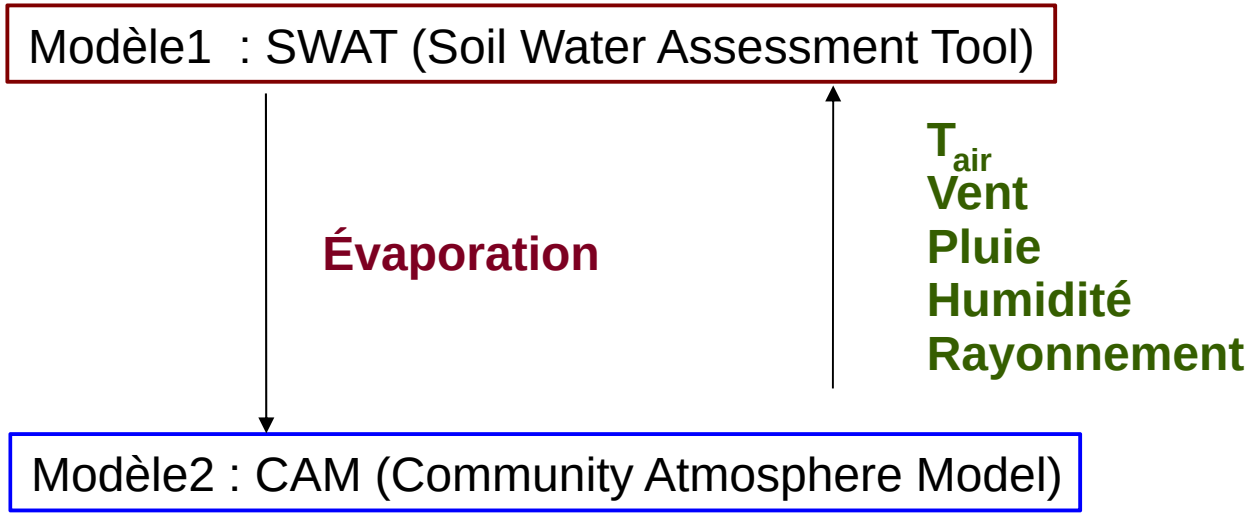
L : Distance entre les coordonnées centrales des 2 colonnes [L]

Emilie Garel 2009



Couplage spatialisé.

Couplage d'un modèle atmosphérique (CAM) et d'un modèle sol-végétation (SWAT) *Goodall et al. 2013*.



Couplage simple. Pas de temps fixe imposé par le modèle CAM.

Problèmes « informatiques » de communication entre modèles.
Quantités de données. Calcul sur des machines distribuées.

Couplage de modèles avec des « dimensions » différentes

Problématique : On a des modèles qui décrivent des processus dans des dimensions différentes mais les processus sont en intera

Quand :

Représentation simplifiée d'une partie des processus.
Limites entre domaines

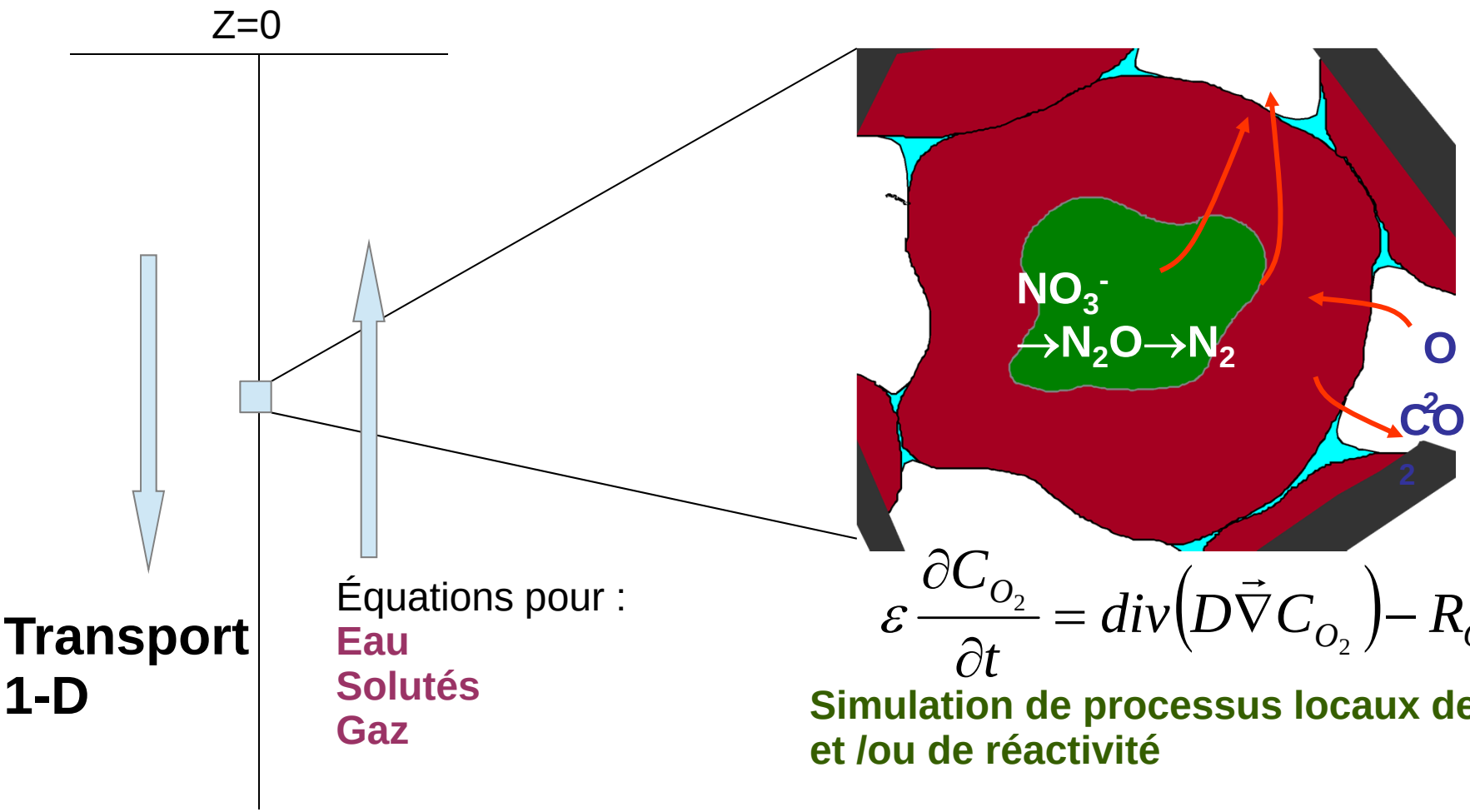
Exemples

Modèle de transport 1-D dans le sol et dénitrification 3D

Modèle GCM 3-D avec modèle de nuage 2-D et processus sol 1-D

Modèle ARPEGE 3-D avec modèle Océan NEMO 2-D

Dénitrification : Transport 1-D et denit en 3-D



Transport 1-D

Équations pour :
Eau
Solutés
Gaz

$$\varepsilon \frac{\partial C_{O_2}}{\partial t} = div\left(D\vec{\nabla} C_{O_2}\right) - R_{O_2}(C_{O_2})$$

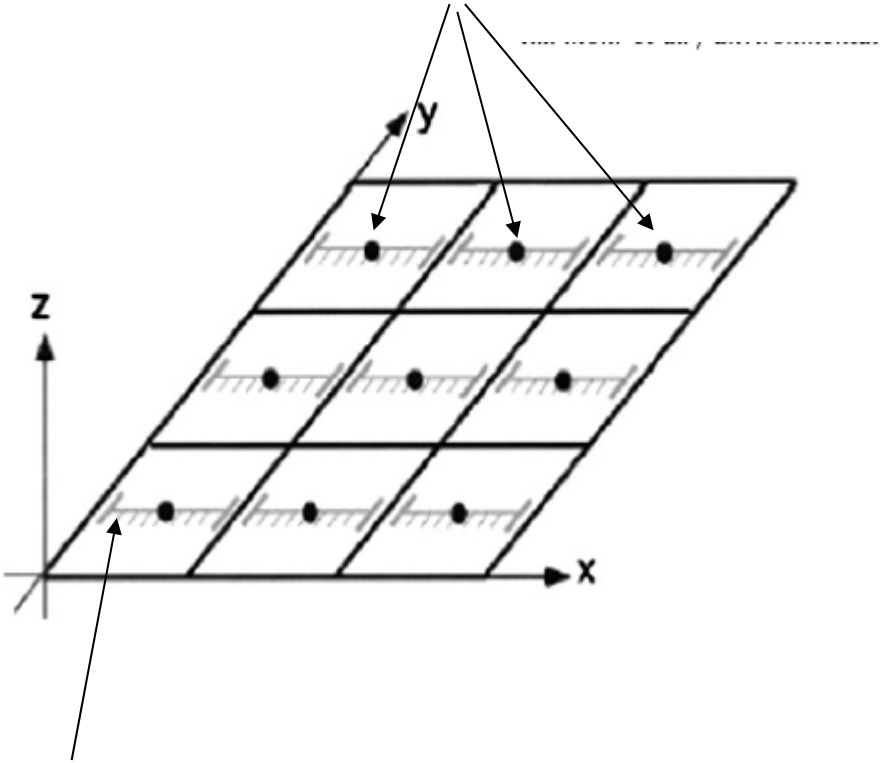
Simulation de processus locaux de transport et /ou de réactivité

Couplage par les C.L. et des flux qui donnent des termes puits/source

Permet de coupler une description fine du milieu et de son fonctionnement avec le transport

Modèle GCM 3-D avec modèle de nuage 2-D et processus sol 1-D (*Mohr et al. 2013*)

Maillage GCM (Volumes finis)



Calcul des variables du GCM

Calcul des N CRM pour chaque maille

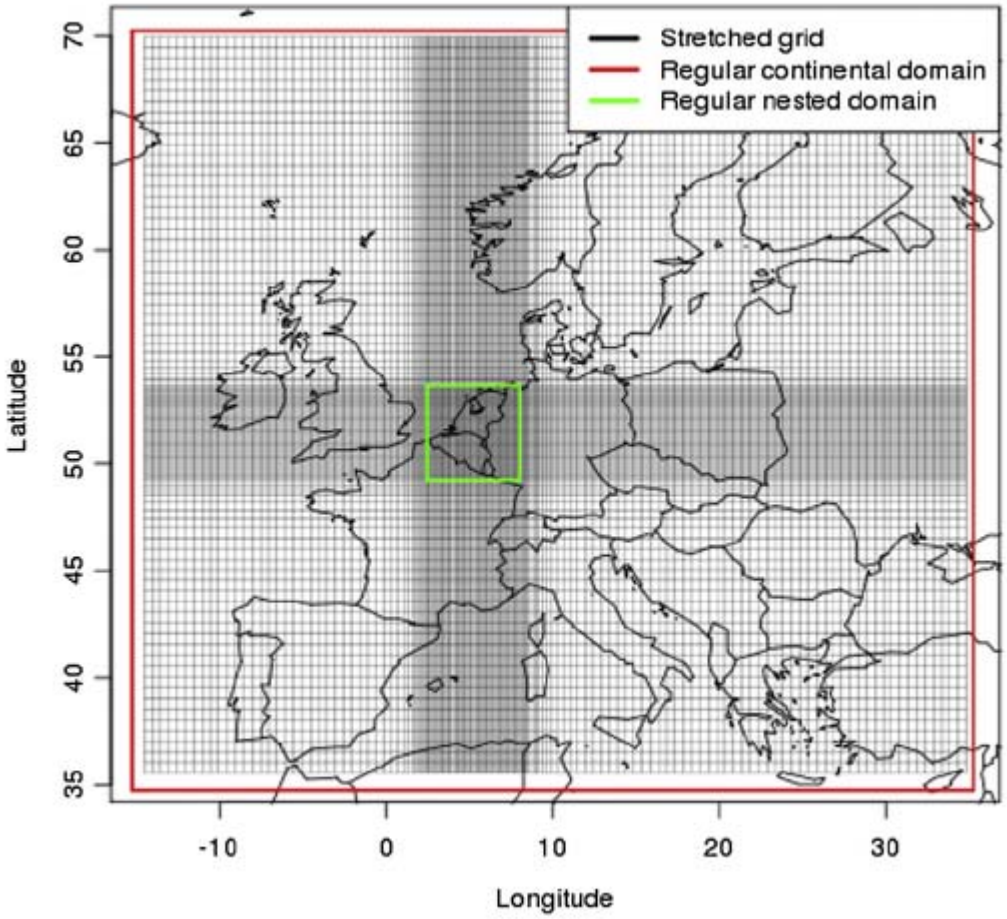
Prise de moyenne (N réalisations) temporelle sur le pas de temps du GCM

Calcul des dérivées passées au GCM

Parallélisation – Quantité de données

N « 2D – Cloud Representation Model » pour chaque maille

Couplage de modèles à échelles « emboîtées »



Faire tourner un modèle à grande échelle pour définir les CL du modèle sur une région plus petite.

Souvent couplage à sens unique mais aussi avec feed-back

Alternative consistant à mailler plus finement certaines régions (*Siour et al. 2013*)

Échelles de temps

Un constat : *Les processus (leur représentations théorique et/ou numérique) ont des temps caractéristiques différents.*

Exemples :

Un processus de transport (atmosphérique ou sol) et un processus de réactivité.

Un processus de croissance de plante et un processus de transport

Que faire quand on les couple ?

Un seul pas (le pas le plus fin) ?

Chacun le sien mais :

Fréquence des échanges ?

Quelles variables échanger ?

Problèmes liés au couplage ….

- Scientifiques
  - Qu'est-ce que je couple ? (*Est-ce que je connais bien les modèles, que je vais coupler??*)
  - Quelles variables ? *(Bien les mêmes ??? Unités ??)*
  - Comment gérer le temps ? *(Pas de temps)*
  - Comment gérer les dépendances - feed-backs?
- Techniques (informatique)
  - Comment faire communiquer deux ou plusieurs codes informatiques ?
  - Qu'est-ce que je dois « casser » ou modifier ou ajouter ?

Techniques

- Je mets tout dans un seul code.
- Les coupleurs « faiblement invasifs »
  - OASIS, PALM
- Les « frameworks » *(souvent plus invasifs …. mais pas toujours!!)*
  - ESMF (Eart System Modeling Framework)
  - CSDMS (Community Surface Dynamic Modeling System)
  - Open MI , OMS (Object Modeling System)
  - **VSOIL**

PALM

- On ne touche pas les boucles de temps des modèles.
- Chaque modèle fonctionne avec son propre pas de temps
- Interpolations gérées par Palm.
- Intrusion (ajout de code spécifique) pour :
  - Définir les entrées
  - Définir les sorties
  - Mettre des appels « Put » et « Get » pour indiquer soit que le calcul est fini soit qu'on attend des entrées.
  - …. et d'autres « primitives Palm »

PALM

- **Points « positifs »**
  - Pas de découpage du code
  - Interface graphique pour coupler
  - Algorithme de couplage défini par l'utilisateur
  - Calcul parallèle
  - Communauté, éprouvé, adapté gros modèles
- **Points « négatifs »**
  - Intrusion dans les codes (et donc connaissance fine)
  - Apprentissage du « langage »
  - Et si les codes évoluent ….

Frameworks
(*Open MI, Object Modeling System, etc...*)

- Les idées fortes derrière ces outils :
  - Partage, Réutilisation, Modularité
  - Couplage
- Les contraintes
  - Ajouts de « tags » et d'instructions, « wrappers », formatage du code
  - Définition des connections
  - Définitions de DLL, etc....
- Limite : connaissance fine des codes
- Les avantages
  - On ne s'occupe pas du « main_ » mais.....
  - Outils souvent adaptés à du « spatial » (fct. bassins, rivières, climat, océan, etc...)
  - Documentation, méta-data

Un « framework » un peu différent : ***VSoil***

- Bien séparer ce qui est connaissance de ce qui est représentation de cette connaissance.
- Permettre l'évolution et l'accumulation ...
- Multi-public (utilisation sans être « programmeur »)
- Modularité - Réutilisation
- Construction assistée des modèles
- Non intrusif mais.....
- Traçabilité

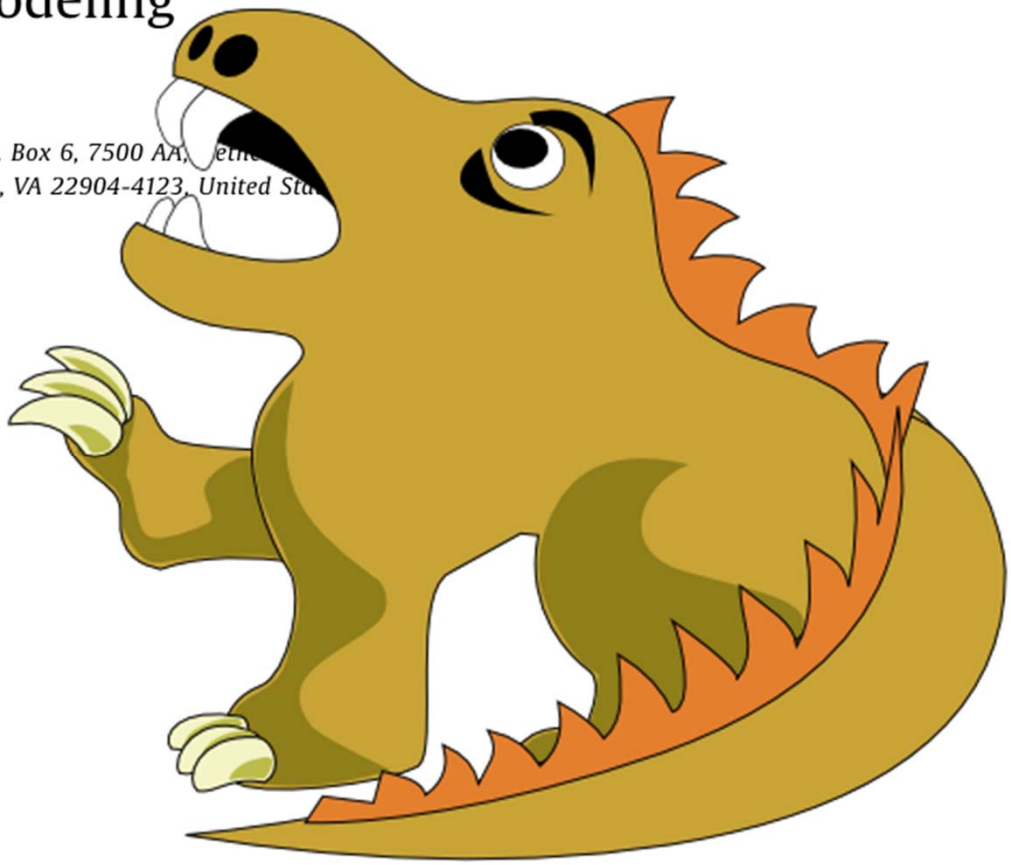
Environmental Modelling & Software 39 (2013) 149–158

Contents lists available at SciVerse ScienceDirect

Environmental Modelling & Software

journal homepage: www.elsevier.com/locate/envsoft

'Integronsters', integral and integrated modeling☆

Alexey Voinov [a,*], Herman H. Shugart [b]

[a] University of Twente Faculty of Geo-information Science and Earth Observation (ITC), P.O. Box 6, 7500 AA, Netherlands
[b] Department of Environmental Sciences, Box 400123, University of Virginia, Charlottesville, VA 22904-4123, United States