Modélisation et simulation numérique par l'exemple

Mazen SAAD

Ecole Centrale de Nantes
Laboratoire de Mathématiques Jean Leray–FRANCE

Festival des Arts et des Sciences

Loches, 10 avril 2014

Outline

Ecole Centrale de Nantes

Centrale Nantes est une grande école d'ingénieurs qui diplôme des ingénieurs, des étudiants de masters et de doctorats à l'issue de parcours académiques basés sur les développements les plus actuels de la science et de la technologie et sur les meilleures pratiques du management.

Ecole Centrale de Nantes

Les métiers:

- Génie Civil et Environnement
- Développement de Produits et Systèmes Industriels
- Énergétique
- Informatique
- Ingénierie des Systèmes, de l'Image et des Signaux
- Matériaux
- Ocean
- Simulation en Ingénierie Mécanique
- Mathématiques Appliquées

Chiffres Clés

- 2 050 étudiants
- 1 340 élèves-ingénieurs
- 200 élèves-ingénieurs en formation continue et par apprentissage
- 240 doctorants, 270 étudiants de Masters
- 26 % d'étrangers sur le campus
- 150 professeurs, chercheurs et enseignants-chercheurs
- 550 chercheurs, enseignants-chercheurs

Modélisation mathématique et simulation numérique

Premier exemple de modélisation : Problème du sac-à-dos.

Soit n objets : bouteille d'eau, lampe, briquet, ...

- $p1$, p_2, ... p_n : poids respectifs des objets
- u_1, u_2, u_n : utilités respectives des objets
- $x_i = 1$ si on met l'objet dans le sac-à-dos
- $x_i = 0$ sinon

Le porteur peut porter un poids maximal qu'on note P.

Formuler le problème :

Maximiser l'utilité du sac-à-dos sous la contrainte de poids.

Modélisation mathématique et simulation numérique

Modèle mathématique

Chercher le maximum de la fonction :

$$x_1 u_1 + x_2 u_2 + \cdots + x_n u_n$$

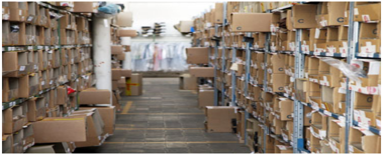
telle que

$$x_1 p_1 + x_2 p_2 + \cdots + x_n p_n \leq P.$$

Simulation

Trouver un algorithme pour calculer une solution dans le cas général.

Application directe en gestion des stocks.



Modélisation mathématique et simulation numérique

La modélisation mathématique est l'art (ou la science) de représenter (ou de transformer) une réalité physique en des modèles abstraits accessibles à l'analyse et au calcul.

La simulation numérique est le processus qui permet de calculer sur ordinateur les solutions de ces modèles et donc de simuler la réalité physique.

La modélisation mathématique et la simulation numérique ont pris une importance considérable ces dernières décennies dans tous les domaines de la science et des applications industrielles (ou sciences de l'ingénieur).

Que sont les mathématiques appliquées

Il s'agit des mathématiques tournées vers les applications.
Les mathématiciens ont été toujours inspirés par des des problèmes pratiques qu'il ont essayé de résoudre.

- L'émergence des mathématiques appliquées comme discipline indépendante est relativement récente.
- Tout a changé avec l'apparition de l'ordinateur.
- L'ordinateur a fait des mathématiques une science expérimentale.
- l'analyse des méthodes de calcul sur l'ordinateur est la simulation numérique.
- Ces progrès ont aussi permis aux mathématiques de s'attaquer à des problèmes beaucoup plus complexes

Que sont les mathématiques appliquées

Les mathématiques appliquées se situent à l'intersection de plusieurs disciplines scientifiques :

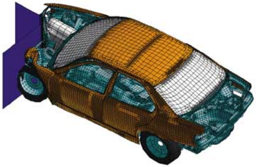
- mathématiques
- calcul informatique (programmer, coder, logiciel, ...)
- sciences physiques
- chimiques
- mécaniques
- biologiques
- économiques

EXEMPLES D'APPLICATIONS

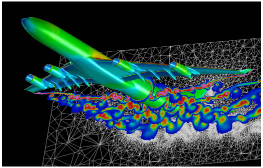
La modélisation et la simulation numérique voient leurs applications dans différents domaines.

Conception de voitures et d'avions

Aérodynamique, écoulement dans les moteurs, crash tests, commande optimale, structure, pneus, carrosserie,....



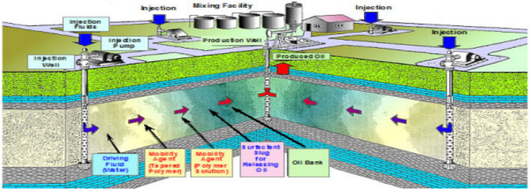
Crash test réel (à gauche), crash test numérique (à droite)



Airbus A380 (L72m,H24m)(à gauche), Simulation numérique (à droite)

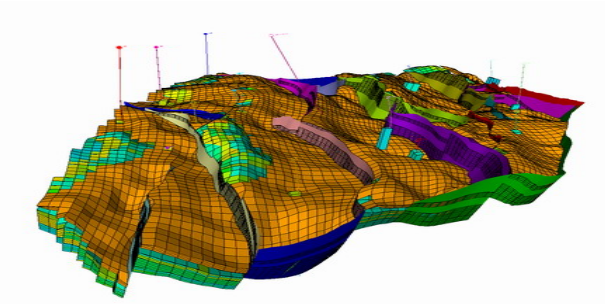
Ingénierie pétrolière

Comprendre la migration des hydrocarbures
Améliorer la production des gisements pétroliers, ...
Récupération secondaire du pétrole. Injecter de l'eau afin de déplacer le pétrole vers les puits de production.



Ingénierie pétrolière

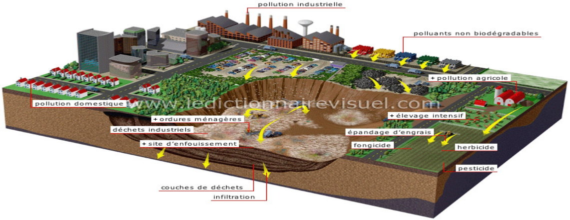
Comprendre la migration des hydrocarbures
Améliorer la production des gisements pétroliers, ...

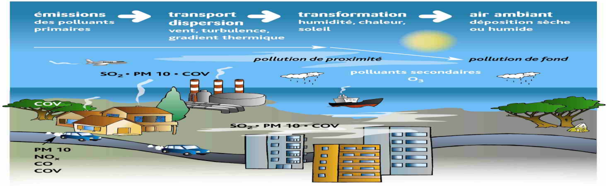


Améliorer la production des puits de 1 % = 2 ans de consommation mondiale.
L'expérimentation à grande échelle est difficile.
La simulation numérique est un bon compromis.

Environnement : pollution air, eau, sol

Les polluants sont libérés dans l'environnement par des sources naturelles : volcans, océans, végétation et par des sources liées aux activités humaines : industrie, transport, chauffage ...





Environnement : pollution air, eau, sol

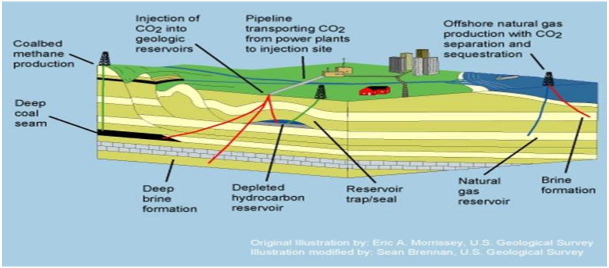
Modélisation : Combiner plusieurs phénomènes : transport, diffusion, réaction

- Transport des polluant.
- Diffusion moléculaire
- Réaction

Environnement : pollution air, eau, sol

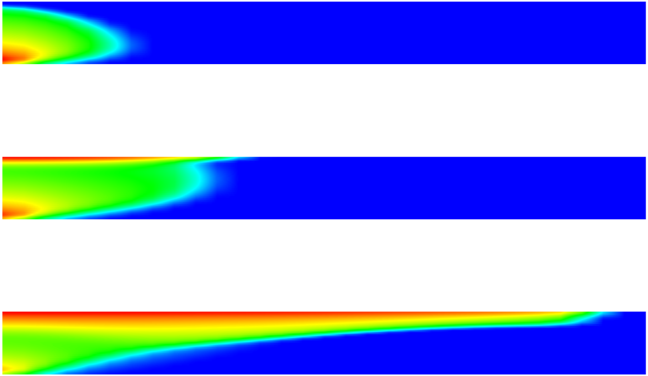
Le Captage et stockage du CO2 consiste

- à capter le CO2 produit par les installations industrielles avant son rejet dans l'atmosphère
- à l'injecter dans des structures géologiques adéquates pour l'y stocker sur des longues périodes



Environnement : pollution air, eau, sol

Captage et stockage du CO_2. La simulation numérique est le moyen pour étudier la faisabilité ...

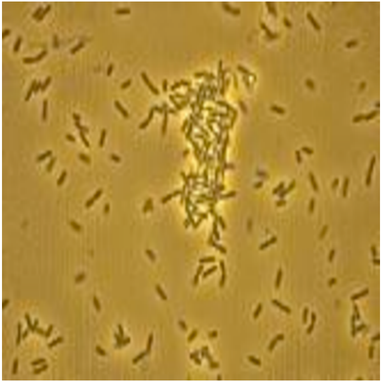


Chimiotaxie

video

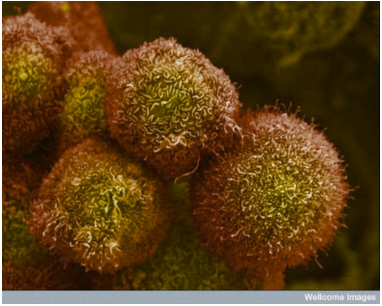
- Chimiotaxie: Mouvement dirigé des cellules en réponse des signaux chimiques.
- Capacité des organismes vivants, tels que les cellules, à détecter des signaux dans l'environnement et d'adapter en conséquence leur mouvement.
- Ce comportement leur permet de localiser les nutriments, éviter les prédateurs ... Il peut s'agir d'attraction ou de répulsion.
- Rôle important dans de nombreux domaines de la biologie tel que l'immunologie, la croissance du cancer et la cicatrisation des plaies.

Exemple 1: Les bactéries



- Les bactéries
  " *Bacillus subtilis*ße trouvent dans le sol.
- Le chimio-attractant est l'oxygène consommé par les organismes vivants.
- C'est un transport des bactéries vers les nutriments.

Exemple 2: Les cellules Cancéreuses



- Les cellules cancéreuses envahissent le mileu environnant.
- La chimiothérapie tente à inhiber la croissance de la maladie.
- Le but est de tuer les cellules cancéreuses.

Modélisation

Modèle mathématique = Mise en équation d'une observation dans le but de lui appliquer les outils, les techniques et les théories mathématiques.

- Le modèle de Keller-Segel est le plus populaire pour le contrôle chimique des mouvements cellulaires.
  E.F. Keller et L.A. Segel, [1970] *The Keller-Segel model of chemotaxis.*
- D. Horstmann [1975] a introduit une analyse mathématique détaillée pour le modèle de Keller-Segel.

Problème posé

- Evolution de la densité cellulaire :

$$\partial_t u - \overbrace{div(S(x)a(u)\nabla u)}^{\textit{Terme diffusif}} + \overbrace{div(S(x)\chi(u)\nabla v)}^{\textit{Terme convectif}} = 0$$

- Evolution de la concentration du chimioattractant :

$$\partial_t v - div(M(x)\nabla v) = g(u, v).$$

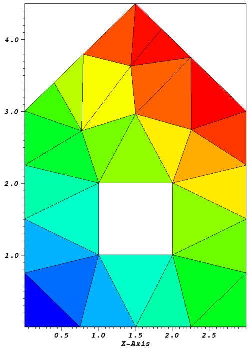
- u : densité de la population cellulaire.
- v : concentration du chimio-attractant.
- a(u) : coefficient de diffusion.
- $\chi(u)$: sensitivité des cellules envers le chimio-attractant.
- S(x) et M(x) : tenseurs anisotropes et hétérogènes.
- g(u,v): taux de production et de d'absorption du chimio-attractant = $\alpha u - \beta v$; $\alpha, \beta \geq 0$.

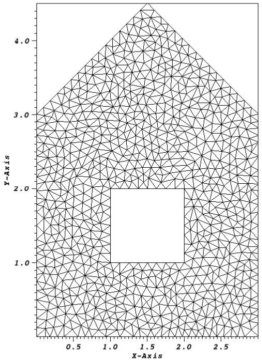
Solution approchée et Maillage

On ne sait pas calculer la solution des équations.

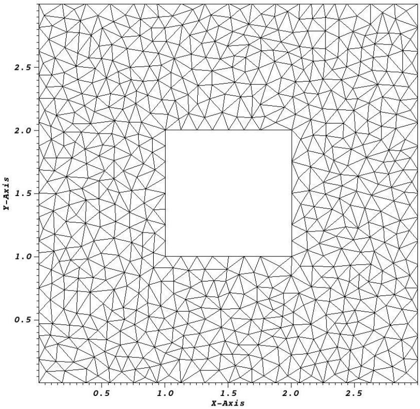
Alors

On calcule une solution approchée qui va être très proche de la solution voulue.

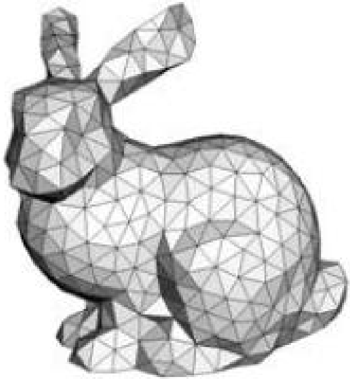




Solution approchée et Maillage



Solution approchée et Maillage



Solution approchée et Maillage

Programmer sur ordinateur

Ecrire des milliers de lignes de code informatique afin que l'ordinateur puisse calculer la solution.

Programme

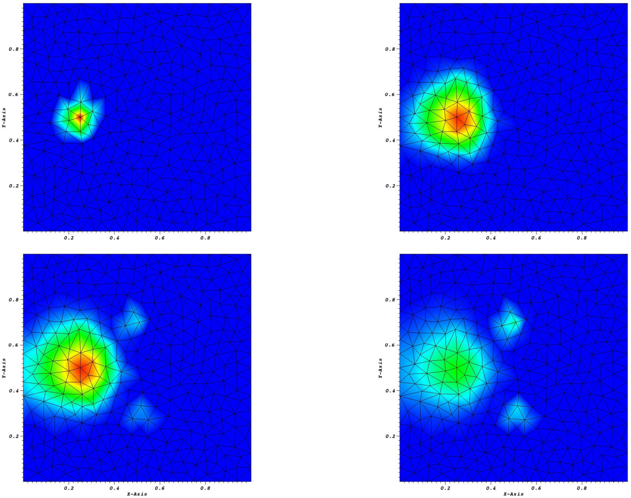
```
' variables
' on n'est pas obligé de déclarer les variables que le script utilise

' entiers
i=4
wscript.echo i
wscript.echo "i=" & i

' des réels
r1=10.2
wscript.echo r1
wscript.echo "r1=" & r1
r2=1.4e-2
wscript.echo r2
wscript.echo "r2=" & r2

' chaînes de caractères
c1="bonjour"
wscript.echo "c1=" & c1

' une date 10 janv 2002
d1=#10/01/2002#
wscript.echo d1
wscript.echo "d1=" & d1
' c'était en fait le 1er oct 2002, la forme des dates vbscript étant #mm/jj/aaaa#
d2=#01/10/2002#
wscript.echo d2
wscript.echo "d2=" & d2

' booléens
b1=true
wscript.echo b1
wscript.echo "b1=" & b1
b2=false
wscript.echo b2
wscript.echo "b2=" & b2

' une variable v peut changer de type de valeur au cours du temps
v=i
wscript.echo "v=" & v
v=r1
wscript.echo "v=" & v
v=c1
wscript.echo "v=" & v
v=d1
wscript.echo "v=" & v
v=b1
wscript.echo "v=" & v

' fin
wscript.quit 0
```

Résultats

```
4
i=4
10,2
r1=10,2
0,014
r2=0,014
c1=bonjour
01/10/02
d1=01/10/02
10/01/02
d2=10/01/02
-1
b1=Vrai
0
b2=Faux
v=4
v=10,2
v=bonjour
v=01/10/02
v=Vrai
```

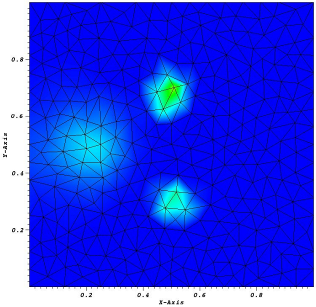
Les résultats de la simulation

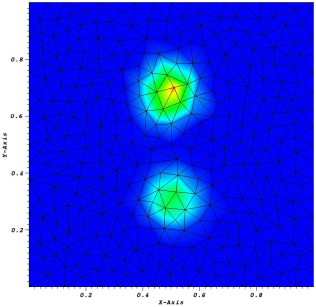
Tracer par exemple la solution calculée par ordinateur.
Evolution de la densité des cellules à différents instants.



Les résultats de la simulation

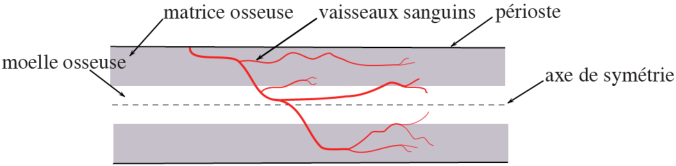
Tracer par exemple la solution calculée par ordinateur.
Evolution de la densité des cellules à différents instants.



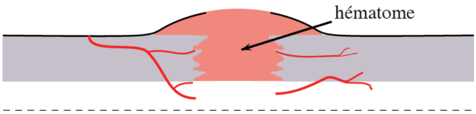


Etat de l'art de la croissance osseuse

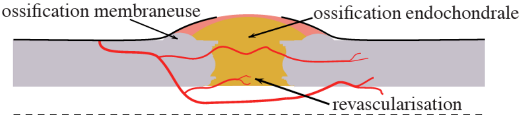
Le principe général de la cicatrisation osseuse.



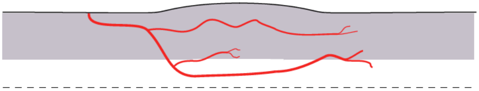
Etat de l'art de la croissance osseuse



(a) La phase inflammatoire

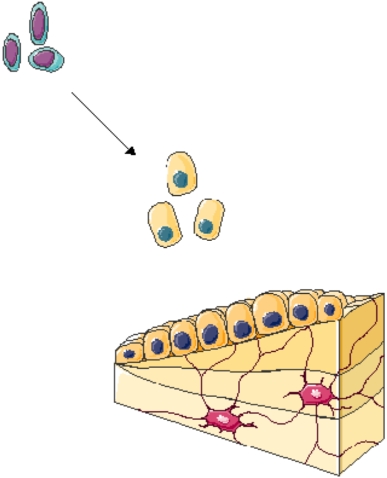


(b) L'ossification



(c) Le remodelage

Les quantités observées



- **s** Les cellules souches mésenchymateuses.
- **b** Les ostéoblastes.
- **m** La matrice osseuse.
- **g** Le facteur de croissance ostéogénique.

Modèle mathématique

Modèle très compliqué pour décrire la cicatrisation osseuse (Bac+5)

Mesenchymal stem cells (s).

$$\partial_t s - \Big(\underbrace{\Lambda(m)\nabla s}_{\text{diffusion}} - \underbrace{V(m)\chi(s)\nabla m}_{\text{haptotaxis}}\Big) = \underbrace{\frac{\alpha_1}{{\beta_1}^2 + m^2} ms\,(1-s)}_{\text{mitosis}} - \underbrace{\frac{\gamma_1}{\eta_1 + g} gs}_{\text{differentiation}}$$

Osteoblasts (b).

$$\partial_t b = \underbrace{\frac{\alpha_2}{{\beta_2}^2 + m^2} mb\,(1-b)}_{\text{mitosis}} + \rho \underbrace{\frac{\gamma_1}{\eta_1 + g} gs}_{\text{differentiation}} - \underbrace{\delta_1 b}_{\text{removal}}$$

Bone Matrix (m).

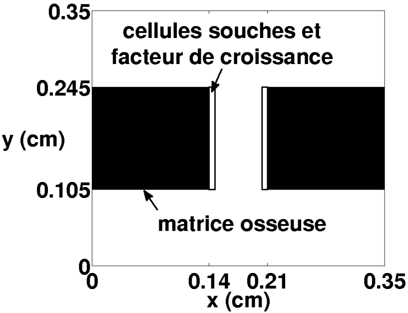
$$\partial_t m = \underbrace{\lambda\,(1-m)\,b}_{\text{synthesis and degradation}}$$

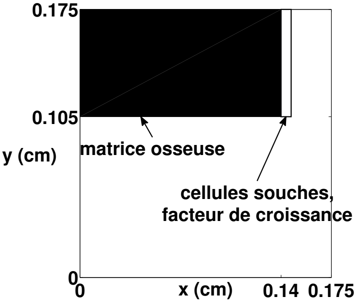
Osteogenic growth factor (g).

$$\partial_t g - \underbrace{(\Lambda_g \nabla g)}_{\text{diffusion}} = \underbrace{\frac{\gamma_2}{(\eta_2 + g)^2} gb}_{\text{production}} - \underbrace{\delta_2 g}_{\text{decay}}$$

Simulation numérique

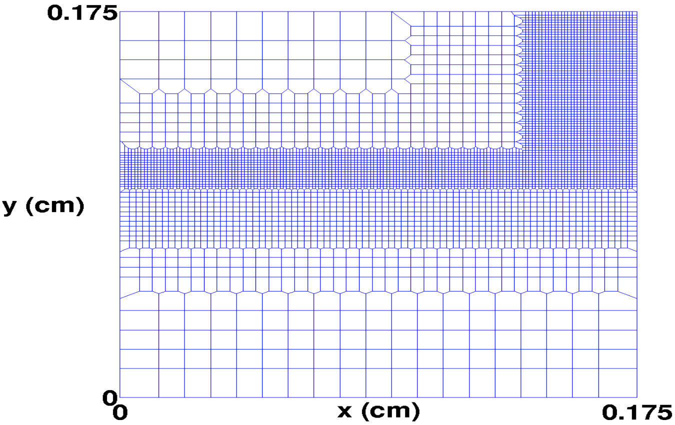
Géométrie et maillage.





Simulation numérique

Géométrie et maillage.



VIDEO

Les applications des mathématiques

- Conception d'avions (aérodynamique, matériaux composites ...)
- Conception de voitures (aérodynamique, écoulement dans les moteurs, crash tests, commande optimale, structure (pneus, carrosserie,) ....
- Ingénierie pétrolière : comprendre la migration des hydrocarbures, améliorer la production des gisements pétroliers, ...
- Biologie mathématiques : propagation d'épidémie, modèle mathématique en cardiologie, cancer, tissus dentaire, pneumologie, ...
- Gestion des stocks, finance, trafic routier
- Environnement : pollution air, eau, sol
- Météo : modéliser le monde
- Et bien d'autres applications ...

Les métiers des mathématiciens

- Recherche et développement dans des grands groupes industriels
- Sociétés de services en ingénierie Informatique
- Enseignement à tous les niveaux
- Ingénieur recherche dévellopement
- Ingénieur chef de projet
- Ingénieur réservoir

Merci pour votre attention