

## Systèmes dynamiques pour la modélisation et la simulation des "milieux réactifs" multi-échelles

**Intervenants :** Marc Massot, Laurent Séries

**Mutualisation et porteur :** Cours de 3ème Année

**Volume horaire et volume par séance :** CM: 18h TD: 18h Séance : 2h

**Période :** 1

**Pré-requis :** Pas de prérequis

### **Description :**

Dans un nombre croissant d'applications scientifiques et industrielles, la modélisation et la simulation numérique jouent un rôle clef pour comprendre et analyser les phénomènes physiques complexes mis en jeu. Un élément commun à ces systèmes énergétiques, spatiaux, biologiques, mécaniques, fluides, etc... tourne autour de la notion de systèmes dynamiques, dont l'évolution en temps et les domaines de stabilité/instabilité gouvernent les propriétés qualitatives des solutions. Ces systèmes sont particulièrement multi-échelles, c'est-à-dire qu'ils impliquent une très large variété d'échelles en temps, voire d'espace. Ils posent alors de nombreuses difficultés si l'on veut en faire une résolution numérique précise afin de disposer d'outils de prédiction de leur dynamique fiables.

Dans ce cours, nous étudierons des exemples dans de nombreux domaines d'application comme la combustion, la mécanique des fluides, la dynamique des populations, la dynamique chimique non-linéaire ou le génie biomédical, que l'on rassemble sous le vocable de "milieux réactifs"<sup>1</sup>. Le cours repose sur un premier fil rouge d'une compréhension de ce qu'est une hiérarchie de modèles à différentes échelles. Nous proposons d'identifier les enjeux en termes mathématiques afin de comprendre et d'analyser la dynamique de ces systèmes en dimension finie, voire d'en proposer une simulation précise, fiable et prédictive. Les domaines sur lesquels le cours donnera une expertise sont : analyse mathématique, schémas numériques pour les systèmes d'équations différentielles, analyse de la stabilité des systèmes - bifurcation, implémentation numérique et bibliothèques de programmes permettant la simulation numérique ou l'analyse de bifurcations. Des applications sur machines permettront une analyse de la dynamique mais aussi une compréhension des schémas numériques à la base d'une simulation précise et robuste, ainsi qu'une ouverture sur les enjeux du calcul haute performance. L'ensemble des petites classes se font au moyen de notebook Jupyter (<http://jupyter.org/>), ce qui permet une familiarisation avec les concepts et les méthodes numériques particulièrement efficace, puis d'analyser les résultats en terme des applications. L'ensemble des techniques proposées sera illustré sur des exemples simples mais symptomatiques des enjeux des systèmes complexes rencontrés dans les applications. Un mini-projet permet de mettre en oeuvre les notions et méthodes enseignées et de se confronter à des systèmes appliqués.

<sup>1</sup>. Un milieu impliquant plusieurs "espèces" qui "réagissent" entre elles avec un certain niveau de complexité impliquant un large spectre d'échelles de temps, voire d'espace.

### Contenu :

- Modélisation mathématique des systèmes dynamiques réactifs complexes multi-échelles. Hiérarchie de modèles et complexité. Revue d'un ensemble de cas d'application allant de la dynamique des populations en biologie, à la combustion et à la dynamique de flammes, en passant par les milieux excitable, la mécanique des fluides, la physique solaire, etc..
- Rappels sur l'analyse mathématique des systèmes dynamiques (théorie d'existence et unicité, comportement au voisinage des points non singulier, redressement du flot) et leur classification. Identification précise des systèmes dissipatifs et conservatifs. Applications en dynamique des populations et mécanique.
- Approximation numérique des systèmes différentiels dissipatifs et applications. Schémas classiques dans le cas non raide, enjeux associés à la raideur des systèmes. Conditions d'ordre et notion de stabilité des schémas numériques (A-, L- et B-stabilité). Application sur des systèmes différentiels issus des champs applicatifs mentionnés précédemment.
- Méthodes numériques avancées pour l'intégration des systèmes d'équations différentiels ordinaires (séparation d'opérateur, ROCK4, RADAU5 ...). Applications à des systèmes raides issus des applications.
- Analyse du comportement asymptotique des systèmes en présence de petits paramètres, perturbation singulière et système fortement oscillants.
- Analyse des points singuliers hyperboliques et classification topologique de la dynamique au voisinage d'un point d'équilibre. Stabilité des points d'équilibre, détection des points de bifurcation et méthodes de continuation. Application à des systèmes chimiques, physiques et mécaniques.
- Cas des systèmes spatialement étendus, onde progressives, trajectoire hétéroclines et homoclines, structures de Turing. Applications en biologie, chimie et combustion.
- Analyse et classification des bifurcations - Formes normales et symétrie. Applications en chimie, mécanique des fluides, dynamique des populations, mécanique des fluides.
- Méthodes numériques pour les systèmes dynamiques conservatifs, intégrateurs symplectiques.
- Ouverture sur le chaos - Conférence.



FIGURE 1 – Flamme diphasique avec éclairage laser de l'injection du combustible. Fusée Ariane utilisant un propulseur à poudre au décollage. Ondes spirales en milieu excitable. Tempête solaire.

**Bibliographie Mathématique:**

- J.P. Demailly, "Analyse numérique et Equations différentielles", Presses Universitaires de Grenoble, 1996
- E. Hairer, S.P. Nørsett, G. Wanner, "Solving Ordinary Differential Equations I Nonstiff Problems", Springer Series in Computational Mathematics (1993)
- E. Hairer, G. Wanner, "Solving Ordinary Differential Equations II Stiff and Differential-Algebraic Problems", Springer Series in Computational Mathematics (1996)
- E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner, "Geometric Numerical Integration, Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations", 2nd edition, Springer Verlag, Berlin (2006)
- S. Wiggins, "Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos", Texts in Applied Mathematics, Springer (2003)
- M. Duarte, "Méthodes numériques adaptatives pour la simulation de la dynamique de fronts de réaction multi-échelles en temps et en espace", Thèse de Doctorat de l'Ecole Centrale Paris (2011)

**Bibliographie Applications:**

- I.R. Epstein and J.A. Pojman, "An Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics : Oscillations, Waves, Patterns and Chaos", Oxford University Press (1998)
- Ya.B. Zeldovich, G.I. Barenblatt, V.B. Librovich, G.M. Makhviladze, "The Mathematical Theory of Combustion and Explosions", Consultant Bureau (1985)
- P. Gray, S.K. Scott, "Chemical Oscillations and Instabilities : Non-linear Chemical Kinetics", International Series of Monographs in Chemistry - 21, Clarendon Press, Oxford (1994)
- P. Manneville, "Instabilité, Chaos et Turbulence", Les éditions de l'Ecole Polytechnique (2004)
- V. Giovangigli, "Multicomponent Flow Modeling", Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology Series, Birkhäuser (1999)
- P. Holmes, J. Lumley, G. Berkooz, C.W. Rowley, "Turbulence, coherent structures, dynamical systems and symmetry". Second edition. Cambridge Monographs on Mechanics. Cambridge University Press (2012)