

Jeudi 21 Avril 2022 à 10h30

Anas Bouali

Doctorante de Térènce Bayen, Université d'Avignon, France

Titre : A hybrid maximum principle including regional switching parameters.

Abstract : In this presentation, we consider a Mayer optimal control problem where the controlled system is defined over a partition of the euclidean space, and we assume that the dynamics depends on some additional regional switching parameter. This means that the parameter should remain constant as long as the trajectory belongs to a given stratum, but, in contrast with optimal control problems including (constant) parameters, it is now authorized to change its value each time the system enters into a new stratum. This framework is motivated by several applications arising in the context of aerospace engineering or in epidemiology (typically when a loss of control occurs). Our objective is to derive the necessary optimality conditions in this new framework in the spirit of a hybrid maximum principle. We shall see in this presentation how to obtain such conditions thanks to regional needle variations and to a careful sensitivity analysis in this hybrid setting.

Jeudi 24 Mars 2022 à 10h30

David Danan

Ingénieur Chercheur, Institut de Recherche Technologique SystemX, Gif-sur-Yvette, France

Titre : Optimisation topologique basée sur une approche « body-fitted » en mécanique du solide

Résumé: L'optimisation topologique vise à générer une pièce mécanique aussi performante que possible et conforme au cahier des charges fixé par l'utilisateur, en calculant directement la répartition de la matière au sein d'un volume donné. Dans le cadre du projet TOP (Topology Optimization Platform), l'objectif consistait à développer des outils de conception numériques performants et robustes reposant sur la méthode dite des lignes de niveau. Cette alternative offre une modélisation physique plus rigoureuse et permet une définition univoque de la pièce optimale, chose a priori moins évidente dans les méthodes classiques utilisées dans les domaines académiques et industriels. Il s'agissait de montrer la viabilité d'une telle méthode sur des critères de nature mécanique présentant un intérêt industriel et également d'en éprouver la fiabilité sur des cas d'études proposés par les partenaires industriels. La présentation s'attachera à une description du formalisme employé, propre à l'optimisation topologique et à la mécanique sous-jacente aux critères étudiés, de la plateforme (open-source) développée au cours du projet, et aux différents résultats obtenus.

Vendredi 25 Février 2022 à 10h00

Hassan Denawi

Post-Doc, CEMES, CNRS, Université de Toulouse, Toulouse, France

Titre : Etude des propriétés structurales, électroniques, magnétiques et optiques des matériaux, et nanostructures avec et sans substrats métalliques

Résumé: En nanotechnologie, une des étapes clés réside dans mon aptitude à étudier des nano-objets à basse dimensionnalité, tels que des nano-chaînes unidimensionnelles (1D), des couches atomiques bidimensionnelles (2D) ou des nano-systèmes tridimensionnels (3D). Les zwitterions forment des arrangements moléculaires dont on pense que les structures sont déterminées par leur fort dipôle et par les interactions intermoléculaires de liaison H impliquant les groupes O et N-H de molécules adjacentes. Les polymères avec les métaux de transition (TM) sont construits par des liaisons entre l'ion TM et deux N voisins, ainsi que deux ligands O. La manipulation géométrique provoque des nouvelles propriétés électroniques de ces polymères unidimensionnels pour des applications pratiques est un sujet important et stimulant en électronique et en spintronique. De plus, les polymères de coordination peuvent être utilisés dans le développement de matériaux magnétiques, optiques non conducteurs et conducteurs de différentes dimensions.

De plus, plusieurs calculs de premier principe ont été effectués pour étudier les monocouches métallo-organiques sans et avec substrats métalliques^[1-5], la zircone (Hafnia) stabilisée à l'oxyde d'yttrium (YSZ et YSH)^[6,7], et les matériaux RbCeX₂ (X = S, Se, Te)^[8], et les interactions entre une pointe STM et des molécules (prochaine Nanocar Race) sur Au(111) sous champs électriques externes, ces calculs reposent sur la théorie de la fonctionnelle de la densité polarisée en spin (DFT) avec l'approximation en gradient généralisée (SGGA).

Références :

- [1] M. Mabrouk, R. Hayn, H. Denawi, R. Ben Chaabane, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 2018, 453, 48.
- [2] H. Denawi, M. Abel, O. Siri, R. Hayn, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 2021, 537, 168183.
- [3] H. Denawi, M. Abel, R. Hayn, Journal of Physical Chemistry C 2019, 123, 4582.
- [4] H. Denawi, E. Nardi, M. Koudia, O. Siri, M. Abel, R. Hayn, Journal of Physical Chemistry C 2020, 124, 1346.
- [5] H. Denawi, M. Koudia, R. Hayn, O. Siri, M. Abel, Journal of Physical Chemistry C 2018, 122, 15033.
- [6] H. Denawi, P. Karamanis, M. Rérat, Journal of Materials Science 2021, 56, 8014.
- [7] H. Denawi, J. K. Demarais, C. S. Praveen, M. Rerat, P. Karamanis, Chemical Physics Letters 2021, 785, 139157.
- [8] L. Azzouz, M. Halit, H. Denawi, Z. Charifi, H. Baaziz, M. Rérat, C. F. Matta, Journal of Alloys and Compounds 2022, 898, 162760.

Jeudi 17 Février 2022 à 14h00

Fabio Manca

Laboratoire Adhésion et Inflammation, CNRS UPR 7333/ INSERM U1067

Titre : Two-state theory of molecular folding

Abstract: Stretching experiments on single-molecules opened the way for studying the statistical mechanics of small systems. I propose here a theoretical framework able to describe the equilibrium and the out-of-equilibrium statistical mechanics of bistable molecules. Two important biological applications will be discussed: the dynamics of the folding/unfolding of a titin I91 domain [1,2] and the folding of a team of SNARE proteins for neurotransmission [3]. The theoretical predictions, both analytical and numerical, gives important insights on the underlying physics of the system, and allows the calibration of the model from the experimental data.

Jeudi 3 Février 2022 à 10h30

Francesca Pietracaprina (*en distanciel*)

Postdoc, Trinity College Dublin

Titre : Désordre et localisation dans les systèmes quantiques

Résumé: La dynamique des systèmes quantiques désordonnés est un problème complexe de la physique statistique et présente une phénoménologie intéressante. L'un des phénomènes les plus surprenants est l'absence de transport et thermalisation appelé localisation d'Anderson. Ce phénomène existe aussi dans des systèmes en interaction à plusieurs corps, dont il est l'une des seules manières d'empêcher la thermalisation et l'ergodicité du système. L'étude de ces systèmes est fréquemment réalisée avec des techniques numériques à grande échelle, notamment la diagonalisation exacte. Je présenterais la phénoménologie de la localisation et je donnerai des résultats qu'on a obtenus sur des systèmes en deux dimensions.

Jeudi 27 Janvier 2022 à 10h30

Alexandre Vieira

Post-Doc, Université de la Réunion

Titre : Contrôle optimal : analyse et parallélisation, application à l'optimisation topologique

Résumé: Le contrôle optimal de système dynamique est un domaine maintenant mûr mais qui présente encore de nombreux défis. Dans cette présentation, je me concentrerai sur deux points qui concentrent un grand nombre de travaux de recherche : le contrôle optimal de systèmes non lisses, ainsi que la parallélisation des calculs numériques. Deux exemples serviront à illustrer les propos. Premièrement, on s'attardera sur les systèmes de complémentarité, un système d'EDO dont des contraintes s'expriment de manière non lisse. On verra tout d'abord des résultats obtenus dans la littérature, mais également les contraintes théoriques restantes pour la parallélisation de la résolution des conditions du premier ordre. Dans un second temps, on s'intéressera à un problème d'optimisation topologique, un problème de contrôle optimal d'EDP apparaissant en mécanique des fluides. Ces problèmes de grandes tailles nécessitent des calculs lourds, rendant critique le besoin de les paralléliser. Les approches possibles seront présentées, ainsi que leurs limites.

Jeudi 20 Janvier 2022 à 10h30

Jad Dabaghi

Post-Doc, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées

Titre : High-order numerical discretizations and a posteriori error estimates for variational inequalities

Résumé: We propose an adaptive inexact version of a class of semismooth Newton methods for variational inequalities. As a model problem, we study the system of variational inequalities describing the contact between two membranes. We study a family of Galerkin numerical schemes that discretize this problem. We consider any iterative semismooth linearization algorithm like the Newton-min or the Newton-Fischer-Burmeister which we complement by any iterative linear algebraic solver. In the case of finite elements, we then derive an a posteriori estimate on the error between the exact solution at the continuous level and the approximate solution which is valid at any step of the linearization and algebraic resolutions. Our estimate is based on flux reconstructions in discrete subspaces of $H(\text{div}, \Omega)$ and on potential reconstructions in discrete subspaces of $H^1(\Omega)$ satisfying the constraints. It distinguishes the discretization, linearization, and algebraic components of the error. Consequently, we can formulate adaptive stopping criteria for both solvers, giving rise to an adaptive version of the considered inexact semismooth Newton algorithm. Under these criteria, the efficiency of the leading estimates is also established, meaning that we prove them equivalent with the error up to a generic constant. Numerical experiments for the Newton-min algorithm in combination with the GMRES algebraic solver confirm the efficiency of the developed adaptive method. An extension to unsteady problems is also discussed in the present work.

Jeudi 9 Décembre 2021 à 10h30

Francesco Bonaldi

Université de Montpellier

Titre : Ecoulements diphasiques en milieux poreux déformables avec contact frottant aux interfaces matrice-fractures

Résumé: On considère un écoulement diphasique de type Darcy dans un milieu poreux fracturé couplé avec la déformation poromécanique de la roche, en incluant un modèle de contact avec frottement de type Coulomb aux interfaces matrice-fractures. Les fractures y sont représentées comme des interfaces de co-dimension 1 immergées dans le milieu matriciel environnant. Pour l'analyse numérique du modèle, on a recours au cadre général des schémas gradients, permettant une analyse de stabilité générique et comprenant plusieurs discrétisations conformes et nonconformes. Nous établissons des estimations d'énergie pour le problème discret et en montrons l'existence d'une solution. Pour simuler le modèle couplé, on utilise un schéma volumes finis de type « deux points » (TPFA, Two-Point Flux Approximation) pour l'écoulement et des éléments finis d'ordre deux (\mathbb{P}_2) pour le déplacement mécanique couplés avec des multiplicateurs de Lagrange constants (\mathbb{P}_0) par face-fracture, représentant les contraintes normale et tangentielle, pour discrétiser les conditions de contact. Ce choix permet de contourner d'éventuelles singularités aux extrémités, coins ou intersections entre fractures, et donne une expression locale des conditions de contact. Nous présentons d'abord des simulations numériques afin de valider le modèle mécanique avec contact. Ensuite, le modèle complet comprenant le couplage avec un écoulement diphasique sera appliqué à la simulation de la dessiccation de l'argilite endommagée à l'interface avec les galeries de ventilation dans les sites de stockage de l'Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs (Andra). Ce travail est le fruit d'une collaboration avec Jérôme Droniou (Université Monash, Melbourne), Roland Masson (Université Côte d'Azur) et Antoine Pasteau (Andra).

Jeudi 18 Novembre 2021 à 11h15

Elena Dimitriadis Bermejo

LAMPS, Université de Perpignan Via Domitia

Titre : Une balade dans les catégories

Résumé: Avez-vous jamais entendu parler de la théorie des catégories? Vous êtes-vous jamais demandé ce que c'est et à quoi ça sert ? C'est l'occasion de le découvrir ! Dans cet exposé, on essaiera de faire un petit tour dans l'apparition de cette branche des mathématiques, en donnant quelques définitions de base, des exemples, et, le temps permettant, on finira en énonçant une définition purement catégorique des espaces de Hilbert.
Aucun prérequis de géométrie algébrique ou de topologie algébrique n'est nécessaire pour suivre cet exposé.

Jeudi 21 octobre 2021 à 11h15

Lamine Sokhna

LAMPS, Université de Perpignan Via Domitia

Titre : Chute libre d'un corps axisymétrique dans un fluide parfait

Résumé: Dans cet exposé, nous considérons la chute d'un solide axisymétrique dans un fluide parfait au-dessus d'un plan. Il est connu des travaux de Munnier-Ramdan que l'éventualité d'un contact entre le solide et le plan est reliée à l'asymptotique de l'effet de masse ajoutée quand la distance entre le plan et le solide tend vers 0. Nous proposons une nouvelle méthode pour calculer cet effet de masse ajoutée, qui fournit simultanément l'asymptotique d'un champ de vitesses associé entre le solide et le plan.

Jeudi 7 octobre 2021 à 11h15

Assalé Adjé

LAMPS, Université de Perpignan Via Domitia

Titre : Vérification de systèmes dynamiques perturbés

Résumé: Dans cette présentation, nous nous intéresserons à des systèmes dynamiques en temps discret avec entrées. Ces systèmes apparaissent naturellement en théorie du contrôle/commande. Les valeurs des entrées qui influencent très fortement le comportement sont souvent bruitées à cause des erreurs de mesure, de lecture ou de conversion des capteurs. Retrouver la loi du bruit demeure complexe. Dans cette présentation, nous utiliserons une information partielle sur cette loi pour vérifier des propriétés de non-robustesse sur le système.