Vous avez dit “réaction-diffusion”

S. Descombes [1] T. Dumont [2] F. Laurent [3] V. Louvet [2] **M. Massot** [3]

[1]Laboratoire J.A. Dieudonné, Université de Nice

[2]ICJ - Université Claude Bernard Lyon 1

[3]EM2C - Ecole Centrale Paris

ANGD Informatique Scientifique pour le Calcul - Introduction

Plan de la présentation

Plan de la présentation

Objectif sous-jacent

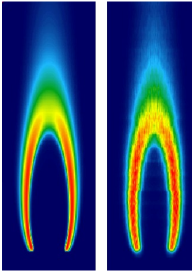
Simulation numérique des fronts réactifs instationnaires

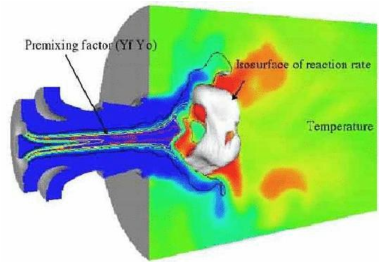
- Flames (Instabilités, dynamique, polluants)
- Ondes chimiques (spiral waves, scroll waves)
- Ingénierie biomédicale (migraines, région de Rolando, AVC)

Objectif sous-jacent

Simulation numérique des fronts réactifs instationnaires

- Flames (Instabilités, dynamique, polluants)





Yale University and CERFACS

Flammes turbulentes (S. Ducruix, S. Candel, N. Tran, EM2C)

- Ondes chimiques (spiral waves, scroll waves)
- Ingénierie biomédicale (migraines, région de Rolando, AVC)

Objectif sous-jacent

Simulation numérique des fronts réactifs instationnaires

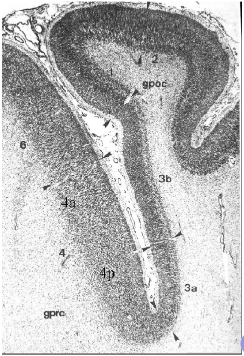
- Flames (Instabilités, dynamique, polluants)
- Ondes chimiques (spiral waves, scroll waves)

- Ingénierie biomédicale (migraines, région de Rolando, AVC)

Objectif sous-jacent

Simulation numérique des fronts réactifs instationnaires

- Flames (Instabilités, dynamique, polluants)
- Ondes chimiques (spiral waves, scroll waves)
- Ingénierie biomédicale (migraines, région de Rolando, AVC)



Ions potassium durant un AVC (T. Dumont, ICJ)

Caractérisation de tels systèmes

- ⟶ Dynamique impliquant de nombreuses espèces : **chimie complexe**
- ⟶ Solution avec de **forts gradients spatiaux** associés à la présence de fronts
- ⟶ Couplage des aspects de réaction-diffusion avec **la dynamique d'un écoulement** en forte interaction

Ce sont des problèmes fortement multi-échelles en temps et en espace

Flamme Pagode (D. Durox, S. Ducruix, S. Candel)

Il faut un **solveur dédié** capable de résoudre une large gamme d'échelles de temps et de forts gradients dans des configurations multi-dimensionelles et eventuellent géométries complexes

Caractérisation de tels systèmes

- $\hookrightarrow$ Dynamique impliquant de nombreuses espèces : **chimie complexe**
- $\hookrightarrow$ Solution avec de **forts gradients spatiaux** associés à la présence de fronts
- $\hookrightarrow$ Couplage des aspects de réaction-diffusion avec **la dynamique d'un écoulement** en forte interaction

Ce sont des problèmes fortement multi-échelles en temps et en espace

Flamme Pagode (D. Durox, S. Ducruix, S. Candel)

Il faut un **solveur dédié** capable de résoudre une large gamme d'échelles de temps et de forts gradients dans des configurations multi-dimensionelles et eventuellent géométries complexes

Caractérisation de tels systèmes

- $\hookrightarrow$ Dynamique impliquant de nombreuses espèces : **chimie complexe**
- $\hookrightarrow$ Solution avec de **forts gradients spatiaux** associés à la présence de fronts
- $\hookrightarrow$ Couplage des aspects de réaction-diffusion avec **la dynamique d'un écoulement** en forte interaction

Ce sont des problèmes fortement multi-échelles en temps et en espace

Flamme Pagode (D. Durox, S. Ducruix, S. Candel)

Il faut un **solveur dédié** capable de résoudre une large gamme d'échelles de temps et de forts gradients dans des configurations multi-dimensionelles et eventuellent géométries complexes

Caractérisation de tels systèmes

- $\hookrightarrow$ Dynamique impliquant de nombreuses espèces : **chimie complexe**
- $\hookrightarrow$ Solution avec de **forts gradients spatiaux** associés à la présence de fronts
- $\hookrightarrow$ Couplage des aspects de réaction-diffusion avec **la dynamique d'un écoulement** en forte interaction

Ce sont des problèmes fortement multi-échelles en temps et en espace

Flamme Pagode (D. Durox, S. Ducruix, S. Candel)

Il faut un **solveur dédié** capable de résoudre une large gamme d'échelles de temps et de forts gradients dans des configurations multi-dimensionelles et eventuellent géométries complexes

Caractérisation de tels systèmes

- ⟶ Dynamique impliquant de nombreuses espèces : **chimie complexe**
- ⟶ Solution avec de **forts gradients spatiaux** associés à la présence de fronts
- ⟶ Couplage des aspects de réaction-diffusion avec **la dynamique d'un écoulement** en forte interaction

Ce sont des problèmes fortement multi-échelles en temps et en espace

Flamme Pagode (D. Durox, S. Ducruix, S. Candel)

Il faut un **solveur dédié** capable de résoudre une large gamme d'échelles de temps et de forts gradients dans des configurations multi-dimensionelles et eventuellent géométries complexes

Caractérisation de tels systèmes

- $\hookrightarrow$ Dynamique impliquant de nombreuses espèces : **chimie complexe**
- $\hookrightarrow$ Solution avec de **forts gradients spatiaux** associés à la présence de fronts
- $\hookrightarrow$ Couplage des aspects de réaction-diffusion avec **la dynamique d'un écoulement** en forte interaction

Ce sont des problèmes fortement multi-échelles en temps et en espace

Flamme Pagode (D. Durox, S. Ducruix, S. Candel)

Il faut un **solveur dédié** capable de résoudre une large gamme d'échelles de temps et de forts gradients dans des configurations multi-dimensionelles et eventuellent géométries complexes

Plan de la présentation

Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i\in C} \partial_i \big(\Phi_i (U, \partial_{\boldsymbol{x}} U) \big) = \Omega(U)$$

- Système de Belousov-Zhabotinsky

Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i \big(\Phi_i(U, \partial_{\boldsymbol{x}} U)\big) = \Omega(U)$$

- Système de Belousov-Zhabotinsky

$$\partial_t b - D_b \,\Delta\, b = \frac{1}{\varepsilon}\left(b - b^2 - f\,c\,(\frac{b+q}{b-q})\right)$$

$$\partial_t c - D_c \,\Delta\, c = b - c$$

$\varepsilon = 0.01$, $D_b = 1.0$, $D_c = 0.6$, $f = 1.6$, $q = 0.002$ $\mu = 10^{-5}$

$$\partial_t a - D_a \,\Delta\, a = \frac{1}{\mu}\left(a\,(b-q) - f\,c\right)$$

$$\partial_t b - D_b \,\Delta\, b = \frac{1}{\varepsilon}\left(b - b^2 - a\,(b+q)\right)$$

Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i \big(\Phi_i(U, \partial_{\boldsymbol{x}} U)\big) = \Omega(U)$$

- Système de Belousov-Zhabotinsky

$$\partial_t b - D_b \, \Delta \, b = \frac{1}{\varepsilon} \left(b - b^2 - f \, c \, (\frac{b+q}{b-q}) \right)$$

$$\partial_t c - D_c \, \Delta \, c = b - c$$

$\varepsilon = 0.01$, $D_b = 1.0$, $D_c = 0.6$, $f = 1.6$, $q = 0.002$ $\mu = 10^{-5}$

$$\partial_t a - D_a \, \Delta \, a = \frac{1}{\mu} \left(a \, (b - q) - f \, c \right)$$

$$\partial_t b - D_b \, \Delta \, b = \frac{1}{\varepsilon} \left(b - b^2 - a \, (b + q) \right)$$

Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i \big(\Phi_i(U, \partial_{\boldsymbol{x}} U)\big) = \Omega(U)$$

- Système de Belousov-Zhabotinsky

$$\partial_t b - D_b \, \Delta \, b = \frac{1}{\varepsilon} \left(b - b^2 - f \, c \, \left(\frac{b+q}{b-q}\right) \right)$$

$$\partial_t c - D_c \, \Delta \, c = b - c$$

$\varepsilon = 0.01$, $D_b = 1.0$, $D_c = 0.6$, $f = 1.6$, $q = 0.002$ $\mu = 10^{-5}$

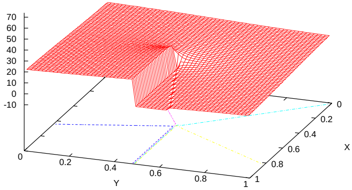
$$\partial_t a - D_a \, \Delta \, a = \frac{1}{\mu} \left(a \, (b - q) - f \, c \right)$$

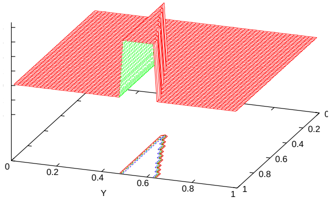
$$\partial_t b - D_b \, \Delta \, b = \frac{1}{\varepsilon} \left(b - b^2 - a \, (b + q) \right)$$

Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i \big(\Phi_i(U, \partial_{\boldsymbol{x}} U)\big) = \Omega(U)$$

- Système de Belousov-Zhabotinsky à trois variables

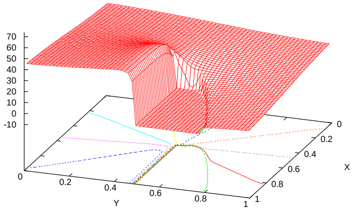


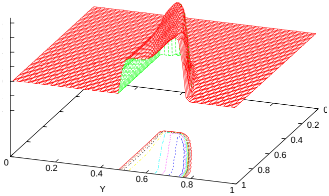


Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i \left(\Phi_i(U, \partial_{\boldsymbol{x}} U) \right) = \Omega(U)$$

- Système de Belousov-Zhabotinsky à trois variables

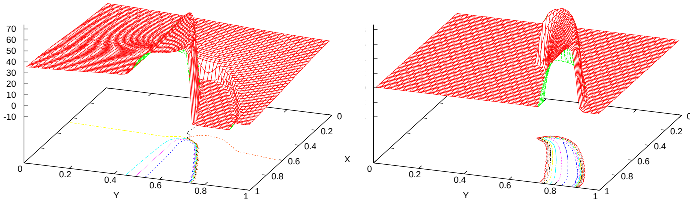




Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i (\Phi_i(U, \partial_{\boldsymbol{x}} U)) = \Omega(U)$$

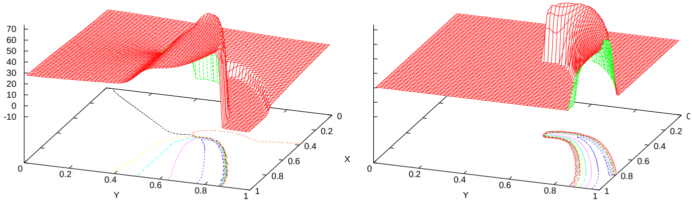
- Système de Belousov-Zhabotinsky à trois variables



Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i \big(\Phi_i(U, \partial_{\boldsymbol{x}} U) \big) = \Omega(U)$$

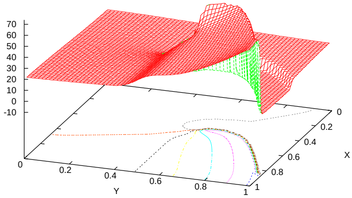
- Système de Belousov-Zhabotinsky à trois variables

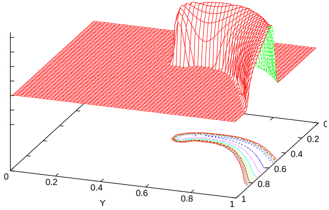


Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i \left(\Phi_i(U, \partial_{\boldsymbol{x}} U) \right) = \Omega(U)$$

- Système de Belousov-Zhabotinsky à trois variables

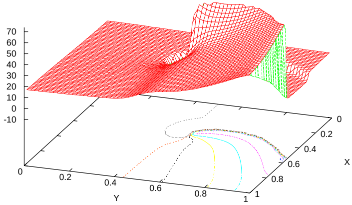


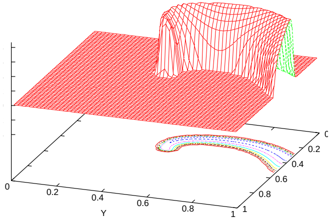


Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i \big(\Phi_i (U, \partial_{\boldsymbol{x}} U) \big) = \Omega(U)$$

- Système de Belousov-Zhabotinsky à trois variables

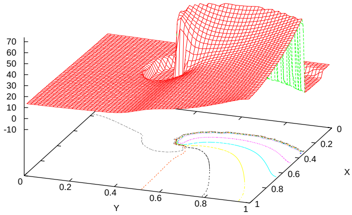


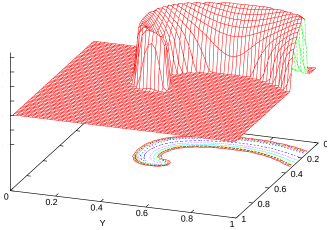


Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i \big(\Phi_i(U, \partial_{\boldsymbol{x}} U) \big) = \Omega(U)$$

- Système de Belousov-Zhabotinsky à trois variables

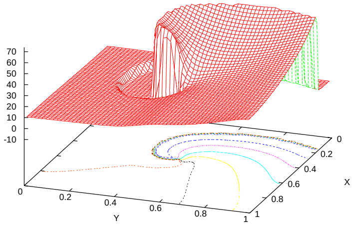


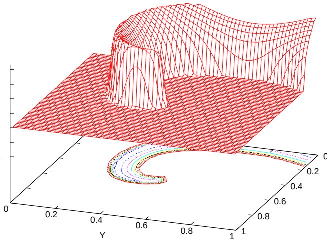


Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i\in C} \partial_i \big(\Phi_i (U, \partial_{\boldsymbol{x}} U) \big) = \Omega(U)$$

- Système de Belousov-Zhabotinsky à trois variables

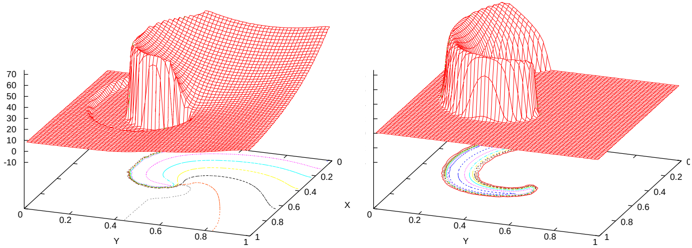




Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i \left(\Phi_i (U, \partial_{\boldsymbol{x}} U) \right) = \Omega(U)$$

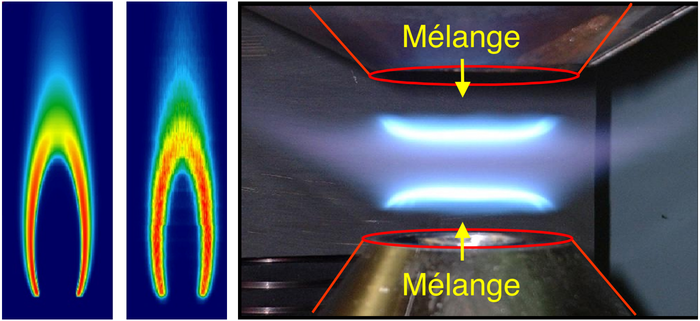
- Système de Belousov-Zhabotinsky à trois variables



Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i \big(\Phi_i(U, \partial_{\boldsymbol{x}} U)\big) = \Omega(U)$$

- Low Mach number reacting flows
(Flammes à faible vitesse (diffusion et prémélangée - Yale University - EM2C)



Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i \big(\Phi_i(U, \partial_{\boldsymbol{x}} U)\big) = \Omega(U)$$

- Faible Mach - flamme place avec chimie simple (Veynante - Poinsot 2005) Le = 1

$$\partial_t \theta - \partial_{xx}\, \theta = -\omega(\theta, \bar{Y}_F, \bar{Y}_O)$$

$$\partial_t \bar{Y}_F - \frac{1}{Le_F} \partial_{xx}\, \bar{Y}_F = \omega(\theta, \bar{Y}_F, \bar{Y}_O)$$

$$\partial_t \bar{Y}_O - \frac{1}{Le_O} \partial_{xx}\, \bar{Y}_O = \phi\, \omega(\theta, \bar{Y}_F, \bar{Y}_O)$$

$$\omega(\theta) = \exp\left(-T_a/(T_0 + \frac{Q}{C_p} Y_F^0 \theta)\right) \frac{L^2}{\kappa} B\, \bar{Y}_F \bar{Y}_O^{1/2}$$

$T_a = 10055K$, $T_0 = 300K$, $L = 4mm$, $Q/C_p = 34550K$, $Y_F^0 = 0.0583$,
$Y_O^1 = 0.29167$, $\kappa = 2.2610^{-5} m^2.s^{-1}$, $\phi = 0.8$, $B_1 = 10^7$

Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i \big(\Phi_i(U, \partial_{\boldsymbol{x}} U)\big) = \Omega(U)$$

- Faible Mach - flamme place avec chimie simple (Veynante - Poinsot 2005) Le = 1

$$\partial_t \theta - \partial_{xx} \theta = -\omega(\theta, \bar{Y}_F, \bar{Y}_O)$$

$$\partial_t \bar{Y}_F - \frac{1}{Le_F} \partial_{xx} \bar{Y}_F = \omega(\theta, \bar{Y}_F, \bar{Y}_O)$$

$$\partial_t \bar{Y}_O - \frac{1}{Le_O} \partial_{xx} \bar{Y}_O = \phi\, \omega(\theta, \bar{Y}_F, \bar{Y}_O)$$

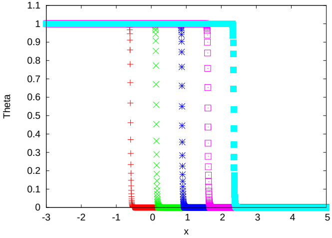
$$\omega(\theta) = \exp\left(-T_a/(T_0 + \frac{Q}{C_p} Y_F^0 \theta)\right) \frac{L^2}{\kappa} B\, \bar{Y}_F \bar{Y}_O^{1/2}$$

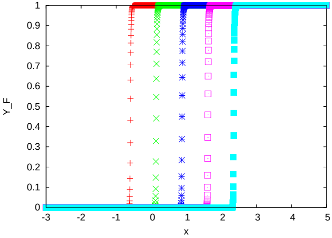
$T_a = 10055K$, $T_0 = 300K$, $L = 4mm$, $Q/C_p = 34550K$, $Y_F^0 = 0.0583$,
$Y_O^1 = 0.29167$, $\kappa = 2.2610^{-5} m^2.s^{-1}$, $\phi = 0.8$, $B_1 = 10^7$

Réaction diffusion pure

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i \big(\Phi_i(U, \partial_{\boldsymbol{x}} U)\big) = \Omega(U)$$

- Faible Mach - flamme place avec chimie simple (Veynante - Poinsot 2005) $Le = 1$ 4000 pts, $\Delta t = 0.04$





Convection-diffusion coupled to chemistry

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i \big(\Phi_i(U, \partial_{\boldsymbol{x}} U)\big) = \Omega(U)$$

- Low Mach - flamme 2D flames avec chimie complexe (Collaboration avec J. Reveillon, B. Delhom, CORIA Rouen)

Temperature Field ignited by a hot spot | Fuel Mass Fraction

Convection-diffusion coupled to chemistry

$$\partial_t U + \sum_{i \in C} \partial_i \big(\Phi_i(U, \partial_{\boldsymbol{x}} U) \big) = \Omega(U)$$

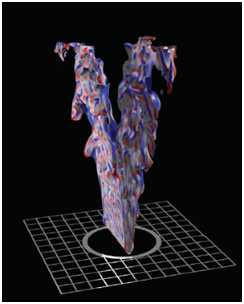
- Low Mach - flamme 2D flames avec chimie complexe (Collaboration avec J. Reveillon, B. Delhom, CORIA Rouen)

Temperature Field ignited by a hot spot | Fuel Mass Fraction

Exemples des besoins de simulations intensives

Examples

- Flamme en V à faible nombre de Mach avec chimie complexe (J.B. Bell, M.S. Day LBNL)
- DNS de flammes turbulentes non-prémélangées (3D with chemistry of “simple” fuel, Y. Mizobuchi et al.)
- Scroll waves, fibrillation cardiaque (F. Fenton, A. Karma, Hofstra University)
- Migraines (région de Rolando), AVC (E. Grenier, J.P. Boissel et al., IMTH, ICJ, ENS Lyon et Université de Nice)

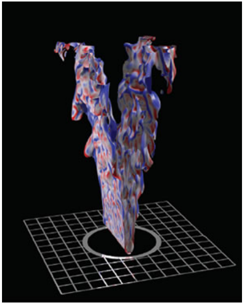


Besoin de solveurs dédié de type “simulation directe”

Exemples des besoins de simulations intensives

Examples

- Flamme en V à faible nombre de Mach avec chimie complexe (J.B. Bell, M.S. Day LBNL)
- DNS de flammes turbulentes non-prémélangées (3D with chemistry of “simple” fuel, Y. Mizobuchi et al.)
- Scroll waves, fibrillation cardiaque (F. Fenton, A. Karma, Hofstra University)
- Migraines (région de Rolando), AVC (E. Grenier, J.P. Boissel et al., IMTH, ICJ, ENS Lyon et Université de Nice)

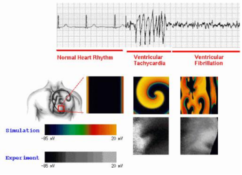


Besoin de solveurs dédié de type “simulation directe”

Exemples des besoins de simulations intensives

Examples

- Flamme en V à faible nombre de Mach avec chimie complexe (J.B. Bell, M.S. Day LBNL)
- DNS de flammes turbulentes non-prémélangées (3D with chemistry of "simple" fuel, Y. Mizobuchi et al.)
- Scroll waves, fibrillation cardiaque (F. Fenton, A. Karma, Hofstra University)
- Migraines (région de Rolando), AVC (E. Grenier, J.P. Boissel et al., IMTH, ICJ, ENS Lyon et Université de Nice)

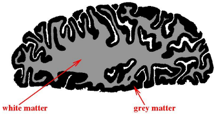


Besoin de solveurs dédié de type "simulation directe"

Exemples des besoins de simulations intensives

Examples

- Flamme en V à faible nombre de Mach avec chimie complexe (J.B. Bell, M.S. Day LBNL)
- DNS de flammes turbulentes non-prémélangées (3D with chemistry of “simple” fuel, Y. Mizobuchi et al.)
- Scroll waves, fibrillation cardiaque (F. Fenton, A. Karma, Hofstra University)
- Migraines (région de Rolando), AVC (E. Grenier, J.P. Boissel et al., IMTH, ICJ, ENS Lyon et Université de Nice)



Besoin de solveurs dédié de type “simulation directe”

Plan de la présentation

Stratégies

La résolution de l'ensemble des échelles spatiales et temporelles implique

- Séparation d'opérateur
- Adaptation de maillage si besoin
- Implicitation de certaines échelles
- Apparition de systèmes d'ODE raides
- Optimisation et profilage
- Optimisation sur architecture parallèle

On voit que la simulation d'un problème réaliste en multiple dimension d'espace requiert un certain nombre d'outils reposant sur une base de techniques issues de l'informatique scientifique et en étroite interaction avec l'analyse numérique

Stratégies

La résolution de l'ensemble des échelles spatiales et temporelles implique

- Séparation d'opérateur
- Adaptation de maillage si besoin
- Implicitation de certaines échelles
- Apparition de systèmes d'ODE raides
- Optimisation et profilage
- Optimisation sur architecture parallèle

On voit que la simulation d'un problème réaliste en multiple dimension d'espace requiert un certain nombre d'outils reposant sur une base de techniques issues de l'informatique scientifique et en étroite interaction avec l'analyse numérique

Stratégies

La résolution de l'ensemble des échelles spatiales et temporelles implique

- Séparation d'opérateur
- Adaptation de maillage si besoin
- Implicitation de certaines échelles
- Apparition de systèmes d'ODE raides
- Optimisation et profilage
- Optimisation sur architecture parallèle

On voit que la simulation d'un problème réaliste en multiple dimension d'espace requiert un certain nombre d'outils reposant sur une base de techniques issues de l'informatique scientifique et en étroite interaction avec l'analyse numérique

Stratégies

La résolution de l'ensemble des échelles spatiales et temporelles implique

- Séparation d'opérateur
- Adaptation de maillage si besoin
- Implicitation de certaines échelles
- Apparition de systèmes d'ODE raides
- Optimisation et profilage
- Optimisation sur architecture parallèle

On voit que la simulation d'un problème réaliste en multiple dimension d'espace requiert un certain nombre d'outils reposant sur une base de techniques issues de l'informatique scientifique et en étroite interaction avec l'analyse numérique

Stratégies

La résolution de l'ensemble des échelles spatiales et temporelles implique

- Séparation d'opérateur
- Adaptation de maillage si besoin
- Implicitation de certaines échelles
- Apparition de systèmes d'ODE raides
- Optimisation et profilage
- Optimisation sur architecture parallèle

On voit que la simulation d'un problème réaliste en multiple dimension d'espace requiert un certain nombre d'outils reposant sur une base de techniques issues de l'informatique scientifique et en étroite interaction avec l'analyse numérique

Stratégies

La résolution de l'ensemble des échelles spatiales et temporelles implique

- Séparation d'opérateur
- Adaptation de maillage si besoin
- Implicitation de certaines échelles
- Apparition de systèmes d'ODE raides
- Optimisation et profilage
- Optimisation sur architecture parallèle

On voit que la simulation d'un problème réaliste en multiple dimension d'espace requiert un certain nombre d'outils reposant sur une base de techniques issues de l'informatique scientifique et en étroite interaction avec l'analyse numérique

Stratégies

La résolution de l'ensemble des échelles spatiales et temporelles implique

- Séparation d'opérateur
- Adaptation de maillage si besoin
- Implicitation de certaines échelles
- Apparition de systèmes d'ODE raides
- Optimisation et profilage
- Optimisation sur architecture parallèle

On voit que la simulation d'un problème réaliste en multiple dimension d'espace requiert un certain nombre d'outils reposant sur une base de techniques issues de l'informatique scientifique et en étroite interaction avec l'analyse numérique

Pourquoi le choix du thème de la réaction diffusion

Par Séparation d'opérateurs / Méthode de pas fractionnaires : on peut séparer les diverses partie convection, diffusion et réaction

- Il existe de solveur dédiés pour chaque partie
- Dans la plupart des cas traités, le point délicat est celui du couplage propre entre diffusion et réaction
- Tous les ennuis sont déjà présente en font un cas d'école particulièrement pertinent

Il faut être conscient des difficultés associées au caractère multi-échelles même si cet aspect ne sera traité que selon l'aspect algorithmique et implémentation et demande des études préliminaires de type analyse numérique

- Séparation d'opérateur en présence d'un large spectre d'échelles
- Adaptation automatique du maillage temps-espace
- Couplage avec l'hydrodynamique

Pourquoi le choix du thème de la réaction diffusion

Par Séparation d'opérateurs / Méthode de pas fractionnaires : on peut séparer les diverses partie convection, diffusion et réaction

- Il existe de solveur dédiés pour chaque partie
- Dans la plupart des cas traités, le point délicat est celui du couplage propre entre diffusion et réaction
- Tous les ennuis sont déjà présente en font un cas d'école particulièrement pertinent

Il faut être conscient des difficultés associées au **caractère multi-échelles** même si cet aspect ne sera traité que selon l'aspect algorithmique et implémentation et demande des études préliminaires de type **analyse numérique**

- Séparation d'opérateur en présence d'un large spectre d'échelles
- Adaptation automatique du maillage temps-espace
- Couplage avec l'hydrodynamique

Pourquoi le choix du thème de la réaction diffusion

Par Séparation d'opérateurs / Méthode de pas fractionnaires : on peut séparer les diverses partie convection, diffusion et réaction

- Il existe de solveur dédiés pour chaque partie
- Dans la plupart des cas traités, le point délicat est celui du couplage propre entre diffusion et réaction
- Tous les ennuis sont déjà présente en font un cas d'école particulièrement pertinent

Il faut être conscient des difficultés associées au **caractère multi-échelles** même si cet aspect ne sera traité que selon l'aspect algorithmique et implémentation et demande des études préliminaires de type **analyse numérique**

- Séparation d'opérateur en présence d'un large spectre d'échelles
- Adaptation automatique du maillage temps-espace
- Couplage avec l'hydrodynamique

Pourquoi le choix du thème de la réaction diffusion

Par Séparation d'opérateurs / Méthode de pas fractionnaires : on peut séparer les diverses partie convection, diffusion et réaction

- Il existe de solveur dédiés pour chaque partie
- Dans la plupart des cas traités, le point délicat est celui du couplage propre entre diffusion et réaction
- Tous les ennuis sont déjà présente en font un cas d'école particulièrement pertinent

Il faut être conscient des difficultés associées au **caractère multi-échelles** même si cet aspect ne sera traité que selon l'aspect algorithmique et implémentation et demande des études préliminaires de type **analyse numérique**

- Séparation d'opérateur en présence d'un large spectre d'échelles
- Adaptation automatique du maillage temps-espace
- Couplage avec l'hydrodynamique

Pourquoi le choix du thème de la réaction diffusion

Par Séparation d'opérateurs / Méthode de pas fractionnaires : on peut séparer les diverses partie convection, diffusion et réaction

- Il existe de solveur dédiés pour chaque partie
- Dans la plupart des cas traités, le point délicat est celui du couplage propre entre diffusion et réaction
- Tous les ennuis sont déjà présente en font un cas d'école particulièrement pertinent

Il faut être conscient des difficultés associées au **caractère multi-échelles** même si cet aspect ne sera traité que selon l'aspect algorithmique et implémentation et demande des études préliminaires de type **analyse numérique**

- Séparation d'opérateur en présence d'un large spectre d'échelles
- Adaptation automatique du maillage temps-espace
- Couplage avec l'hydrodynamique

Plan de la présentation

Système de Belousov-Zhabotinsky

Système de Belousov-Zhabotinsky
Nonlinear chemical dynamics

(Dpt Chemical Engineering Leeds - Ferroin on a nafion membrane)

Système de Belousov-Zhabotinsky

Deux variables : b semi-rapide et c lente :

$$\partial_t b - D_b \, \Delta \, b = \frac{1}{\varepsilon}\left(b - b^2 - f\,c\,(\frac{b+q}{b-q})\right)$$

$$\partial_t c - D_c \, \Delta \, c = b - c$$

Trois variables a rapide, b semi-rapide et c lente :

$$\partial_t a - D_a \, \Delta \, a = \frac{1}{\mu}\,(a\,(b-q) - f\,c)$$

$$\partial_t b - D_b \, \Delta \, b = \frac{1}{\varepsilon}\left(b - b^2 - a\,(b+q)\right)$$

$$\partial_t c - D_c \, \Delta \, c = b - c$$

(Oregonator model Jahnke Skaggs Winfree 89, Epstein Pojman 98, Gray Scott 94) b : hypobromous acid, c : bromide ions – a :cerium IV (Field Köros Noyes 72)
$\varepsilon = 0.01$, $D_b = 1.0$, $D_c = 0.6$, $f = 1.6$, $q = 0.002$, $\mu = 1.e-5$

Système de Belousov-Zhabotinsky

Deux variables : b semi-rapide et c lente :

$$\partial_t b - D_b \Delta b = \frac{1}{\varepsilon}\left(b - b^2 - f\,c\,(\frac{b+q}{b-q})\right)$$
$$\partial_t c - D_c \Delta c = b - c$$

Trois variables a rapide, b semi-rapide et c lente :

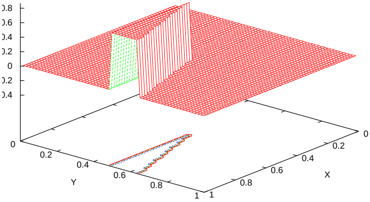
$$\partial_t a - D_a \Delta a = \frac{1}{\mu}\left(a\,(b-q) - f\,c\right)$$

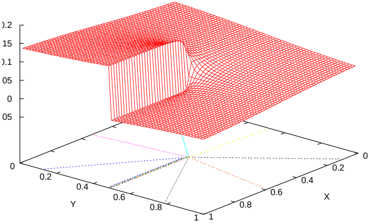
$$\partial_t b - D_b \Delta b = \frac{1}{\varepsilon}\left(b - b^2 - a\,(b+q)\right)$$
$$\partial_t c - D_c \Delta c = b - c$$

(Oregonator model Jahnke Skaggs Winfree 89, Epstein Pojman 98, Gray Scott 94) b : hypobromous acid, c : bromide ions – a :cerium IV (Field Köros Noyes 72)
$\varepsilon = 0.01$, $D_b = 1.0$, $D_c = 0.6$, $f = 1.6$, $q = 0.002$, $\mu = 1.e-5$

Solution "quasi-exacte" pour BZ

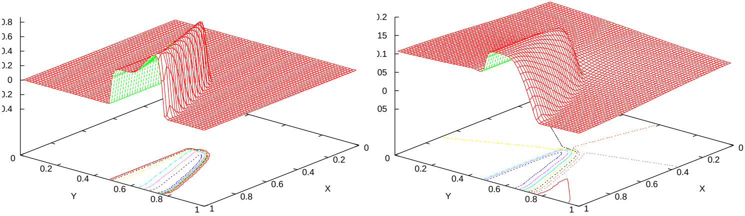
Système de Belousov-Zhabotinsky avec deux variables *b* et *c*





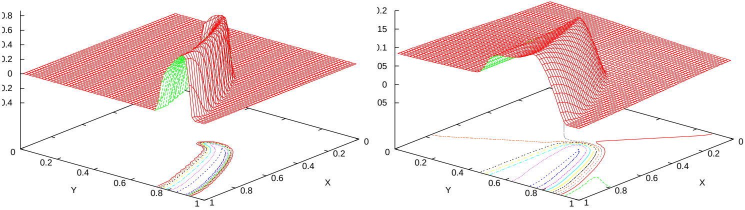
Solution "quasi-exacte" pour BZ

Système de Belousov-Zhabotinsky avec deux variables *b* et *c*



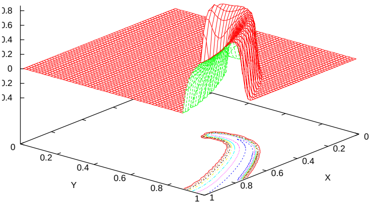
Solution "quasi-exacte" pour BZ

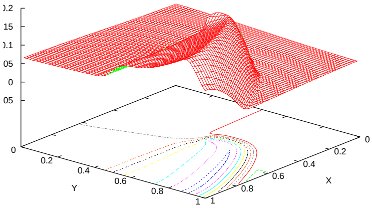
Système de Belousov-Zhabotinsky avec deux variables *b* et *c*



Solution "quasi-exacte" pour BZ

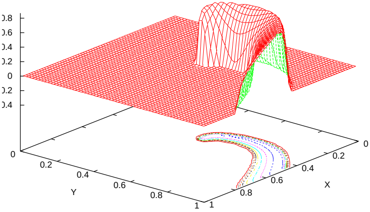
Système de Belousov-Zhabotinsky avec deux variables *b* et *c*

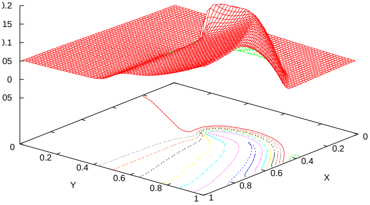




Solution "quasi-exacte" pour BZ

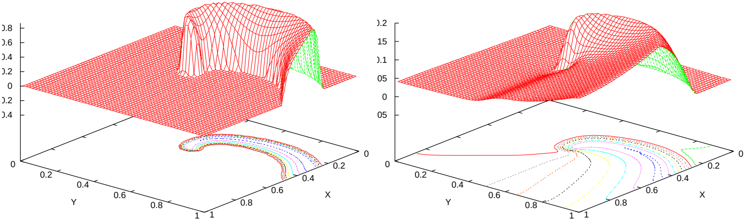
Système de Belousov-Zhabotinsky avec deux variables *b* et *c*





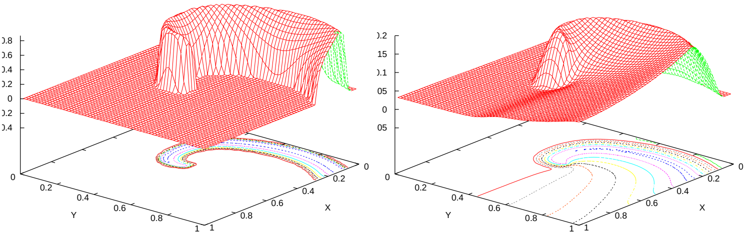
Solution "quasi-exacte" pour BZ

Système de Belousov-Zhabotinsky avec deux variables *b* et *c*



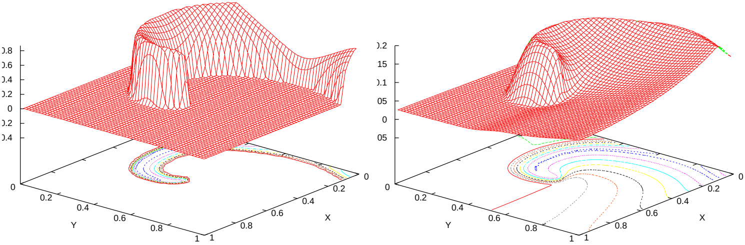
Solution "quasi-exacte" pour BZ

Système de Belousov-Zhabotinsky avec deux variables b et c



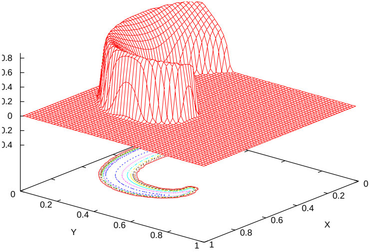
Solution "quasi-exacte" pour BZ

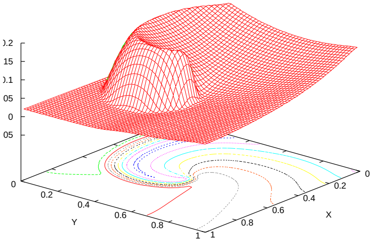
Système de Belousov-Zhabotinsky avec deux variables *b* et *c*



Solution "quasi-exacte" pour BZ

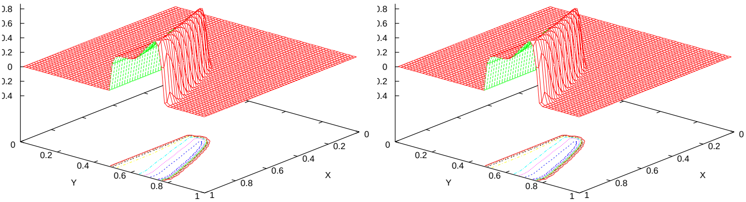
Système de Belousov-Zhabotinsky avec deux variables *b* et *c*





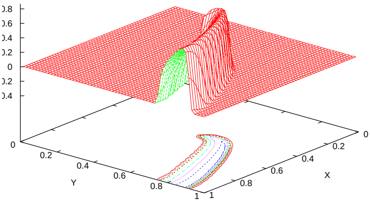
BZ avec splitting de Strang RDR

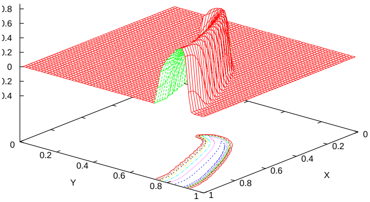
Système Belousov-Zhabotinsky à deux variables
Présentation de la variable b avec $\Delta t = 2/256$



Strang splitting RDR pour BZ

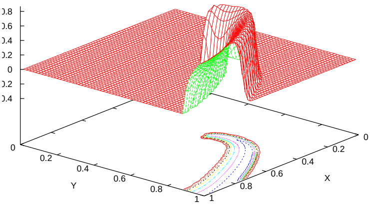
Système Belousov-Zhabotinsky à deux variables
Présentation de la variable b avec $\Delta t = 2/256$





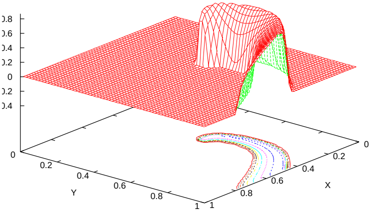
Strang splitting RDR pour BZ

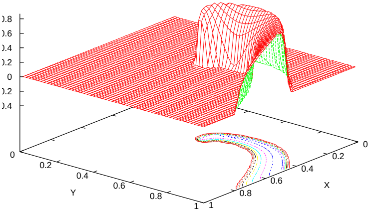
Système Belousov-Zhabotinsky à deux variables
Présentation de la variable b avec $\Delta t = 2/256$



Strang splitting RDR pour BZ

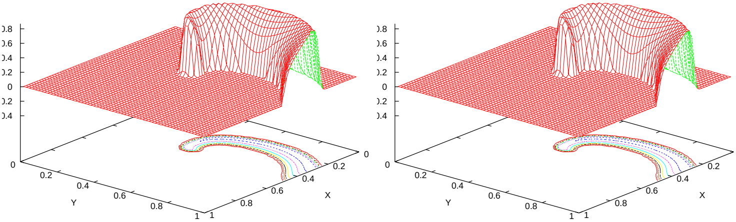
Système Belousov-Zhabotinsky à deux variables
Présentation de la variable *b* avec $\Delta t = 2/256$





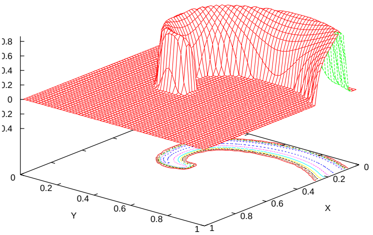
Strang splitting RDR pour BZ

Système Belousov-Zhabotinsky à deux variables
Présentation de la variable b avec $\Delta t = 2/256$



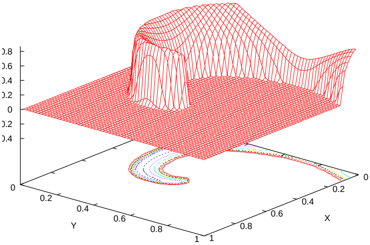
Strang splitting RDR pour BZ

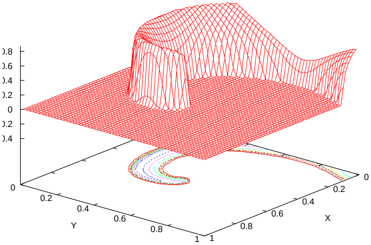
Système Belousov-Zhabotinsky à deux variables
Présentation de la variable *b* avec $\Delta t = 2/256$



Strang splitting RDR pour BZ

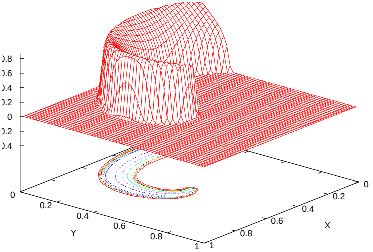
Système Belousov-Zhabotinsky à deux variables
Présentation de la variable b avec $\Delta t = 2/256$

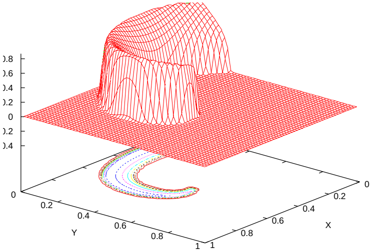




Strang splitting RDR pour BZ

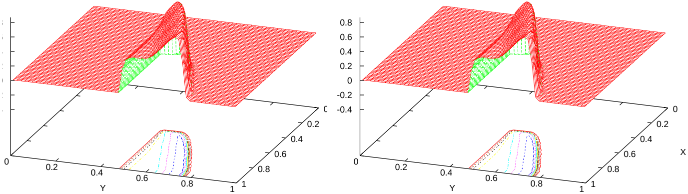
Système Belousov-Zhabotinsky à deux variables
Présentation de la variable b avec $\Delta t = 2/256$





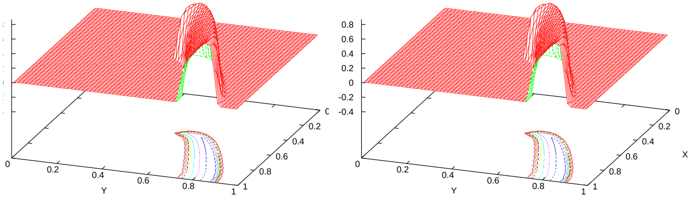
Strang splitting RDR pour BZ

Système Belousov-Zhabotinsky à trois variables
Présentation de la variable b avec $\Delta t = 2/256$



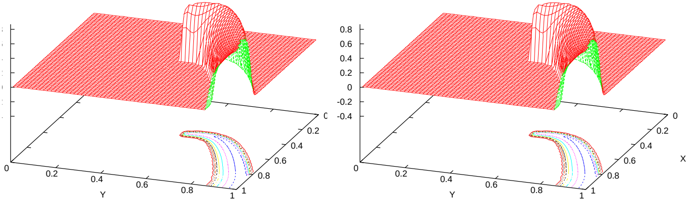
Strang splitting RDR pour BZ

Système Belousov-Zhabotinsky à trois variables
Présentation de la variable b avec $\Delta t = 2/256$



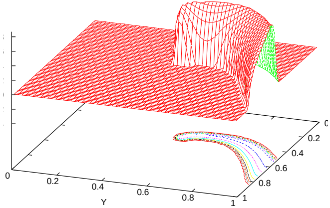
Strang splitting RDR pour BZ

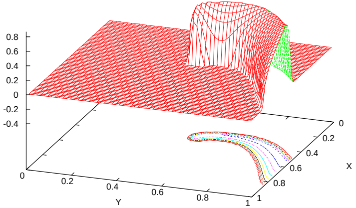
Système Belousov-Zhabotinsky à trois variables
Présentation de la variable b avec $\Delta t = 2/256$



Strang splitting RDR pour BZ

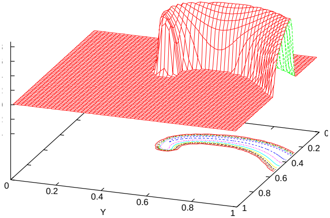
Système Belousov-Zhabotinsky à trois variables
Présentation de la variable b avec $\Delta t = 2/256$

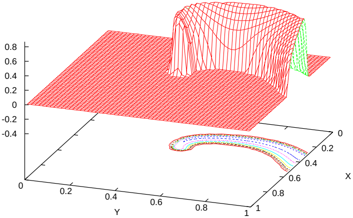




Strang splitting RDR pour BZ

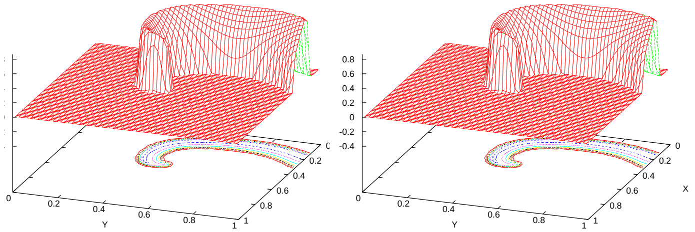
Système Belousov-Zhabotinsky à trois variables
Présentation de la variable b avec $\Delta t = 2/256$





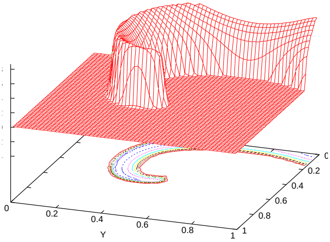
Strang splitting RDR pour BZ

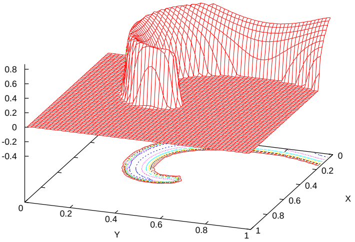
Système Belousov-Zhabotinsky à trois variables
Présentation de la variable b avec $\Delta t = 2/256$



Strang splitting RDR pour BZ

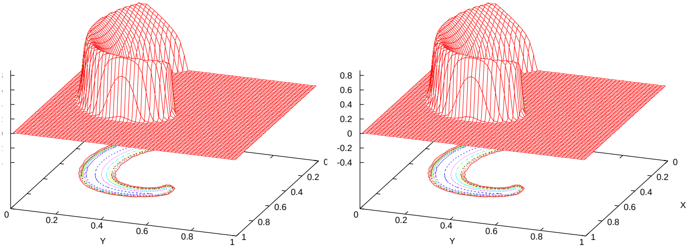
Système Belousov-Zhabotinsky à trois variables
Présentation de la variable b avec $\Delta t = 2/256$





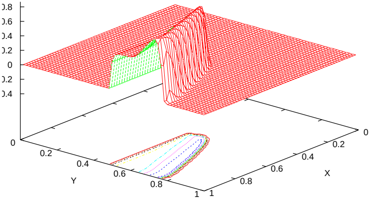
Strang splitting RDR pour BZ

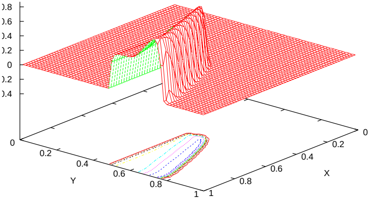
Système Belousov-Zhabotinsky à trois variables
Présentation de la variable b avec $\Delta t = 2/256$



Strang splitting RDR pour BZ

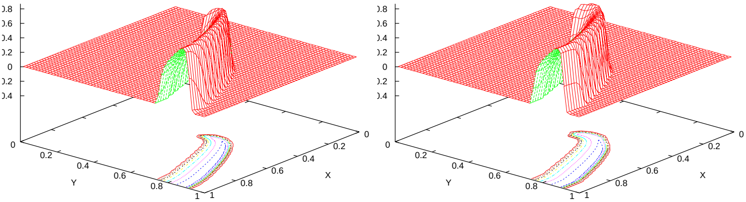
Système Belousov-Zhabotinsky à deux variables
Présentation de b avec splitting de Strang $\Delta t = 2/64$





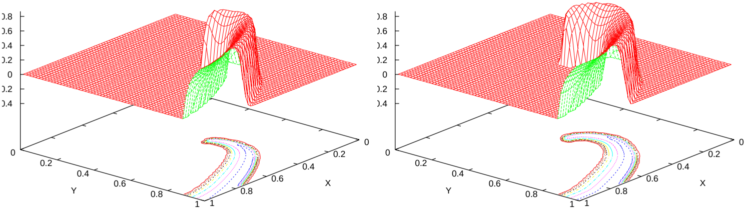
Strang splitting RDR pour BZ

Système Belousov-Zhabotinsky à deux variables
Présentation de b avec splitting de Strang $\Delta t = 2/64$



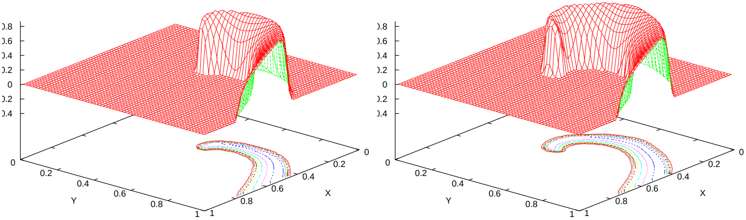
Strang splitting RDR pour BZ

Système Belousov-Zhabotinsky à deux variables
Présentation de b avec splitting de Strang $\Delta t = 2/64$



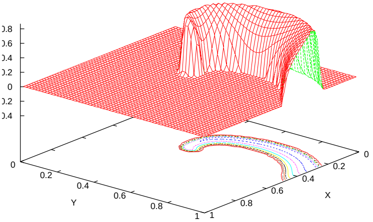
Strang splitting RDR pour BZ

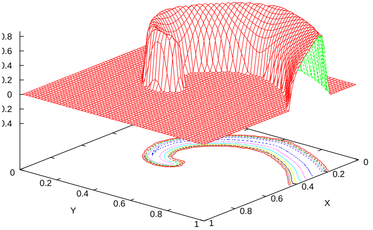
Système Belousov-Zhabotinsky à deux variables
Présentation de b avec splitting de Strang $\Delta t = 2/64$



Strang splitting RDR pour BZ

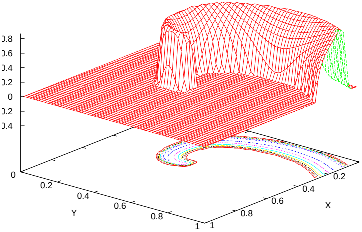
Système Belousov-Zhabotinsky à deux variables
Présentation de b avec splitting de Strang $\Delta t = 2/64$

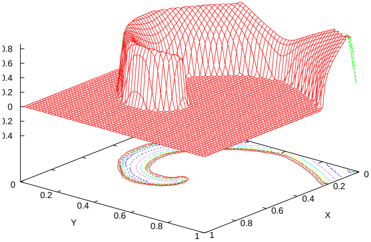




Strang splitting RDR pour BZ

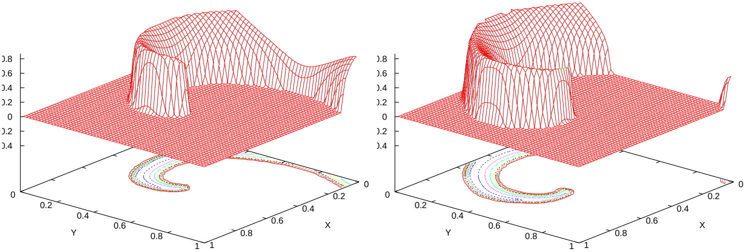
Système Belousov-Zhabotinsky à deux variables
Présentation de b avec splitting de Strang $\Delta t = 2/64$





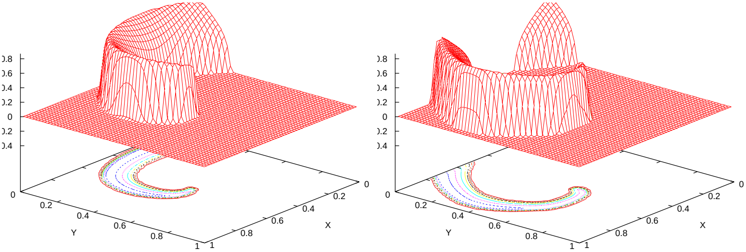
Strang splitting RDR pour BZ

Système Belousov-Zhabotinsky à deux variables
Présentation de b avec splitting de Strang $\Delta t = 2/64$



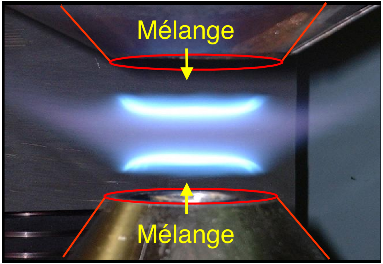
Strang splitting RDR pour BZ

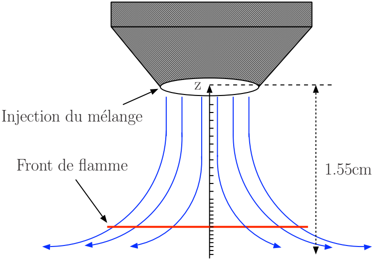
Système Belousov-Zhabotinsky à deux variables
Présentation de b avec splitting de Strang $\Delta t = 2/64$



Plan de la présentation

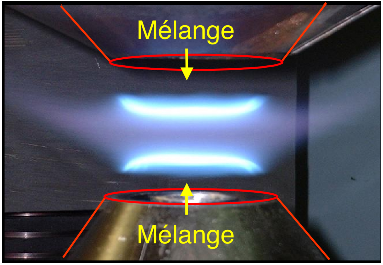
Dynamique d'une flamme de prémélange à contre-courant pulsée

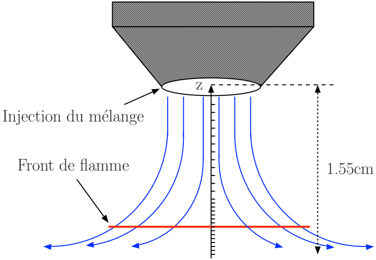




Flamme de prémélange méthane-air pulsée à 100Hz - 10% - mode acoustique
Comparaisons avec les mesures expérimentale obtenues au laboratoire EM2C (P. Duchaine, C. Goefpert, P. Palies, L. Zimme et T. Schuller)

Dynamique d'une flamme de prémélange à contre-courant pulsée





Cadre de l'approximation des Faibles Nombres de Mach - hypothèse d'autosimilarité - modélisation détaillée 1D

Configuration idéale pour l'évaluation des méthodes numériques sur un modèle avec chimie complexe et transport détaillé (45 species 250 reactions)

Hypothèses

- Chimie complexe
- Transport détaillé
- Configuration 2D axi-symétrique
- Solution auto-similaire

$$\rho = \rho(z,t) \qquad T = T(z,t) \qquad Y_k = Y_k(z,t)$$

$$\rho u_z = V(z,t) \qquad u_r = rU(z,t) \qquad \tilde{p} = -J(t)\frac{r^2}{2} + \hat{p}(z,t)$$

$\hookrightarrow$ Reproduction fidèle de la dynamique de flamme pulsée par rapport aux expériences

- N. Darabiha, “Transient behaviour of laminar counterflow hydrogen-air diffusion flames with complex chemistry”, Combust. Sci. and Tech., 1992

Hypothèses

- Chimie complexe
- Transport détaillé
- Configuration 2D axi-symétrique
- Solution auto-similaire

$$\rho = \rho(z,t) \qquad T = T(z,t) \qquad Y_k = Y_k(z,t)$$

$$\rho u_z = V(z,t) \qquad u_r = rU(z,t) \qquad \tilde{p} = -J(t)\frac{r^2}{2} + \hat{p}(z,t)$$

$\hookrightarrow$ Reproduction fidèle de la dynamique de flamme pulsée par rapport aux expériences

- N. Darabiha, “Transient behaviour of laminar counterflow hydrogen-air diffusion flames with complex chemistry”, Combust. Sci. and Tech., 1992

Système d'équation des flammes isobares

Système d'équations.

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + c_p V \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z}\right) = -\sum_{k=1}^{n_S} h_k m_k \omega_k - \sum_{k=1}^{n_S} \rho Y_k c_{p,k} \mathcal{V}_{z,k} \frac{\partial T}{\partial z},$$

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + V \frac{\partial Y_k}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z}\left(\rho Y_k \mathcal{V}_{z,k}\right) = m_k \omega_k,$$

$$\frac{\partial J}{\partial z} = 0,$$

$$\rho \frac{\partial U}{\partial t} + \rho U^2 + V \frac{\partial U}{\partial z} = J + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu \frac{\partial U}{\partial z}\right),$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + 2\rho U + \frac{\partial V}{\partial z} = 0.$$

Application de la méthode de séparation d'opérateur

- Le fait de séparer la convection-diffusion d'un côté et la réaction de l'autre introduit de très fortes variations du champ de vitesse associées au gradient temporel de densité.
- Nécessité de prendre en compte une contribution chimique à la dérivée temporelle de densité pendant le pas de convection-diffusion.

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\sum_{k=1}^{n_S} h_k m_k \omega_k$$

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = m_k \omega_k$$

Application de la méthode de séparation d'opérateur

- Le fait de séparer la convection-diffusion d'un côté et la réaction de l'autre introduit de très fortes variations du champ de vitesse associées au gradient temporel de densité.
- Nécessité de prendre en compte une contribution chimique à la dérivée temporelle de densité pendant le pas de convection-diffusion.

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\sum_{k=1}^{n_S} h_k m_k \omega_k$$

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = m_k \omega_k$$

Application de la méthode de séparation d'opérateur

- Le fait de séparer la convection-diffusion d'un côté et la réaction de l'autre introduit de très fortes variations du champ de vitesse associées au gradient temporel de densité.
- Nécessité de prendre en compte une contribution chimique à la dérivée temporelle de densité pendant le pas de convection-diffusion.

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\sum_{k=1}^{n_S} h_k m_k \omega_k$$

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = m_k \omega_k$$

Application de la méthode de séparation d'opérateur

- En utilisant la loi d'état, la contribution chimique de la dérivée temporelle de la densité s'écrit :

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{chemical} = \frac{1}{\rho c_p} \cdot \sum_{k=1}^{n_S} h_k m_k \omega_k - m \sum_{k=1}^{n_S} \omega_k$$

- Cette contribution doit être ajouté au pas de convection-diffusion step

Equation de densité dans le pas de convection-diffusion.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{chimie} + 2\rho U + \frac{\partial V}{\partial z} = 0$$

Application de la méthode de séparation d'opérateur

- En utilisant la loi d'état, la contribution chimique de la dérivée temporelle de la densité s'écrit :

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{chemical} = \frac{1}{\rho c_p} \cdot \sum_{k=1}^{n_S} h_k m_k \omega_k - m \sum_{k=1}^{n_S} \omega_k$$

- Cette contribution doit être ajouté au pas de convection-diffusion step

Equation de densité dans le pas de convection-diffusion.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{chimie} + 2\rho U + \frac{\partial V}{\partial z} = 0$$

□

Résolution numérique

- Discrétisation spatiale par différences finies :
  - diffusion : schéma centré
  - convection : schéma upwind
- Résolution du problème par une méthode de Newton
- discretisation temporelle :
  - convection-diffusion : 2nde ordre “fully implicit”
  - reaction : radauIIA, Runge Kutta implicite

La raideur rentre en jeu !

- Réduction d'ordre due aux échelles temporelles rapides (voir reference Descombes, Massot, Numerische Mathematik, 2004)
- Réduction d'ordre due aux forts gradients spatiaux (voir reference Descombes, Dumont, Louvet, Massot, International Journal of Computer Mathematics, 2007)

La raideur rentre en jeu !

Comportement des erreurs.

Dans le cas des échelles temporelles rapides, l'erreur locale pour Lie et Strang se comporte comme :

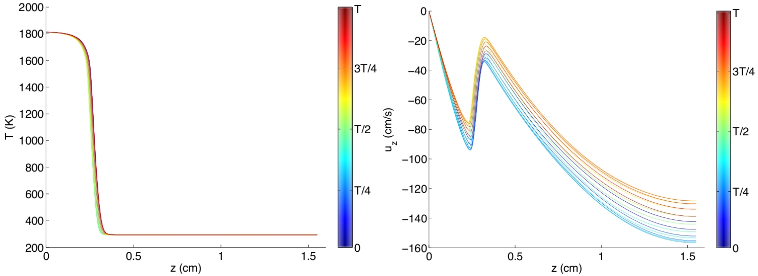
$$\|E_L(t)U_0\|_2 \leq \left(\frac{C_{L0}\, t^2}{2} + \frac{C_{L1}\, t\sqrt{t}}{3\sqrt{2e}} \right) \|U_0\|_2$$

$$\|E_S(t)U_0\|_2 \leq \frac{(C_{S0} + 2C_{S1})\, t^3}{12} + \frac{C_{S2}\, t^2\sqrt{t}}{15\sqrt{2e}} + \frac{C_{S3}\alpha\, t\sqrt{t}}{4}$$

En cas de forts gradients spatiaux, il existe une constante explicite pour Mie et Strang $\theta > 0$ ne dépendant que de $\|\sqrt{A}U_0\|_2$ telle que pour tout $t \leq \theta$, $\|E_L(t)U_0\|_2$ se comporte comme t^2 mais pour $t \geq \theta$, $\|E_L(t)U_0\|_2$ se comporte comme $t\sqrt{t}$. □

Dynamique de la flamme

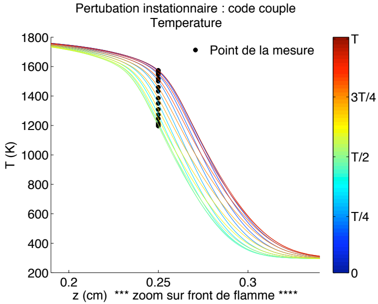
Code Couplé

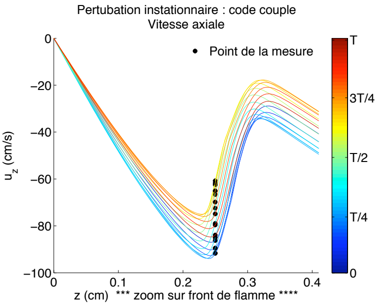


Pulsation de la flamme de type acoustique conforme aux mesures expérimentales

Dynamique de la flamme

Code Couplé

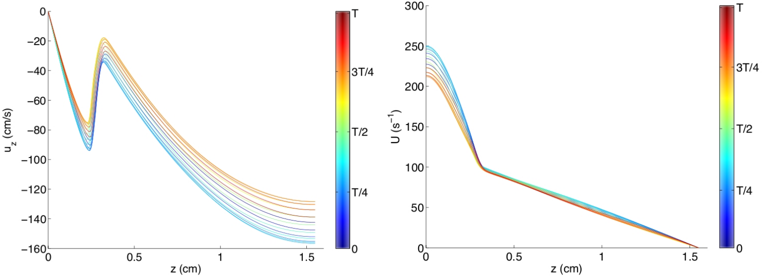




Pulsation de la flamme de type acoustique conforme aux mesures expérimentales

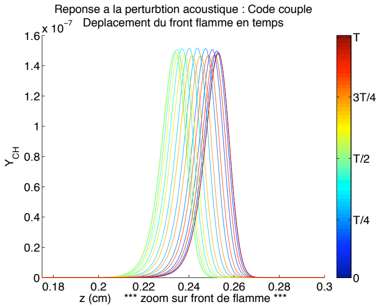
Résultats numériques

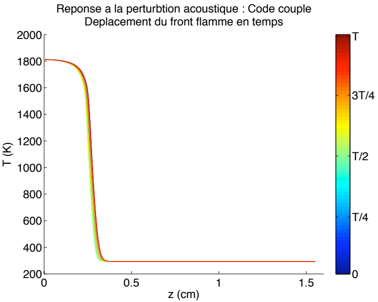
Simulations instationnaire : la perturbation de la flamme est générée par une excitation acoustique oscillante.



Profils de vitesse axiale et vitesse radiale réduite pour une valeur de la période T de l'oscillation perturbatrice sinusoidale à 10% de la valeur d'entrée de la vitesse moyenne et à une fréquence de 100Hz.

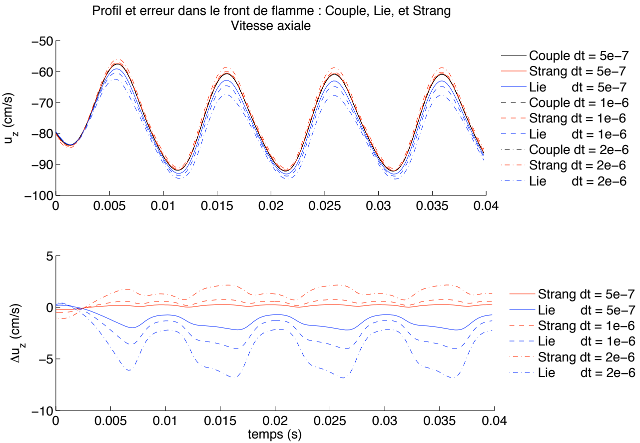
Résultats numériques





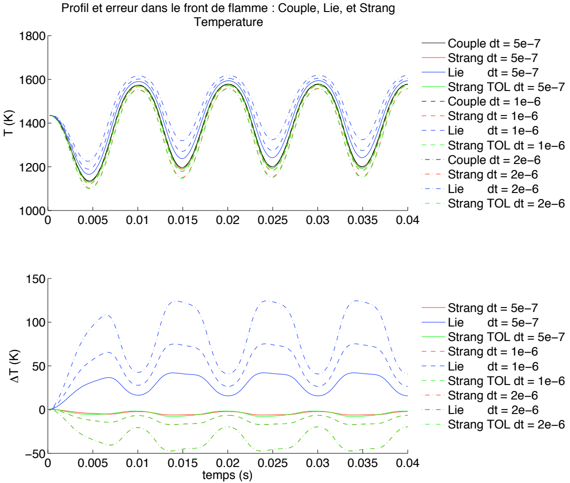
Profils de fraction massique de Y_{CH} et température pour une valeur de la période T de l'oscillation perturbatrice sinusoidale à 10% de la valeur d'entrée de la vitesse moyenne et à une fréquence de 100Hz.

Erreurs générées par le splitting



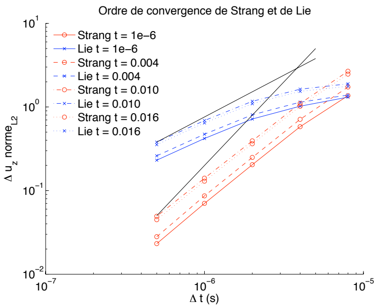
Dynamique oscillante préservée Vitesse axiale

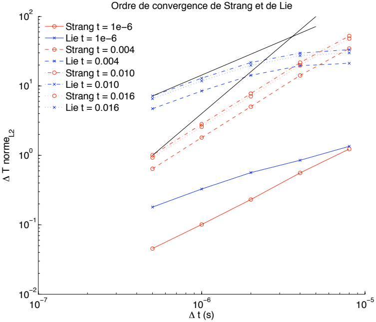
Erreurs générées par le splitting



Dynamique oscillante préservée Température

Ordre de convergence





$\hookrightarrow$ Réduction d'ordre comme prévu par la théorie

$\hookrightarrow$ ANGD : donner les outils, hors hydrodynamique, que l'on peut découpler et traiter à part, pour simuler ce niveau de complexité mais pour des simulations multi-D

References and Grants I

- References

S. Descombes, T. Dumont, M. Massot
Operator splitting for nonlinear reaction-diffusion systems with an entropic structure : singular perturbation, order reduction and application to spiral waves
Proceeding of the Workshop “Patterns and waves : theory and applications”, Saint-Petersbourg (2003)

S. Descombes and M. Massot
Operator splitting for nonlinear reaction-diffusion systems with an entropic structure : singular perturbation and order reduction
Numerische Mathematik (2004)

C. Besse, B. Bidégaray, S. Descombes
Order estimates in time of splitting methods for the nonlinear Schrödinger equation
SIAM J. Numer. Anal. (2002)

References and Grants II

M. Massot
Singular perturbation analysis for the reduction of complex chemistry in gaseous mixtures using the entropic structure
DCDS - B (2002)

V. Giovangigli and M. Massot
Multicomponent reactive flows : reduced chemistry and entropic structure on partial equilibrium manifolds
M2AS (2004)

S. Descombes and M. Massot
On the local error of splitting approximations of reaction-diffusion equations
Preprint (2006)

References and Grants III

S. Descombes, T. Dumont, V. Louvet, M. Massot
On the local and global errors of splitting approximations of reaction-diffusion equations with high spatial gradients
International Journal of Computer Mathematics (2007)

- Grant
  - Young Investigator Award (S. Descombes, M. Massot)
    "New Interfaces of Mathematics" (ACI NIM),
    French Ministry of Research 2003-2006
  - Projet Exploratoire Pluridisciplinaires (Dpt ST2I et MPPU du CNRS)
    2007-2008 (F. Laurent et A. Bourdon - EM2C)