

JAD DABAGHI

Enseignant Chercheur DVRC
École Supérieure d'Ingénieur
Léonard de Vinci
Nationalité : Française
30 ans

🏠 9 Rue Alfred Kastler, 44300 Nantes
✉ jad.dabaghi@devinci.fr
✉ jaddabaghi@hotmail.com
☎ +33 6 32 72 72 71
🌐 <https://jdabaghi.github.io/>



INTÉRÊTS DE RECHERCHE

- Analyse numérique des EDP
- Estimations d'erreur *a posteriori*
- Inéquations variationnelles (mécanique du contact, écoulements multiphasiques en milieu poreux)
- Méthodes de parallélisme en temps, réduction de modèle
- Processus aléatoires (méthodes de Monte-Carlo, équations de diffusion, neutronique)
- Optimisation, machine learning, intelligence artificielle

EXPÉRIENCES PROFESSIONNELLES

09/2022– : **Enseignant Chercheur** en mathématiques, École Supérieure d'Ingénieur Léonard de Vinci (DVRC), France.

Description : En tant qu'enseignant chercheur en mathématiques à l'ESILV, j'effectue une activité d'enseignement pour les premières années du cycle ingénieur. Les matières abordées concerne aussi bien l'analyse que l'algèbre et les probabilités. Parallèlement à cette activité d'enseignement, j'effectue une activité de recherche dans le Modelisation Group du DVRC. Ma thématique de recherche gravite autour de l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles avec pour application les problématiques environnementales.

04/2021–09/2022 : **Postdoctorat**, École des Ponts ParisTech (CERMICS), France. Référence : Virginie Ehrlacher (CERMICS & INRIA Matherials). Financement : ANR Comodo.

Sujet du Postdoctorat : *Construction d'une méthode de réduction de modèle pour la résolution d'un problème de diffusion croisée dédié à la fabrication de cellules photovoltaïques.*

Description : L'objectif de ce postdoc consista à développer des méthodes numériques robustes pour la simulation d'un modèle de diffusion croisée dédié à l'optimisation du procédé de fabrication de cellules solaires à couches minces. Les systèmes de diffusion croisée sont des systèmes d'équations aux dérivées partielles paramétriques, paraboliques, non linéaires, dégénérées. La résolution des schémas numériques adaptés au modèle mathématique sous-jacent de diffusion croisée s'avère très coûteuse du fait du nombre d'espèces chimiques présentes, de la finesse de la discrétisation espace-temps, et du nombre conséquent de paramètres à tester. Pour palier à cette difficulté, nous avons construit un modèle réduit de type POD respectant également les propriétés mathématiques structurelles du problème de diffusion croisée (positivité, conservation de la masse, dissipation d'entropie) et accélérant sa résolution numérique [8]. Les essais numériques ont été réalisés sous Python avec utilisation du cluster de calcul du CERMICS.

09/2019–02/2021 : **Postdoctorat**, Sorbonne Université (LJLL) et CEA Paris-Saclay (LTSD), France. Référents : Yvon Maday (Sorbonne Université) et Andrea Zoia (CEA Paris-Saclay). Financement : ANR Ciné-Para.

Sujet du Postdoctorat : *Étude de la méthode pararéelle pour une simulation Monte-Carlo*

appliquée au transport des neutrons dans les réacteurs nucléaires.

Description : L'objectif de ce postdoc fut d'accélérer une simulation numérique de type Monte-Carlo stochastique dédiée aux équations de diffusion et au problème du transport des neutrons dans les réacteurs nucléaires en utilisant la procédure pararéelle déterministe. Une première étude de nature académique est consacrée à concevoir un algorithme hybride de type Monte-Carlo "pararéalisé" pour l'équation de la diffusion [1]. La seconde partie de ce postdoc consiste à adapter notre approche à l'équation de Boltzmann en neutronique [9]. La notion de convergence de notre algorithme hybride pour ces deux problèmes est repensée et nous montrons que si l'on dispose d'un grand nombre de processeurs, notre approche réduit significativement le temps de calcul de la simulation numérique. Les essais numériques ont été réalisés en Matlab et C++.

Collaboration : Tony Lelièvre (professeur au CERMICS).

PARCOURS ACADÉMIQUE

11/2015–06/2019 : **Thèse de Doctorat**, INRIA Paris & Sorbonne Université, France.

Encadrants : Martin Vohralík (INRIA Paris & ENPC) et Vincent Martin (UTC Compiègne).

Financement : ERC Gatipor.

Thèse soutenue le 3 Juin 2019, membres du Jury : M. Faker Ben Belgacem, M. Franz Chouly (rapporteur), M. Patrick Hild (président du jury), M. Vincent Martin, M. Pascal Omnes, Mme Béatrice Rivière (rapporteur), Mme Jean Roberts, M. Martin Vohralík.

Sujet de Thèse : *Estimations d'erreur a posteriori pour des inégalités variationnelles : application à un écoulement diphasique en milieu poreux.*

Description : Trois inégalités variationnelles modélisant un problème de contact entre deux membranes [3] et sa version instationnaire [4], et un écoulement diphasique avec changement de phase en milieu poreux [5] ont été étudiées. Des discrétisations spatiales de type éléments finis et volumes finis ont été employées, puis des algorithmes de Newton semi-lisse ont été introduits pour traiter les non-linéarités. Des estimations d'erreur *a posteriori* par la technique des flux équilibrés ont été établies : constante de fiabilité égale à 1, efficacité locale des estimateurs, identification des composantes de l'erreur, adaptivité (réduction du nombre d'itérations de nos solveurs). Les essais numériques ont été réalisés sur Matlab. Collaboration : Ibtiel Ben Gharbia (ingénieure de recherche à l'IFPEN).

2014–2015 : **Master 2 en analyse numérique des EDP** à Sorbonne Université, École Polytechnique & ENPC avec *mention Bien*.

PUBLICATIONS

[1] J. Dabaghi, Y. Maday, A. Zoia, **A hybrid parareal Monte-Carlo algorithm for parabolic problems**. *Journal of Computational and Applied Mathematics, Elsevier*, 2023.
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03143554>

[2] J. Dabaghi, G. Delay, **A unified framework for high-order numerical discretizations of variational inequalities**. *Computers & Mathematics with Applications, Elsevier*, 92, 2021.

[3] J. Dabaghi, V. Martin, M. Vohralík, **Adaptive inexact semismooth Newton methods for the contact problem between two membranes**. *Journal of Scientific Computing, Springer*, 84 (2) 28, 2020.

[4] J. Dabaghi, V. Martin, M. Vohralík, **A posteriori estimates distinguishing the error components and adaptive stopping criteria for numerical approximations of parabolic variational inequalities**. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Elsevier*, 367, 2020.

[5] I. Ben Gharbia, J. Dabaghi, V. Martin, M. Vohralík, **A posteriori error estimates for a**

compositional two-phase flow with nonlinear complementarity constraints. *Computational Geosciences*, Springer, 24 (3), 1031-1055, 2020.

[6] J. Dabaghi, C. Strossner, V. Ehrlacher, **Computation of the self-diffusion coefficient with low-rank tensor methods : application to the simulation of a cross-diffusion system.** Accepté dans *ESAIM : Proceedings and Surveys*, 2022.
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03441986>

ARTICLES SOUMIS À PUBLICATION

[7] J. Dabaghi, V. Ehrlacher, C. Strossner, **Tensor approximation of the self-diffusion matrix of tagged particle processes.** En révision dans *Journal of Computational Physics*, Elsevier, 2022. <https://hal.inria.fr/hal-03635205>

[8] J. Dabaghi, V. Ehrlacher, **Structure-preserving reduced basis method for cross-diffusion systems.** En révision dans *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 2022.
<https://hal.inria.fr/hal-03696025>

ARTICLES EN PRÉPARATION

[9] J. Dabaghi, Y. Maday, A. Zoia, **A hybrid parareal algorithm for the Boltzmann equation in neutronics.** En préparation, 2022.

SÉJOURS SCIENTIFIQUES

Novembre 2021 : ACSIOM : invité par M. Daniele Di Pietro, Université de Montpellier, France.

Juillet-Aout 2021 : CEMRACS : Luminy, France.

Sujet : Calcul du coefficient d'auto-diffusion pour un problème de diffusion croisée à l'aide de méthodes de tenseurs.

CONFÉRENCES INTERNATIONALES

Avril 2022 : SIAM UQ22 : Atlanta, USA, invité dans un minisymposium, Exposé à venir.

Décembre 2021 : SIMRACE : Rueil-Malmaison, France, Participant.

Septembre 2021 : EFEE 18 : Paris, France, Participant.

Janvier 2021 : WCCM : visioconférence, invité dans un minisymposium, Exposé.

Décembre 2020 : CAN-J : visioconférence, Exposé.

Mars 2019 : SIAM GS19 : Houston, USA, invité dans un minisymposium, Exposé.

Juillet 2018 : WCCM : New-York, USA, invité dans un minisymposium, Exposé.

Juin 2018 : CMWR : Saint-Malo, France, Poster.

Mai 2018 : INTERPORE : Nouvelle Orléans, USA, invité dans un minisymposium, Exposé.

Septembre 2017 : ENUMATH : Voss, Norvège, invité dans un minisymposium, Exposé.

Juin 2017 : ADMOS : Verbania, Italie, invité dans un minisymposium, Exposé.

Mai 2017 : EFEE 15 : Milan, Italie, Exposé.

Septembre 2016 : ECMOR XV : Amsterdam, Pays-bas, Participant.

SÉMINAIRES

Avril 2022 : Séminaire de Mathématiques de Valenciennes : Université Polytechnique Hauts-de-France, Valenciennes, France, Exposé à venir.

Mars 2022 : Séminaire Mathématiques-Physique : IMB, Dijon, France, Exposé.

Janvier 2022 : Laboratoire Paul Painlevé : Université de Lille, France, Exposé.

Janvier 2022 : LAMPS : Université de Perpignan, France, Exposé.

Novembre 2021 : GTNUM : CEA-DAM, Bruyères-le-Châtel, France, Exposé.

Août 2021 : CEMRACS-CIRM : Luminy, France, Exposé.

Février 2021 : MAP5 : Paris, France, Exposé.

Janvier 2021 : LMB : Besançon, France, Exposé.

Décembre 2020 : ACSIOM, IMAG : Montpellier, France, Exposé.

Mai 2019 : LMAC UTC : Compiègne, France, Exposé.

Novembre 2018 : JOURNÉE IFPEN-INRIA : Paris, Exposé.

Février 2016 : ÉQUIPE SERENA, INRIA Paris, Exposé.

ENSEIGNEMENTS

2023 : Dérivation et Intégration pour la 1^{ère} année du cycle préparatoire (42 heures) à l'École Supérieure d'Ingénieur Léonard de Vinci (ESILV).

Ce module introduit les développements limités et asymptotiques, le calcul d'intégrales et les fractions rationnelles.

2023 : Espaces vectoriels pour la 1^{ère} année du cycle préparatoire (33 heures) à l'École Supérieure d'Ingénieur Léonard de Vinci (ESILV).

Ce module introduit les espaces vectoriels, les applications linéaires, l'analyse matricielle et l'algèbre linéaire élémentaire.

2022 : Algèbre pour la 1^{ère} année du cycle préparatoire (48 heures) à l'École Supérieure d'Ingénieur Léonard de Vinci (ESILV).

Ce module présente les notions de bases d'algèbre élémentaire (logique élémentaire, ensembles et applications, polynômes et fractions rationnelles)

2022 : Compléments mathématiques pour la 1^{ère} année du cycle préparatoire (42 heures) à l'École Supérieure d'Ingénieur Léonard de Vinci (ESILV).

Dans ce module est abordé des révisions et approfondissements de notions vues au lycée (géométrie dans l'espace, dénombrement, suites numériques, trigonométrie, systèmes linéaires, dérivation et intégration.

2022 : Travaux dirigés pour les 2^{ème} années du cycle préparatoire. Module Séries (15 heures) à l'École Supérieure d'Ingénieur Léonard de Vinci (ESILV).

Ce module présente les notions de base des suites et séries numériques (suites, séries de fonctions et séries de Fourier) dans l'optique de traiter des problèmes issus de la physique et de l'ingénierie.

2020-2021 : Travaux dirigés pour les L3 de mathématiques. Module Analyse numérique LU3MA232 (26 heures) à Sorbonne Université.

Ce module présente l'analyse numérique élémentaire des équations différentielles : schémas numériques (stabilité, consistance, convergence), systèmes linéaires (pivot de Gauss, décomposition LU et cholesky, gradient conjugué), problèmes non linéaires (méthode de Newton), techniques d'intégration numérique.

2019-2020 : Travaux dirigés pour les L3 de mathématiques. Module Méthodes numériques pour les équations différentielles L3M236 (26 heures) à Sorbonne Université.

Ce module est une introduction aux aspects théoriques et numériques des équations différentielles. Partie théorique : résolution analytique (théorème de Cauchy–Lipschitz), partie numérique : schémas numériques et leurs propriétés (consistance, stabilité, convergence).

2016-2017 : Travaux dirigés pour les L1 de physique. Module Calculus 1M003 (29 heures) à Sorbonne Université.

Ce module présente les notions de base d’analyse et de calcul vectoriel (intégrales, développements limités, équations différentielles) pour des applications en physique, chimie, et ingénierie.

2016-2017 : Travaux dirigés pour les L1 de physique. Module Calcul matriciel 1M004 (36 heures) à Sorbonne Université.

Ce module présente les concepts de bases pour l’analyse et le calcul matriciel dans l’optique de traiter des problèmes issus de la physique et de la chimie.

DISTINCTIONS

2022 : Classé 1er pour un poste d’enseignant chercheur en mathématiques à l’ESILV.

Auditionné au **CNRS section 41/03** “Mathématiques et interactions des mathématiques” et aux postes de Maître de Conférences à l’**Université Paris 13**, à l’**Université Toulouse Paul-Sabatier (Classé 5ème)**, à l’**Université de Perpignan (Classé 5ème)**, à l’**Université Polytechnique Hauts-de-France (Classé 5ème)**, et à l’**Université de Besançon**.

2021 : Auditionné aux postes de Maître de Conférences au **CNAM-Paris** (profil “Calcul scientifique en lien avec les applications industrielles” **Classé 5ème**), à l’**UTC-Compiègne** (profil “calcul scientifique, analyse numérique, équations aux dérivées partielles” **Classé 9ème**), et à l’**INSA-Lyon** (Mathématiques appliquées, méthodes numériques, calcul scientifique, intelligence artificielle).

2021 : Qualification aux fonctions de Maître de Conférences, **Section 60** (Mécanique, génie mécanique, génie civil).

2020 : Qualification aux fonctions de Maître de Conférences, **Section 26** (Mathématiques appliquées).

COLLABORATIONS

Académique : INRIA Paris (SERENA, MATHATERIALS), Sorbonne Université (LJLL), École des Ponts ParisTech (CERMICS), Université de Montpellier (IMAG), EPFL (Suisse).

Industrielle : IFPEN, CEA.

LANGUES

Français (langue maternelle) : ★ ★ ★ ★ ★
 Anglais : ★ ★ ★ ★ ★
 Arabe (libanais parlé) : ★ ★ ★ ★ ☆
 Espagnol : ★ ★ ★ ☆ ☆

PROGRAMMATION

Matlab/Python/Scilab : ★ ★ ★ ★ ★
 C++/Freefem++ : ★ ★ ★ ☆ ☆
 Windows, Linux : ★ ★ ★ ★ ☆
 Latex, Emacs, MS Office : ★ ★ ★ ★ ★

CENTRES D’INTÉRÊTS

Piano : ★ ★ ★ ★ ★

2012 : Master Class avec le premier chef d’orchestre libanais Harout Fazlian.

2010 : Médaille d’argent au concours national de piano Claude Khan dans la catégorie virtuose.

2006 : Premier prix de critique musical et intervention sur Radio France.

Sport : ★ ★ ★ ★ ★

Ski, tennis de table, Badminton.

Postdoctorat (Avril-2021-Mars 2022) : Construction d’une méthode de réduction de modèle pour la résolution d’un problème de diffusion croisée dédié à la fabrication de cellules photovoltaïques.

Dans ce postdoctorat, nous utilisons une méthode de réduction de modèle pour accélérer la résolution numérique d’un système de diffusion croisée. Les systèmes de diffusion croisée sont des modèles mathématiques instationnaires non linéaires, couplés, et potentiellement dégénérés. Ils interviennent dans différents domaines comme la biologie médicale, la chimie, les écoulements polyphasiques, et la protection de l’écosystème et ses ressources. La motivation de la présente étude concerne le procédé de co-évaporation (PVD) lors de la fabrication des cellules solaires à couche mince. Lors de ce procédé, un substrat est introduit dans un four à haute température où les différentes espèces chimiques qui vont constituer la couche mince sont injectées sous forme gazeuse. Les différents composés à la surface du substrat vont diffuser, de telle sorte que les fractions volumiques locales (inconnues du système) de chaque espèce évoluent au cours du temps. Un défi important consiste à optimiser les flux de chaque espèce chimique introduite dans le four pour obtenir une conversion d’énergie à fort rendement. Dans ce travail, nous nous intéressons à la fabrication de la couche mince de type Cuivre-Indium-Gallium-Selenium (CIGS). Le problème de diffusion croisée adapté à ce cadre physique est un système d’EDP paramétrique particulièrement complexe à résoudre du fait du nombre gigantesque de paramètres à tester, et de la discrétisation espace-temps. De plus, ce système de diffusion croisée possède une structure de flot de gradient et des propriétés mathématiques essentielles (positivité de la solution, conservation de la masse, dissipation d’entropie) à conserver lors de son analyse numérique. Nous développons dans un premier temps un schéma numérique de type volume fini préservant les propriétés énoncées ci-dessus. Ensuite, nous construisons un modèle réduit de type POD (Proper Orthogonal Decomposition) robuste permettant de résoudre à moindre coût le modèle étudié pour différents paramètres tout en garantissant les propriétés mathématiques structurelles du modèle continu [8]. La Figure 1 montre en particulier que la solution réduite est toujours po-

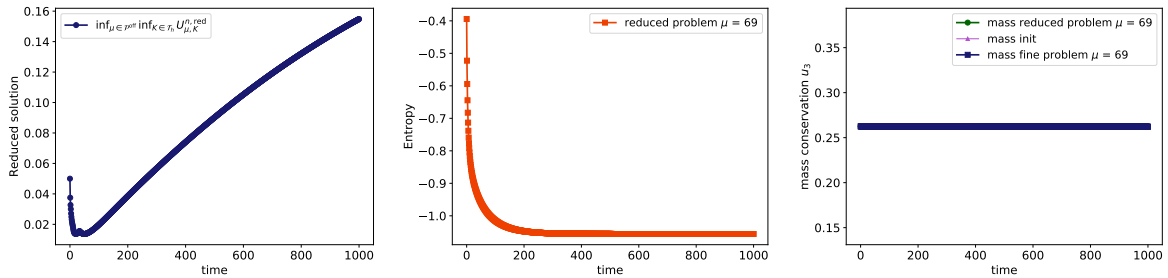


FIGURE 1 – Propriétés de la solution réduite

sitive (Figure 1 gauche) quelque soit la matrice de diffusion-croisée (identifiée à un paramètre μ), quelque soit le pas de temps, et quelque soit la maille spatiale. La figure du milieu montre le caractère décroissant de l’entropie du modèle réduit pour une matrice de diffusion-croisée associée au paramètre $\mu = 69$: plus on avance dans le temps et plus la répartition des espèces chimiques est homogène. Enfin, la figure de droite montre que la masse est conservée pour le problème réduit.

CEMRACS Juillet-Aout 2021 : Calcul du coefficient d’auto-diffusion pour un problème de diffusion croisée à l’aide de méthodes de tenseurs.

Ce projet [6] a été réalisé en collaboration avec Christoph Strossner (doctorant à l’EPFL en Suisse) et Virginie Ehrlicher (CERMICS, ENPC). Nous avons considéré un problème de diffusion croisée s’écrivant comme la limite hydrodynamique d’un modèle stochastique sur réseau. Ce modèle fait intervenir une matrice d’auto-diffusion pouvant être calculée de deux manières : soit en utilisant une méthode probabiliste, soit en résolvant un problème de minimisation en

haute dimension. Ce dernier, retenu pour notre étude, est résolu via une méthode de tenseurs permettant de réduire le temps de calcul. Une fois le calcul du coefficient d'auto-diffusion effectué pour une grille contenant 8 points, nous nous sommes intéressés à la résolution numérique du problème de diffusion croisée. Ce problème de diffusion-croisée est un modèle parabolique non linéaire dégénéré impliquant deux inconnues : la fraction volumique d'une espèce chimique ρ_{red} et la fraction volumique d'une espèce chimique ρ_{blue} . Nous avons employé une méthode de volume fini à deux points pour la discrétisation en espace et le schéma d'Euler rétrograde pour la discrétisation en temps. Dans la Figure 2 (gauche haut) nous présentons deux techniques

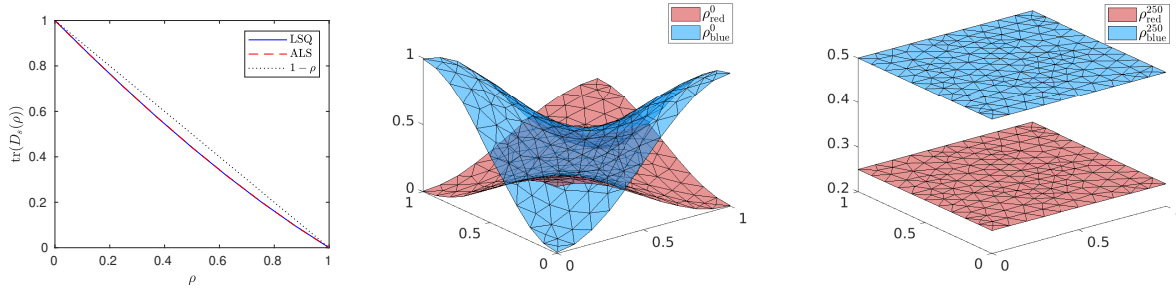


FIGURE 2 – Calcul de la matrice d'auto-diffusion et solution volume finie pour différents instants.

de résolution évaluant la trace de la matrice d'auto-diffusion $\mathbb{D}_s(\rho)$: la méthode “linear least squares” et la méthode “Alternating least squares” où $\rho = \rho_{\text{red}} + \rho_{\text{blue}}$. La courbe représentative de la trace est toujours en dessous de la courbe représentative de la fonction $1 - \rho$ avec un petit écart ce qui est cohérent avec les résultats de la littérature. Nous avons également représenté le profil spatial des fractions volumiques locales ρ_{red} et ρ_{blue} . Les fractions volumiques évoluent au cours du temps jusqu'à atteindre un profil constant. Cette première étude est à l'origine d'un second travail plus exhaustif [7] dans lequel la grille possède plus de points (la construction de la matrice d'auto-diffusion est plus précise) et où une étude théorique sur les propriétés de convergence/stabilité du schéma est menée.

Postdoctorat Septembre 2019-Février 2021 : Étude de la méthode pararéelle pour une simulation Monte Carlo appliquée au transport des neutrons dans les réacteurs nucléaires.

Dans le cadre du transport radiatif en modélisation nucléaire, les simulations Monte Carlo sont couramment utilisées car elles sont intrinsèquement parallèles et ne souffrent pas de la dimension du problème à l'inverse des méthodes déterministes qui sont particulièrement coûteuses. Avec l'augmentation considérable du nombre de processeurs de calcul, il devient pertinent de paralléliser le traitement de la variable temporelle pour réduire le temps de calcul de la simulation Monte Carlo ou bien d'explorer des temps plus longs de simulation. Cela devient particulièrement intéressant pour la prise en compte du phénomène d'apparition des neutrons retardés. La philosophie de ce travail est la suivante : supposons que l'on dispose d'un très grand nombre de processeurs $M \gg 1$. Une résolution Monte Carlo standard utilisera l'intégralité de ces processeurs pour simuler M marches aléatoires avec une précision de l'ordre de $1/\sqrt{M}$. Supposons désormais que l'on dispose de $N \times M$ processeurs de calculs. Dans une procédure Monte Carlo standard, cet excès de processeurs permettra d'affiner la précision de la résolution. Néanmoins, la précision obtenue avec M processeurs était déjà suffisante. Ainsi, dans notre approche pararéelle, on utilise cet excès de processeurs pour paralléliser le traitement de la variable temporelle et ainsi accélérer une simulation Monte Carlo ou bien explorer des temps plus longs de simulation.

L'algorithme pararéel, introduit en 2001 dans la littérature, permet d'accélérer la résolution d'une équation aux dérivées partielles en combinant un propagateur grossier séquentiel peu coûteux noté \mathcal{G} où le pas de temps correspondant est Δt et un propagateur fin assez coûteux mais parallélisable noté \mathcal{F} où le pas de temps correspondant est noté δt . La procédure pararéelle construit une suite $(u_k^n)_{k=1 \dots K}$ approchant la solution u^n aux temps $(t_n)_{1 \leq n \leq N}$. Ici, u est l'inconnue du problème (par exemple la température pour l'équation de la chaleur). Nous disposons

de 3 échelles de temps et la Figure 3 apporte une illustration. La première étape consiste à

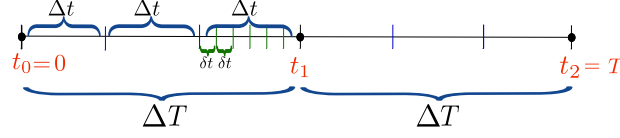


FIGURE 3 – Échelles de temps pour la discrétisation pararéelle. ΔT : largeur de la fenêtre des observables (t_1, t_2) , Δt : pas de temps du solveur grossier \mathcal{G} , δt : pas de temps du solveur fin \mathcal{F} .

construire une solution initiale grossière et peu coûteuse sur chaque sous-domaine temporel à l'aide du propagateur grossier \mathcal{G} :

$$u_{k=0}^{n+1} := \mathcal{G}_{\Delta T}(u_{k=0}^n) \quad \text{où} \quad u_{k=0}^0 := u_0.$$

L'étape suivante est l'étape dite de prédiction-correction où le propagateur grossier \mathcal{G} est combiné au propagateur fin \mathcal{F}

$$u_{k+1}^{n+1} := \underbrace{\mathcal{G}_{\Delta T}(u_{k+1}^n)}_{\text{prédiction}} \times \underbrace{[\mathcal{F}_{\Delta T}(u_k^n)/\mathcal{G}_{\Delta T}(u_k^n)]}_{\text{correction en parallèle}} \quad \text{avec} \quad u_{k+1}^0 := u_0.$$

Le propagateur grossier séquentiel dégrade de manière naturelle la solution (étape prédiction). L'étape de correction consiste à coupler les deux propagateurs afin de corriger l'erreur issue du solveur grossier par des solutions fines calculées en parallèle.

Dans notre travail, nous avons considéré une version hybride de l'algorithme pararéel où le solveur grossier est de type déterministe (éléments finis, volumes finis) et où le solveur fin est de type Monte Carlo.

Première étude : l'équation de la chaleur Dans cette première étude [1], nous avons étudié l'équation de la chaleur s'écrivant sous la forme

$$\begin{aligned} \partial_t u - \mathcal{D}\Delta u &= g & \text{in} & \quad]0, T[\times \Omega, \\ u &= 0 & \text{on} & \quad]0, T[\times \partial\Omega, \\ u(0, \cdot) &= u_0 & \text{in} & \quad \Omega, \end{aligned}$$

avec u la fonction inconnue (température), $\mathcal{D} > 0$ le coefficient de diffusion, g un terme source, u_0 une donnée initiale, et $T > 0$ le temps final de la simulation.

Nous avons conçu un algorithme pararéel hybride où le propagateur grossier utilisé est un solveur élément fini \mathbb{P}_1 et où le propagateur fin est un solveur Monte Carlo où le processus stochastique sous-jacent est un mouvement Brownien.

Dans les essais numériques, nous avons montré que notre approche réduit le temps de calcul d'une simulation Monte Carlo standard tout en garantissant la qualité de la solution.

La partie gauche de la Figure 4 montre que notre solution hybride a besoin de 2 itérations pararéelles pour converger (courbe rouge) au pas de temps $n = 7$. En effet, au bout de 2 itérations pararéelles, la solution hybride vérifie un critère d'arrêt pour la résolution pararéelle, et elle est contenue dans la barre d'erreur Monte Carlo à $\pm 2\sigma$ (σ désignant la variance). La courbe en noir correspond à l'approximation grossière initiale (loin de la solution analytique) et la courbe en violet correspond à la solution obtenue après une itération pararéelle (pas suffisamment proche de la solution analytique et pas contenue dans la barre d'erreur).

Dans la partie centrale de la Figure 4 est représenté le coût des deux simulations numériques en fonction du nombre de répliques. En pratique, au lieu d'étudier le transport de M particules on préfère étudier le déplacement de M' particules et répéter cette expérience p fois de tel sorte que $M = p \times M'$. Cela permet de calculer des grandeurs comme la variance et l'écart type et de paralléliser le solveur Monte Carlo (Un paquet de M' particules et attribué à un processeur ou réplique). Les résultats obtenus montrent que notre stratégie hybride réduit le temps de calcul

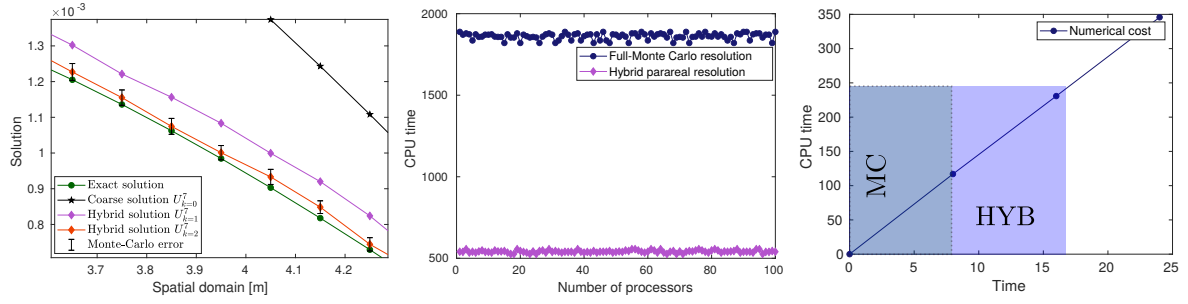


FIGURE 4 – Solution parallèle hybride en fonction des mailles spatiales (gauche), temps de calcul pour la simulation Monte Carlo standard et la simulation parallèle (milieu), exploration de temps de simulation plus longs (droite).

de la simulation pure Monte Carlo d'un facteur ≈ 3.4 ce qui est très encourageant car proche du "scaling" idéal égal à 3.5.

La partie de droite de la Figure 4 illustre une autre caractéristique de notre méthode hybride. Elle montre que l'excès de processeurs disponibles peut servir à simuler des temps plus longs. En effet, on peut observer que la méthode de Monte Carlo standard demande environ 250s pour simuler le mouvement brownien sur l'intervalle $[0, 8]$ alors que la méthode hybride simule le mouvement brownien sur l'intervalle $[0, 17]$ au même prix de 250s.

Deuxième étude : l'équation de Boltzmann Dans une deuxième étude [9], je m'intéresse à l'équation de Boltzmann en neutronique :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}, t) + (\mathcal{A} - \mathcal{S} - \mathcal{H}) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}, t) &= 0 \quad \text{in} \quad \Omega \times \mathbb{S}_2 \times [0, T] \\ \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}, 0) &= \psi^0(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}) \quad \text{in} \quad \Omega \times \mathbb{S}_2 \\ \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}, t) &= 0 \quad \text{on} \quad \partial\Omega \times \mathbb{S}_2 \times [0, T]. \end{aligned}$$

Ici, $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$, $d = \{1, 2, 3\}$, désigne la position des neutrons, $\boldsymbol{\omega} \in \mathbb{S}_2$ (sphère unité) désigne la direction de déplacement des neutrons, et $t > 0$ désigne le temps. L'inconnue ψ désigne le flux angulaire des neutrons. Les opérateurs \mathcal{A} , \mathcal{S} , et \mathcal{H} désignent respectivement des opérateurs d'advection, de scattering (diffusion), et de fission des neutrons.

Nous considérons dans un premier temps l'équation de Boltzmann 1D monocinétique avec scattering isotrope où le propagateur grossier est un solveur dégradé de type diffusion déterministe et où le propagateur fin est un solveur Monte Carlo à sauts exponentiels. Ce modèle de Boltzmann simplifié 1D est aussi connu sous le nom d'équation du télégraphe, où un régime hyperbolique sur un intervalle de temps donné précède un régime parabolique diffusif. L'algorithme parallèle converge en $k = n$ itérations (n étant le pas de temps courant) en régime hyperbolique du fait de la dégradation importante du solveur grossier (voir Figure 5 gauche), tandis qu'en régime diffusif, notre algorithme converge en un faible nombre d'itérations (voir Figure 5 droite).

Les phénomènes d'absorption ont été traités et actuellement nous incluons le phénomène de fission. Ce prélude de travaux permet de répondre à une facette des problématiques posées par le CEA.

Doctorat Novembre 2015-Juin 2019 : Estimations d'erreur a posteriori pour des inégalités variationnelles : application à un écoulement diphasique en milieu poreux.

Dans cette thèse, nous construisons des estimations d'erreur *a posteriori* par flux équilibrés avec critères d'arrêt adaptatifs pour des solveurs de type Newton semi-lisse inexacts appliqués à des inégalités variationnelles. Les inégalités variationnelles sont présentes dans de nombreux domaines tels que : l'économie, la finance, la mécanique des solides et la mécanique des fluides

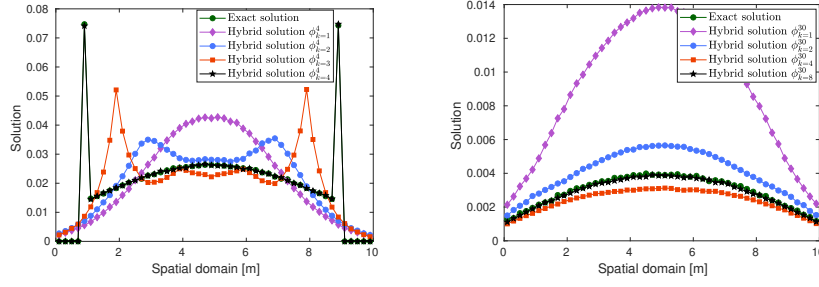


FIGURE 5 – Convergence du schéma pararéel au pas de temps $n = 4$ (gauche) et $n = 30$ (droite).

et sont étudiées depuis des décennies. Le principe des estimations d'erreur *a posteriori* est de construire une borne supérieure de l'erreur entre la solution analytique et la solution approchée qui ne dépend que de la solution approchée. Elles s'écrivent sous la forme :

$$||| \mathbf{u} - \mathbf{u}_h |||_{\sharp} \leq \eta(\mathbf{u}_h)$$

où $|||\cdot|||$ est une norme et $\eta(\mathbf{u}_h)$ une quantité ne dépendant que de la solution approchée \mathbf{u}_h . Dans notre étude, nos estimations d'erreur *a posteriori* garantissent une borne entièrement calculable de l'erreur à chaque pas de Newton semi-lisse et à chaque pas d'algèbre linéaire certifiant par conséquent la solution approchée. Nos estimations distinguent également les composantes de l'erreur de la simulation numérique afin de formuler des critères d'arrêt originaux réduisant le nombre d'itérations de nos solveurs (solveur de Newton semi-lisse et solveur d'algèbre linéaire) tout en préservant la précision de la solution obtenue.

Première étude : problème de contact entre deux membranes Une première étude [3] est dédiée à un problème elliptique de contact entre deux membranes.

$$\begin{aligned} -\mu_1 \Delta u_1 - \lambda &= f_1 \quad \text{dans } \Omega \\ -\mu_2 \Delta u_2 + \lambda &= f_2 \quad \text{dans } \Omega \\ u_1 - u_2 &\geq 0, \quad \lambda \geq 0, \quad (u_1 - u_2)\lambda = 0 \quad \text{dans } \Omega, \\ u_1 &= g_1, \quad u_2 = g_2 \quad \text{sur } \partial\Omega. \end{aligned}$$

Les inconnues de ce système sont le déplacement de la première membrane u_1 , le déplacement de la seconde membrane u_2 , et un multiplicateur de Lagrange λ exprimant l'action de la seconde membrane sur la première. Les termes $\mu_1 > 0$ et $\mu_2 > 0$ représentent les tensions des deux membranes, et $f_1 \in L^2(\Omega)$ et $f_2 \in L^2(\Omega)$ sont des termes sources (représentant des forces agissant sur les membranes). Les deux premières équations de ce modèle sont de type diffusion et modélisent le comportement cinématique de chaque membranes. La troisième ligne de ce système constitue les conditions de complémentarité linéaires exprimant la présence et absence de contact entre les deux membranes. Enfin, la dernière ligne représente les conditions de bords, ici de type Dirichlet.

Dans ce travail, nous proposons tout d'abord une analyse numérique de ce problème en employant comme discrétisation la méthode des éléments finis de degré quelconque. La non-conformité de la solution, lorsque le degré d'approximation polynomial est supérieur à 1 est traitée dans ce travail et nous prouvons un résultat d'existence et unicité de la solution faible discrète. Il s'agit d'une première nouveauté car la majorité des travaux traitant les inégalités variationnelles emploient les éléments finis de degré 1. Une estimation d'erreur *a posteriori* dans la semi-norme d'énergie distinguant les composantes de l'erreur de la simulation numérique est ensuite prouvée dans le contexte semi-lisse inexact. Nous prouvons également l'efficacité locale de nos estimateurs. Nos essais numériques ont utilisé les éléments finis \mathbb{P}_1 et \mathbb{P}_2 conformes, le solveur semi-lisse Newton-min (ici la C-fonction utilisée est la fonction minimum), et le solveur itératif linéaire GMRES. Nous avons comparé les performances de trois stratégies de résolution :

la méthode de Newton-min exacte requérant une précision très fine pour les deux solveurs, la méthode de Newton-min inexacte où la précision du solveur GMRES évolue au cours des itérations de Newton-min, et enfin la stratégie adaptative basée sur la distinction des composantes de l'erreur et des critères d'arrêt adaptatifs.

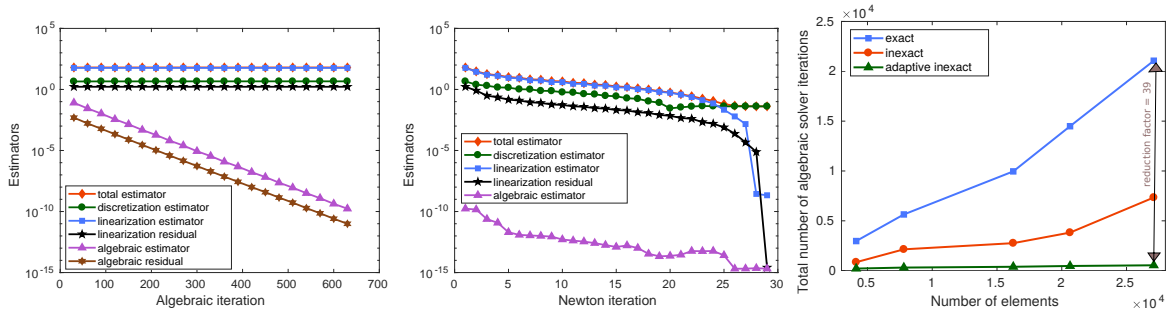


FIGURE 6 – Comportement des différents estimateurs (gauche et milieu), et comparaison des performances des trois stratégies de résolution (droite) pour les éléments finis \mathbb{P}_2 .

Dans la Figure 6, nous comparons les performances des trois stratégies de résolution citées plus haut. Au sein de la figure de gauche, nous avons représenté à une itération de Newton-min fixée, le comportement des différents estimateurs en fonction des itérations de GMRES. On remarque que l'estimateur de linéarisation (courbe bleue) est dominant et que l'estimateur d'algèbre linéaire (courbe marron) est très tôt suffisamment petit pour ne pas influencer le comportement de l'erreur totale (courbe rouge). Ainsi, notre stratégie adaptative ne demande que 30 itérations de GMRES au sein du pas de Newton choisi pour converger alors qu'une résolution exacte en requiert 630. De même, la figure du milieu représentant les estimateurs en fonction des itérations de Newton-min montre que l'estimateur de linéarisation, dominant au départ, n'influence plus le comportement de l'estimateur de discrétisation à partir de la 26^{ème} itération. La figure de droite illustre la performance globale de notre approche. En particulier, pour le maillage le plus raffiné, la stratégie adaptative réduit d'un facteur 39 le nombre total d'itérations de GMRES par rapport à la méthode de résolution de Newton exacte.

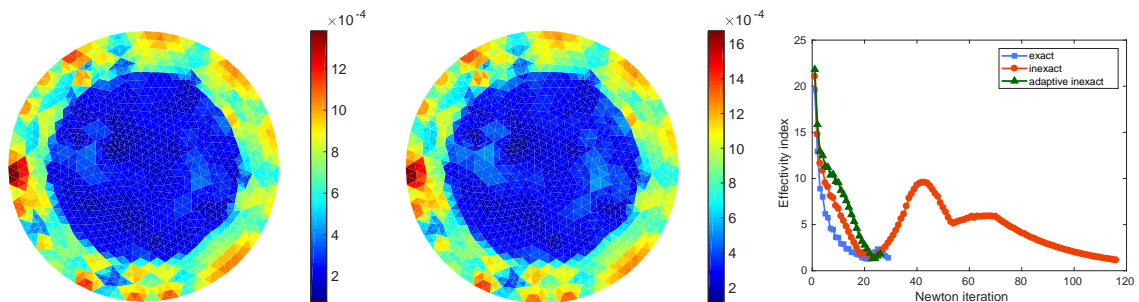


FIGURE 7 – Erreur locale dans la norme d'énergie (gauche) et estimateur local de l'erreur pour la stratégie adaptative inexacte (milieu) et indice d'efficacité (droite) avec les éléments finis \mathbb{P}_2 .

Enfin, dans la Figure 7 (gauche) nous avons représenté la distribution locale de l'erreur (dans chaque triangle K) dans la semi-norme d'énergie $\left\| \mathbf{u} - \mathbf{u}_h^{k,i} \right\|_K$, et dans la Figure 7 (milieu) la version locale de l'estimateur $\eta_K(\mathbf{u}_h^{k,i})$. Finalement, la distribution de l'erreur est bien prédite et nous avons observé numériquement que l'indice d'efficacité $\eta(\mathbf{u}_h^{k,i}) / \left\| \mathbf{u} - \mathbf{u}_h^{k,i} \right\|_\Omega$ (figure droite) tend vers 1 quand le pas de maillage tend vers 0.

Seconde étude : inéquation variationnelle parabolique Le second chapitre de cette thèse [4] est l'extension de l'étude du problème de contact elliptique au cas parabolique évolutif en

temps :

$$\begin{aligned}
\partial_t u_1 - \mu_1 \Delta u_1 - \lambda &= f_1 && \text{dans} && \Omega \times]0, T[, \\
\partial_t u_2 - \mu_2 \Delta u_2 + \lambda &= f_2 && \text{dans} && \Omega \times]0, T[, \\
u_1 - u_2 \geq 0, \quad \lambda \geq 0, \quad (u_1 - u_2)\lambda &= 0 && \text{dans} && \Omega \times]0, T[, \\
u_1 &= g, \quad u_2 = 0 && \text{sur} && \partial\Omega \times]0, T[, \\
u_1(0) &= u_1^0, \quad u_2(0) = u_2^0, \quad u_1^0 - u_2^0 \geq 0 && \text{dans} && \Omega.
\end{aligned}$$

Ici, $T > 0$ représente le temps final de la simulation. Ce problème peut s'interpréter comme une inégalité variationnelle parabolique où la solution $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ est cherchée dans un ensemble convexe dépendant du temps \mathcal{K}_g^t . Nous employons également une discrétisation spatiale de type éléments finis de degré quelconque et pour la discrétisation en temps nous utilisons le schéma d'Euler rétrograde. Nous établissons plusieurs estimations d'erreur *a posteriori* dans la semi-norme d'énergie distinguant les composantes de l'erreur de la simulation numérique dans le contexte semi-lisse inexact. Des investigations sont menées pour obtenir une borne supérieure de l'erreur dans la dérivée temporelle. À l'instar du chapitre précédent, nous examinons dans les essais numériques la performance de notre stratégie adaptative à l'aide de la fonction semi-lisse "minimum" et de la fonction semi-lisse "Fischer-Burmeister" et du solveur itératif GMRES.

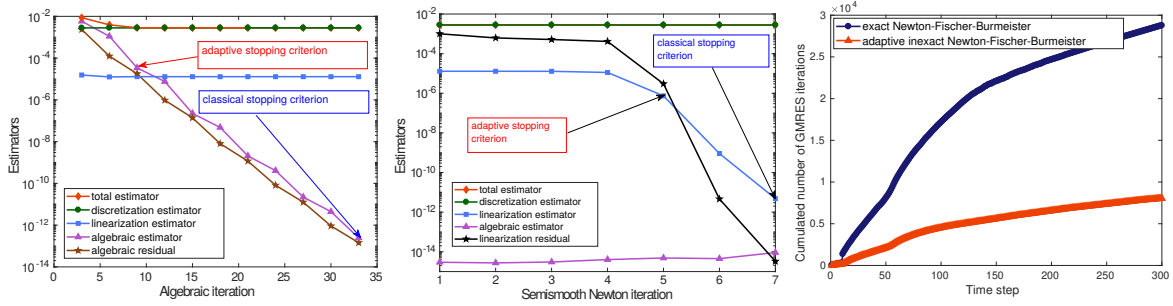


FIGURE 8 – Comportement des différents estimateurs (gauche et milieu) et nombre total d'itérations de GMRES en fonction des pas de temps (droite) pour les éléments finis \mathbb{P}_1 .

Dans la Figure 8 (gauche), nous avons représenté à un pas de temps $n \in \mathbb{N}^*$, le comportement des estimateurs en fonction des itérations d'algèbre linéaire (GMRES) à une itération de Newton fixée (ici la C-fonction considérée est la fonction de Fischer–Burmeister), et le comportement des estimateurs en fonction des itérations de Newton (milieu). Dans la figure de droite nous avons illustré la performance de notre approche adaptative par rapport à une résolution exacte. Tout comme dans la contribution précédente, notre stratégie adaptative est très économique en terme d'itérations non linéaires et linéaires.

Troisième étude : écoulement diphasique compositionnel en milieu poreux Ce travail [5], réalisé en collaboration avec Ibtiel Ben Gharbia (ingénieure de recherche à l'IFPEN) est l'extension des travaux réalisés dans les deux contributions précédentes à un cadre industriel. Nous avons abordé un des aspects de la problématique du stockage des déchets radioactifs dans les couches géologiques profondes. Ce stockage provoque entre autres une éjection de gaz responsable en partie de la dégradation de l'environnement. Pour décrire ce phénomène, nous avons considéré une situation simplifiée décrite par un écoulement diphasique compositionnel liquide-gaz où les deux composants présents sont l'eau et l'hydrogène. L'eau n'est que présente dans la phase liquide et l'hydrogène peut exister sous deux formes : liquide et gaz. Au début de la simulation, le milieu est purement monophasique liquide et l'hydrogène liquide est dissous en très faible quantité. Dans la réalité, ceci correspond à la situation où les déchets sont stockés dans une couche profonde sans qu'il y ait de production de gaz. À partir d'un certain instant $t > 0$, les matériaux de stockage vont se dégrader chimiquement, ce qui va se traduire par un dégagement d'hydrogène gazeux et on entre dans la configuration liquide-gaz.

Le modèle mathématique étudié est un système d'équations aux dérivées partielles non linéaires avec contraintes de complémentarité non linéaires et s'écrit

$$\begin{aligned} \partial_t l_w(S^l) + \nabla \cdot [\gamma_1 \mathbf{q}_l(S^l, P^l) - \mathbf{J}_h^l(S^l, \chi_h^l)] &= Q_w \\ \partial_t l_h(P^l, S^l, \chi_h^l) + \nabla \cdot [\gamma_2 \chi_h^l \mathbf{q}_l(S^l, P^l) + \gamma_3 P^g \mathbf{q}_g(S^l, P^l) + \mathbf{J}_h^l(S^l, \chi_h^l)] &= Q_h \\ 1 - S^l \geq 0, \quad H P^g - \gamma_2 \chi_h^l \geq 0, \quad [1 - S^l] [H P^g - \gamma_2 \chi_h^l] &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Les inconnues de ce système sont la saturation de la phase liquide S^l , la pression de la phase liquide P^l , et la fraction molaire d'hydrogène dans la phase liquide χ_h^l . La première équation de (1) traduit la conservation du composant eau et la seconde exprime la conservation du composant hydrogène. Les termes $l_w(S^l)$ et $l_h(P^l, S^l, \chi_h^l)$ sont des fonctions non linéaires correspondant à l'accumulation des composants. Les termes présents au sein des opérateurs divergence $\nabla \cdot$ correspondent aux flux des composants. Ils sont décrits par des vitesses de Darcy \mathbf{q}_l , \mathbf{q}_g (l'indice g est relatif à la phase gazeuse), et le flux diffusif de Fick \mathbf{J}_h^l . Les constantes γ_1 , γ_2 et γ_3 sont issues de certaines hypothèses simplificatrices, et les termes Q_w et Q_h représentent les débits massiques des composants. La dernière ligne de (1) constitue les contraintes de complémentarité non linéaires et exprime l'apparition et la disparition de l'hydrogène gazeux. Lorsque l'écoulement est monophasique liquide, la seconde contrainte (donnée par la loi thermodynamique de Henry) est active : $H P^g - \gamma_2 \chi_h^l > 0$ et $1 - S^l = 0$. En revanche, si l'hydrogène gazeux se libère, la première contrainte est active $1 - S^l > 0$ et $H P^g - \gamma_2 \chi_h^l = 0$.

Nous avons employé la méthode des volumes finis centrés pour la discrétisation spatiale, et le schéma d'Euler rétrograde pour la discrétisation temporelle. Le schéma discret obtenu à chaque pas de temps de la simulation s'interprète également comme une inégalité variationnelle. Nous avons réécrit les contraintes de complémentarité à l'aide de fonctions semi-lisses générant ainsi à chaque pas de temps de la simulation, un système d'équations non linéaires et non différentiables au sens de Fréchet. Ce dernier est résolu par une famille de méthodes de Newton semi-lisses inexactes.

Nous avons établi des estimations d'erreur *a posteriori* entre la solution exacte et la solution approchée à chaque pas de linéarisation semi-lisse et chaque pas d'algèbre linéaire. La mesure de l'erreur est ici constituée de la norme duale d'un résidu, d'un terme illustrant la non conformité des inconnues et d'un résidu sur les contraintes de complémentarité. A l'instar des chapitres précédents, nous avons utilisé la reconstruction des flux équilibrés dans l'espace $\mathbf{H}(\text{div}, \Omega)$ en utilisant les flux numériques conservatifs aux interfaces issus de la méthode des volumes finis (particulièrement commode pour l'implémentation numérique). Nous avons également reconstruit des flux de Darcy et de Fick dans l'espace $\mathbf{H}(\text{div}, \Omega)$ à partir des inconnues discrètes de pression et de fraction molaire. Notre estimation distingue les différentes composantes d'erreur, à savoir l'erreur de discrétisation (méthode des volumes finis), l'erreur de linéarisation (algorithme de Newton semi-lisse) et l'erreur d'algèbre linéaire (solveur linéaire itératif). Cette distinction des composantes de l'erreur permet de formuler une version adaptative de l'algorithme de Newton semi-lisse.

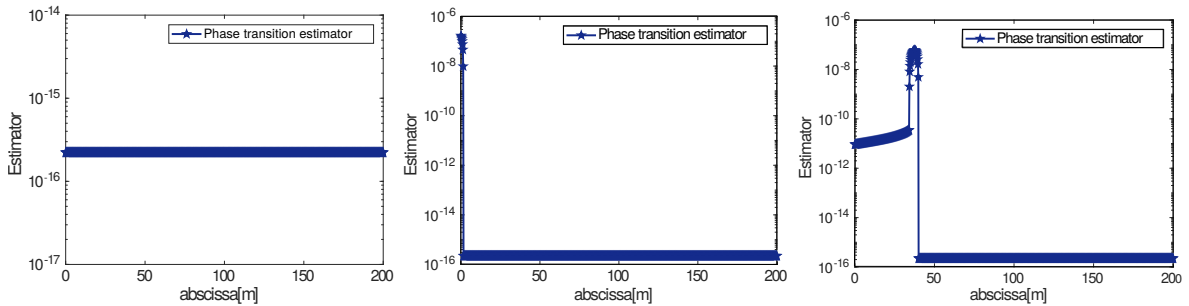


FIGURE 9 – Estimateur de transition de phase en fonction des mailles spatiales pour trois pas de temps différents.

Un premier résultat de ce travail a été fourni dans la Figure 9. Nous avons représenté le comportement de l'estimateur de transition de phase en fonction du domaine spatial. Cet estimateur est nul au départ (figure gauche) car le milieu est monophasique liquide, puis, il s'active lors de l'apparition de la phase gazeuse (figure milieu). Ensuite, le gaz se propage dans le domaine et l'estimateur s'active dans les cellules correspondantes (figure droite). Cet estimateur apporte des résultats intéressants car il permet de localiser les cellules où le gaz apparaît et permet de raffiner le maillage là où l'erreur est plus importante.

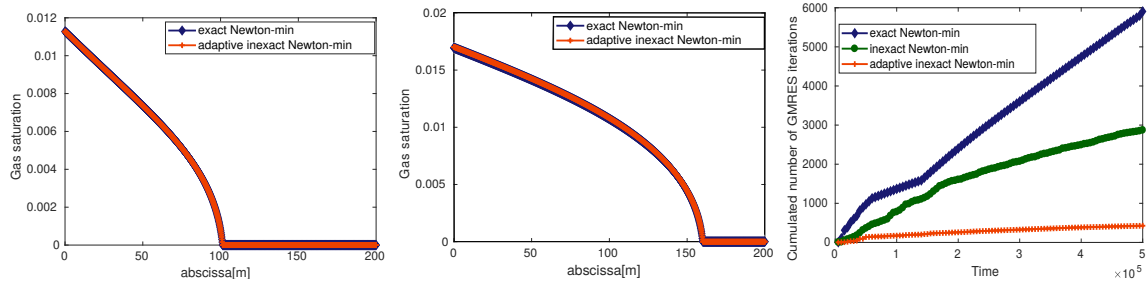


FIGURE 10 – Saturation gazeuse à un instant t (gauche) et saturation gazeuse à un instant t' (milieu) tel que $t < t'$ et nombre total d'itérations de GMRES en fonction des pas de temps (droite).

La Figure 10 est cruciale puisqu'elle atteste que notre méthodologie produit une solution numérique très proche de la solution obtenue par une résolution exacte bien qu'elle ait arrêté prématurément les itérations de Newton-min et de GMRES. Des résultats complémentaires sont disponible dans l'article [4].

Travail de recherche supplémentaire de postdoctorat Septembre 2019- Février 2021 : A unified framework for high-order numerical discretizations of variational inequalities.

Ce travail [2] est réalisé en collaboration avec Guillaume Delay, maître de Conférences au Laboratoire Jacques-Louis Lions de Sorbonne Université. Il s'agit d'une extension du travail [2] où nous proposons un cadre unifié au sein duquel l'inégalité variationnelle modélise divers problèmes en mécanique du contact (problème de l'obstacle, problème de Signorini, problème de contact entre deux membranes, etc...) et où elle est abordée par différentes méthodes numériques d'ordre élevé. Nous établissons dans un premier temps le caractère bien posé de chacune de ces méthodes puis nous comparons leurs performances. Nous traitons en particulier le cas des éléments finis (FEM) et celui de la méthode "Hybrid High-Order" (HHO). Cette dernière, introduite récemment dans la littérature, utilise des inconnues polynomiales sur le squelette du maillage et des inconnues polynomiales dans les cellules pouvant être éliminées par condensation statique. Le terme "High-Order" vient du fait que la méthode HHO permet de faire de l'ordre bas comme de l'ordre élevé sans modification de la méthode. La méthode HHO permet aussi l'utilisation de maillages polyédriques avec des interfaces possiblement non-conformes, à la différence de la méthode des éléments finis.

Le système non linéaire obtenu après chacune de ces discrétisations spatiales est résolu par un algorithme de Newton semi-lisse. Nous apportons dans ce travail un résultat théorique de convergence de l'algorithme de Newton pour la fonction semi-lisse minimum, ce qui constitue une nouveauté supplémentaire par rapport à [2]. Nous comparons numériquement les deux méthodes proposées pour différents degrés polynomiaux et nous montrons que la méthode HHO est moins coûteuse numériquement (voir Figure 11).

Une étude numérique sur les propriétés de convergence de la méthode FEM et de la méthode HHO est détaillée. Nous étudions tout d'abord le cas d'une solution très régulière et nous montrons que ces deux méthodes présentent un taux de convergence optimal pour les polynômes de degré $p = 1, 2, 3$ (voir Figure 12 gauche). Ensuite, nous étudions le cas d'une solution peu rég-

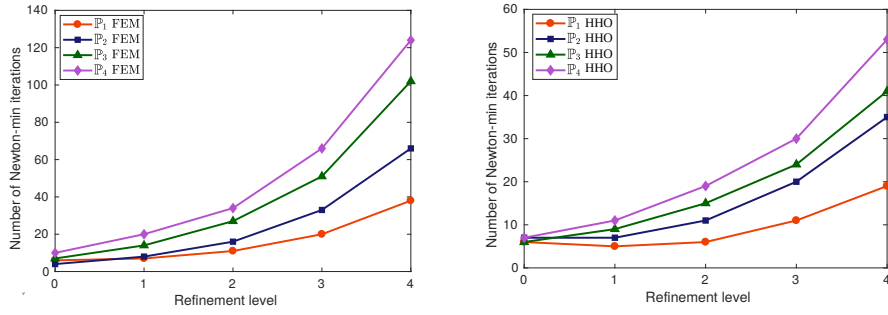


FIGURE 11 – Nombre d’itérations de Newton-min pour la méthode FEM (Gauche), et pour la méthode HHO (droite).

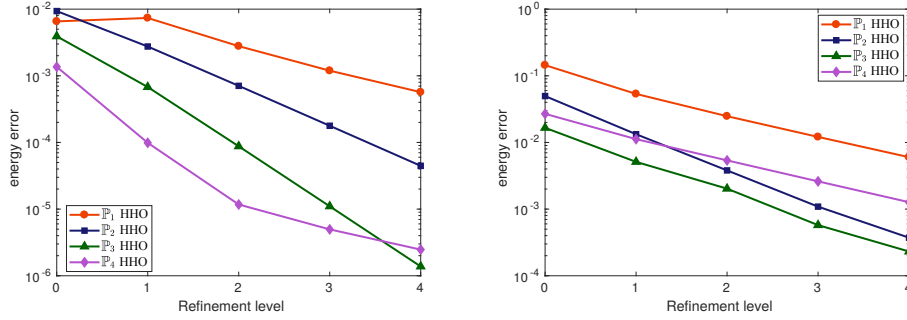


FIGURE 12 – Convergence de la méthode HHO pour une solution très régulière (gauche) et pour une solution peu régulière (droite).

lière (plus réaliste) où nous obtenons une convergence optimale seulement pour les polynômes de degré $p = 1$ et une convergence “quasi-optimale” pour les polynômes de degré $p = 2$ (voir Figure 12 droite). Finalement, les résultats obtenus sont cohérents avec les résultats classiques de la mécanique du contact, à savoir que seules les méthodes d’ordre 1 convergent à taux optimal et que les méthodes d’ordre plus élevé convergent toutes au plus à l’ordre $\frac{3}{2} - \varepsilon$. Ainsi, puisque la solution du problème est dans des espaces de Sobolev de la forme $H^{\frac{5}{2}-\varepsilon}$, l’utilisation d’un ordre supérieur à 2 ne permet pas d’augmenter le taux de convergence de la méthode. L’intérêt principal de ce travail est de permettre d’étudier dans un cadre unifié différents problèmes de contact et de proposer différentes discrétisations associées.