

# Université d'Orléans

## Laboratoire MAPMO

Mémoire de synthèse en vue d'obtenir une

Habilitation à Diriger des Recherches

Spécialité : Mathématiques

### Modèles cinétiques.

### Applications en volcanologie et neurosciences.

SIMONA MANCINI

Soutenu le 8 Novembre 2012 devant le jury composé de

- |                |                                    |
|----------------|------------------------------------|
| P. Degond      | - CNRS Université Toulouse III     |
| T. Goudon      | - INRIA Sophia-Antipolis           |
| J. Le Rousseau | - Université d'Orléans             |
| L. Mieussens   | - Université de Bordeaux I         |
| B. Perthame    | - Université Pierre et Marie Curie |
| G. Toscani     | - Università di Pavia              |

après rapports de

- |                  |                                    |
|------------------|------------------------------------|
| Maria Esteban    | - CNRS Université Paris Dauphine   |
| Benoît Perthame  | - Université Pierre et Marie Curie |
| Giuseppe Toscani | - Università di Pavia              |

# Ringraziamenti

À Pablo et Julio,  
mes deux particules préférées

Je tiens premièrement et tout particulièrement à remercier N. Berglund, A. Burgisser, J-A. Carrillo, S. Cordier et F. James avec qui j'ai eu le plaisir et la chance de collaborer ces dernières années, les multiples discussions que nous avons eu ont été très fructueuses.

Je remercie en particulier A. Burgisser pour m'avoir proposé de participer à son projet ERC, et m'avoir accueillie en délégation au CNRS. Les mois passés à ses cotés ont été une source agréable et continue d'élucubrations, scientifiques et non, ainsi qu'une réelle poussée à l'avancé de mes travaux. Ce fut un plaisir et un défi de travailler avec lui, et j'espère que ça continuera.

M. Esteban, B. Perthame et G. Toscani ont accepté de référer mon manuscrit et je les en remercie sincèrement. P. Degond, T. Goudon, J. Le Rousseau, L. Mieussens, B. Perthame et G. Toscani m'ont fait le plaisir de faire part du jury et je leur en suis grée, surtout dans cette période chargée en soutenances.

Je voudrais aussi saluer l'efficacité de M-F. Grespier, A. Liger, M-L. Poncet dans l'organisation et la vie quotidienne du MAPMO et des ses conférences, ainsi que l'aide de C. Laguerre et R. Theron du côté plus informatique. Une pensée va aussi à tous mes collègues du MAPMO qui ont su chacun à sa façon m'inciter à soutenir une HDR. Je n'oublie pas mes deux premiers doctorants, L. Forestier-Coste et D. Landon, grâce à eux j'ai pu avancer dans mes travaux ainsi que dans la pratique du "encadrement de thèse".

Je remercie très chaleureusement D. Nourrit-Lucas, qui est devenue ces dernières années pas seulement une collègue, mais aussi une vraie amie. Un gros merci à F. James pour avoir partagé avec moi son bureau, un thésard, des cours, . . . , à L. Desvillettes pour l'avoir remplacé en tant que co-bureau et pour les divers échanges que nous avons eu, et à N. Berglund pour m'avoir initiée aux équations lentes-rapides, à l'organisation de colloques et séminaires, à l'encadrement doctoral . . .

Une pensée va aussi à C. Baranger, F. Bouchut, L. Boudin, C. Buet, C. Dobrzynski, S. Del Pino, C. Grandmont, P. Havé, P. Hoch, P-E. Jabin, F. Lagoutière, B. Lucquin, Y. Maday, A. Prignet, M. Thiriet avec qui j'ai collaboré et/ou partagé les années de post-doc au LJLL. C'était une expérience enrichissante et joyeuse.

Un affectueux remerciement va à mes parents, sans qui je ne serais pas là aujourd’hui, les rendre fiers est un des stimuli qui m’a permis d’arriver à cette HDR. Un «cordiale» remerciement va à ma belle-famille, en particulier à Simone pour la relecture du manuscrit et le baby-sitting !

Je termine par celui qui probablement a le plus ressenti de cette période de préparation à l’HDR et à qui je suis particulièrement reconnaissante : l’ex-directeur du MAPMO, directeur de l’ITP, collègue du bureau d’à coté, ainsi que papa de Pablo et Julio et mon mari. Il a du subir mes sauts d’humeur, mes angoisses, mes petits/grands succès/échecs. Il a toujours était très occupé par ses mails et par ses enfants, il n’a jamais arrêté d’avoir une idée par seconde, mais il a toujours été un point de repère et présent en cas de besoin. Grazie Stéphane.

Orléans, le 15 Octobre 2012

# Index

<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 Schémas numériques pour le cinétique</b>	<b>11</b>
1.1 Schémas “asymptotiquement préservant” . . . . .	13
1.2 Limite des collisions rasantes . . . . .	14
1.3 Focalisation . . . . .	16
<b>2 Équations macroscopiques</b>	<b>18</b>
2.1 Équation de transport à coefficients discontinus . . . . .	19
2.2 Modélisation de la respiration humaine . . . . .	21
<b>3 Modélisation en volcanologie</b>	<b>25</b>
3.1 Problème physique . . . . .	28
3.2 Modèle mono-disperse . . . . .	29
3.3 Modèle poly-disperse . . . . .	36
3.4 Discretisation . . . . .	40
3.4.1 Schéma numérique pour le transport . . . . .	40
3.4.2 Schéma numérique pour la coalescence . . . . .	42
3.5 Application à la volcanologie . . . . .	47
3.6 Perspectives . . . . .	49
<b>4 Neurosciences computationnelles</b>	<b>51</b>
4.1 Le modèle de Wilson-Cowan stochastique . . . . .	55
4.2 Le modèle de Fokker-Planck . . . . .	57
4.3 La réduction 1D . . . . .	62
4.4 Conclusions et perspectives . . . . .	69
<b>Mes Publications</b>	<b>71</b>
<b>Références</b>	<b>72</b>

# Introduction

Dans ces dernières décennies l'application de mathématiques aux autres disciplines s'est généralisée ; il ne s'agit plus seulement d'étudier des problèmes provenant de la physique ou de la chimie, mais aussi de la biologie, de la médecine, de l'économie, .... jusqu'aux sciences sociales. La modélisation d'un phénomène peut être vue à plusieurs échelles ; mes intérêts de recherche concernent principalement l'écriture de modèles faisant intervenir une ou plusieurs "particules" (ions, bulles, potentiels d'actions, ...) soumises à des forces externes (champ électromagnétique, décompression, potentiels, ...) ou/et à des interactions (collisions, coalescence, ...), ainsi que leur étude analytique et numérique. Je me suis intéressée, par exemple, à la physique des plasma (moteurs ioniques) dans ma thèse, aux aérosols médicaux (poumon humain) dans des post-doctorats, et depuis mon arrivée à Orléans aux biomathématiques (neurosciences computationnelles) et aux géosciences (croissance de bulles dans les volcans), qui composent l'essentiel de ce manuscrit.

L'évolution des particules peut être décrite et étudiée par différents points de vue et méthodes :

- les modèles lagrangiens ou microscopiques décrivent la dynamique de chaque particule via des systèmes d'équations différentielles, éventuellement stochastiques, décrivant l'évolution temporelle des caractéristiques physiques des particules (position, vitesse, rayon, ...) ;
- les modèles statistiques ou mésoscopiques décrivent l'évolution de la distribution d'un ensemble de particules, via des équations aux dérivées partielles intégro-différentiables (modèles cinétiques dont les taux de collisions ou de croissance sont dictés par les modèles microscopiques précédents), nous perdons ainsi l'information sur chaque particule, mais nous récupérons des informations sur la distribution de l'ensemble des particules ainsi que sur certaines quantités macroscopiques ;
- les modèles macroscopiques ne voient plus ni la particule ni l'ensemble de particules, mais décrivent la variation des quantités macroscopiques ou moyennes (masse, quantité de mouvement, énergie, ...) ; ces équations sont soit des lois de la physique (par exemple la loi des gaz parfaits) soit des équations (le système d'Euler, Navier-Stokes, ...) dérivées des modèles cinétiques via les moments de la fonction distribution.

Mes travaux concernent principalement les équations cinétiques de type Vlasov, Boltzmann-Lorentz, Smoluchowski, Fokker-Planck, qui sont décrites dans la suite. Ces équations étant liées aux modèles microscopiques, je décrirai d'abord ces derniers.

L'évolution des caractéristiques physiques d'une particule (par exemple la vitesse  $v(t)$ ) est décrite au niveau microscopique par des systèmes d'équations différentielles, éventuellement stochastiques, du type :

$$\dot{v} = F(t, v) + \xi, \quad (1)$$

où  $F(t, v)$  représente le terme de force agissant sur la particule et  $\xi$  est un bruit blanc d'écart type  $\sigma$ . En absence du bruit, ces systèmes (appelés dynamiques) peuvent être étudiés sous différents points de vue, par exemple : en déterminant les états d'équilibre stables ou instables (via l'analyse des valeurs propres ou leur résolution au niveau déterministe ou encore via l'étude du diagramme de bifurcation) ; en décrivant les trajectoires suivies par la solution ; .... En présence du bruit, un des problèmes liés à l'étude des systèmes stochastiques (1), et qui est intéressant pour les applications, est la détermination du temps de sortie d'une particule d'un puits de potentiel, voir par exemple [14], [56].

Les modèles microscopiques ne sont plus applicables quand nous considérons une population de particules avec un grand nombre d'individus. En effet, il est irréaliste de penser d'étudier/simuler l'évolution de chaque individu, ou de décrire de phénomènes comme la coalescence, à l'aide de modèles microscopiques. Il est alors intéressant de considérer des modèles statistiques, qui décrivent l'évolution de l'ensemble des particules. Comme on le verra, les équations microscopiques sont à la base des équations cinétiques. Je détaille maintenant, l'ensemble des équations cinétiques que j'ai considéré pendant mes recherches.

Étant donné un ensemble de particules soumises à un champ de vitesse  $v = v(t, x)$ , à un champ de forces  $F = F(t, x)$  et à des interactions élastiques ou pas, entre elles ou avec d'autres particules, l'équation cinétique décrivant l'évolution de l'ensemble de particules lit :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + F \cdot \nabla_v f = Q(f, f). \quad (2)$$

Dans (2), l'inconnue est la fonction de distribution  $f = f(t, x, v)$  dépendant du temps  $t$ , et des caractéristiques physiques des particules qui représentent comment les particules sont distribuées dans l'espace des phase. Ici, par exemple, je considère la position  $x$  et la vitesse  $v$  d'une particule, et la fonction distribution  $f(t, x, v)$  représente la probabilité de trouver au temps  $t$  une particule en  $x$  avec vitesse  $v$ . Si nous connaissons l'évolution en temps de  $x$  et  $v$ , par exemple grâce à une modélisation au niveau microscopique :

$$\dot{x} = v(t) \quad , \quad \dot{v} = F(t, x),$$

en considérant la théorie des caractéristiques nous obtenons le terme de droite dans (2). Dans la suite, selon la modélisation considérée, la position  $x$  et la vitesse  $v$  des

particules seront négligées, le problème étant alors homogène en espace et vitesse, le terme de dérivé en  $x$  n'apparaîtra pas, et l'évolution des particules sera décrite par celle de leurs masses  $m$  et volumes  $v$  (bulles dans le magma), ou par celle de leurs potentiels d'action  $\nu_1$  et  $\nu_2$  (neurones). Le champ de vecteur  $F = F(t, x, v)$  représente les taux de croissance de la variable  $v$ . Quand  $F = 0$ , la partie à gauche de (2) est dite équation de transport, sinon on l'appelle équation de Vlasov.

L'opérateur  $Q(f, f)$ , terme de source dans (2), a été introduit par Boltzmann (en 1872) et porte son nom, voir aussi [109] pour une étude complète des différents opérateurs de collision. Il modélise les collisions entre les particules et il est un opérateur intégrale non-linéaire:

$$Q(f, f) = \int B(|v - v'|, \theta) (f(v)f(v') - f(v_*)f(v'_*)) \, dv \, d\omega, \quad (3)$$

où le terme  $B(|v - v'|, \theta)$  est le noyau de collision et représente la portion de particules qui sont dispersées par les collisions depuis les vitesses  $v$  et  $v'$  aux vitesses  $v_*$  et  $v'_*$ . Suite à la complexité de l'opérateur de Boltzmann, d'autres opérateurs ont été déduits sous des hypothèses simplificatrices. Quand les collisions des particules se font contre des particules plus lourdes, l'opérateur de Boltzmann réduit à un opérateur linéaire (voir [42]), appelé opérateur de Boltzmann-Lorentz :

$$Q_B(f) = \int_{S^2} B(x, |\omega - \omega'|, t) (f(x, \omega', t) - f(x, \omega, t)) \, d\omega'. \quad (4)$$

Dans (4) nous avons de plus supposé le module de la vitesse des particules constante ; il en suit que la vitesse  $v$  est déterminée que par sa direction  $\omega \in S^2$ . Cette hypothèse a un sens physique quand nous voulons modéliser des photons, ou un ensemble d'individus qui se déplacent tous à la même vitesse comme dans la modélisation des mouvement de foules ou d'animaux. Le terme  $B(x, |\omega - \omega'|, t)$  est le noyau de collision et représente le taux de collisions des particules. La première partie de l'intégrale (4) décrit l'ensemble de particules qu'après une collision auront une vitesse  $v$ , il est usuellement nommé terme de gain, et correspond à la partie positive de  $Q_B$ . La deuxième partie compte les particules qu'après une collision n'auront plus une vitesse  $v$ , il est appelé terme de perte, et correspond à la partie négative de  $Q_B$ .

Lorsque les collisions sont assez nombreuses et ont un effet nettement diffusif sur l'ensemble de particules, comme pour l'asymptotique des collisions rasantes, ou d'un noyau de collision du type coulombien ( $1/r^2$ ), l'opérateur de Boltzmann-Lorentz est approché par l'opérateur de Laplace-Beltrami :

$$Q_{LB}(f) = \Delta_\omega f. \quad (5)$$

Dans le cadre de la modélisation en volcanologie, je me suis intéressée aussi à la coalescence de particules : quand deux particules qui interagissent en forment

une seule. L'opérateur de Boltzmann est alors remplacé par un opérateur de type Smoluchowski :

$$Q_S(f, f) = \frac{1}{2} \int_0^m H(m', m - m', t) f(t, m') f(t, m - m') dm' \\ - \int_0^\infty H(m, m', t) f(t, m') f(t, m) dx', \quad (6)$$

où  $f(t, m)$  représente la probabilité de trouver au temps  $t$  une particule de taille  $m$  (usuellement  $m$  est le volume ou la masse), et  $H(m, m')$  est le taux de coalescence. Dans (6), le premier terme compte les particules formées par l'association d'une particule de taille  $x'$  et une de taille  $x - x'$  et le deuxième compte les particules de taille  $x'$  perdues par coalescence avec une autre particule.

Quand le système d'équations microscopiques est stochastique, voir (1), considérant le générateur du semi-groupe associé au système d'équation, nous obtenons au niveau mésoscopique l'équation de Kolmogorov (directe), dite aussi équation de Fokker-Planck:

$$\partial_t f(t, v) + \nabla_v \cdot (F(t, v) f(t, v)) = \frac{\sigma^2}{2} \Delta_v f(t, v). \quad (7)$$

Nous remarquons que dans le cas homogène en espace la partie gauche (de transport) de l'équation (2) c'est le même de la partie gauche de (7) (conservation), et ceci est vrai pour toute force conservative telle que  $\nabla \cdot F = 0$ .

L'équation (7) est un modèle cinétique décrivant l'évolution de la fonction distribution  $f(t, v)$ . On voit facilement que, si le terme de dérive  $F(t, v)$  est le gradient d'un potentiel  $V(t, v)$ , *i.e.* s'il existe une fonction  $V(t, v)$  telle que  $F(t, v) = \nabla_v V(t, v)$ , l'équation (7) admet une solution stationnaire (ou état d'équilibre) donnée par :

$$f(v) = C \exp \left( \frac{-2V(t, v)}{\sigma^2} \right),$$

où  $C$  est une constante de normalisation.

Quand une telle fonction  $V$  n'existe pas, ou en d'autres termes quand  $F(t, v)$  n'est pas le gradient d'un potentiel  $V(t, v)$ , cette caractérisation n'est plus valable. Néanmoins il est possible de déterminer l'existence de solution et leur convergence vers un état d'équilibre sous l'hypothèse que le flux  $F(t, v)$  soit entrant dans le domaine d'étude.

Les travaux de recherche concernant l'existence, unicité et positivité des solutions pour l'équation (2), leur convergence vers un équilibre, ... sont très nombreux, en partant de [10], [65] en passant par [44], jusqu'à par exemple [86], [71]. En particulier, la prise en compte d'un domaine borné en espace, et donc des conditions aux bords, peut conduire à des difficultés ultérieures. Lors de mes premiers travaux de recherche,

en collaboration avec S. Totaro (Sienne, Italie), j'ai étudié le caractère bien posé du modèle cinétique (2) écrit sous la forme d'un problème de Cauchy :

$$\begin{cases} \partial_t f = A(f) + Q(f) & \text{dans } \Omega \\ f_{in} = \Lambda f_{out} & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases} \quad (8)$$

où  $A$  dénote l'opérateur de transport,  $Q$  l'opérateur de Boltzmann-Lorentz défini par (4), par  $f_{in}$  (resp.  $f_{out}$ ) est la trace de la fonction distribution  $f$  sur les bords "entrants" (resp. "sortants") le domaine  $\Omega$  et  $\Lambda$  est un opérateur borné linéaire et positif décrivant le lien entre la distribution de particules entrantes et sortantes. Selon la norme  $L^1$  de cet opérateur, on appelle les conditions au bord de type : dissipatif (norme plus petite que 1), conservatif (norme égal à 1) ou multiplicatif (norme plus grande que 1). L'existence et unicité de la solution pour des conditions au bord de type dissipatif et conservatif avait déjà été établi par plusieurs auteurs (voir par exemple [10] pour une approche par le biais de la théorie des semi-groupes d'opérateurs et [65] pour une approche avec la méthode des caractéristiques). Je me suis intéressée aux conditions aux bords de type multiplicatif. Dans [M2], j'ai prouvé l'existence et unicité de la solution dans le cadre unidimensionnel. Ce résultat a été généralisé au cas tridimensionnel et aux conditions aux bords non homogènes, voir [M1], [M3]. J'ai ensuite étudié l'existence et l'unicité des solutions de l'équation de Vlasov, lorsque les vitesses ne sont pas bornées, commençant par l'équation de Vlasov couplée avec des conditions au bord de non-retour non homogènes, voir [M4]. La technique appliquée dans ce cas, basée sur des méthodes de perturbation par des opérateurs elliptiques, n'est pas généralisable aux conditions reliant le flux entrant et le flux sortant de particules. D'autres techniques, basées sur la formule de Trotter et sur des notions généralisées de semi-groupes d'opérateurs, ont été donc prises en compte lorsque l'équation de Vlasov est associée à des conditions au bord dissipatives ou conservatives, voir [M6], ou encore multiplicatives, voir [M7] et [M9].

La résolution d'une équation cinétique donne des informations sur la distribution de l'ensemble de particules  $f$ . Aussi, considérant les moments de la solution  $f$  contre des puissances de  $v$ , nous pouvons en déduire des informations sur des quantités macroscopiques, comme la densité, l'impulsion, l'énergie, .... Ces quantités macroscopiques sont ainsi liées à l'équation cinétique par les relations suivantes :

$$\begin{pmatrix} \rho(t) \\ \mu(t) \\ E(t) \end{pmatrix} = \int_{\Omega} \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ v^2 \end{pmatrix} f(t, x, v) \, dx \, dv, \quad (9)$$

En multipliant donc une équation cinétique par les puissances de  $v$  et en intégrant sur le domaine d'étude  $\Omega$  nous pouvons en déduire des équations sur les quantités macroscopiques, comme par exemple le système des équations d'Euler. Néanmoins, cette approche, dite méthode des moments, nécessite l'existence d'une équation de fermeture pour que le système d'équations trouvé puisse être résolu.

Un autre approche pour la dérivation d'équations portant sur des quantités macroscopiques est le développement en expansion de Hilbert de la fonction distribution :

$$f = f^0 + \varepsilon f^1 + \varepsilon f^2 + \dots, \quad (10)$$

où  $\varepsilon$  est un petit paramètre qui peut être introduit par des considérations physiques et en adimensionnant les variables, comme par exemple le nombre de Knudsen qui mesure le libre parcours moyen d'une particule. Encore une fois, il est nécessaire de donner une équation de fermeture pour que le système d'équations admette une solution. Selon l'asymptotique du problème, on qualifie les équations obtenues d'hydrodynamiques (correspondant souvent à un système hyperbolique de lois de conservation) ou de diffusion (correspondant à des équations de type parabolique). Ce thème de recherche est très actif et ses champs d'applications sont nombreux, une liste exhaustive des publications le concernant étant quasi impossible, nous referons ici quelques articles plus ou moins récents : [11], [19], [29], [59], [100], [101] pour les limites hydrodynamiques et [12], [31], [39], [63], [66], [64], [80], pour les limites de diffusion.

Lorsqu'il faut résoudre numériquement le problème étudié, à défaut d'une solution explicite, la réduction des modèles mésoscopiques aux modèles macroscopiques peut être très utile, en particulier parce que le nombre de variables en jeu diminue significativement, permettant des calculs numériques moins coûteux. Ceci a été le cas, par exemple, d'un travail fait en collaboration avec P. Degond (Toulouse), issu de la modélisation des moteurs ioniques. Ces moteurs se basent sur le principe suivant : des électrons sont injectés dans la région comprise entre deux cylindres co-axiaux, remplie d'un gaz ; ils y sont accélérés par un champ électrique parallèle aux parois des cylindres, et déviés par un champ magnétique perpendiculaire aux mêmes parois. Les électrons, contraints à passer plus de temps à l'intérieur des cylindres, ionisent plus de gaz qu'en absence du champ magnétique, et ils atteignent la sortie des cylindres avec une accélération supérieure grâce à l'action prolongée du champ électrique. Le modèle que j'ai étudié suppose la géométrie du moteur donnée par deux plaques parallèles au plan  $x = 0$ , dont la longueur est très grande par rapport à la distance entre les plans. Ceci a permis d'introduire un petit paramètre d'adimensionnement  $\varepsilon$  et d'étudier l'asymptotique du modèle décrit par une équation de type Vlasov-Boltzmann-Lorentz, couplée à des conditions aux bords de type conservatif. L'étude a été menée en deux temps. Dans un premier article, [M8], nous avons négligé le terme de collision et déduit rigoureusement un modèle macroscopique de type diffusion (aussi appelé modèle SHE, spherical harmonic expansion). Ce résultat a été ensuite généralisé, voir [M10], en considérant aussi les collisions élastiques isotropes des électrons contre les ions du gaz présents entre les deux plaques. La consistance et l'intérêt du modèle SHE a été ensuite validé par des simulations numériques, voir [M10] et [75]. Les résultats coïncident avec ceux obtenus par une méthode Monte Carlo appliquée à l'équation cinétique, qui est beaucoup plus coûteuse du point de vue numérique.

Ces derniers travaux, plutôt théoriques, mais basés sur une application réelle, m'ont portée à élargir mon champ de compétences vers l'étude de schémas numériques pour les équations cinétiques. Les méthodes numériques les plus utilisées en théorie cinétique sont (voir [M12] et ces références pour une description plus détaillée) :

- les méthodes à répartition discrète des vitesses qui donnent des schémas de conservation et entropiques assurant la positivité de la solution et sa convergence en temps long ;
- les méthodes spectrales qui conservent la masse, mais ne donnent aucune information sur la positivité ou la décroissance de l'entropie ;
- les méthodes de type Monte-Carlo basée sur une approche stochastique pour l'évaluation de l'opérateur de collision sont probablement les plus utilisées, mais elle ne sont pas efficientes lorsque les particules sont denses dans le domaine étudié.

Toutes ces méthodes perdent d'efficacité lorsque le paramètre  $\varepsilon$  peut changer de plusieurs ordres de grandeur, comme par exemple quand le domaine d'étude est constitué de deux régions (une raréfié et une dense) en contact. Dans ce cas il est possible d'utiliser deux codes différents pour les deux régions, mais il faut pouvoir alors déterminer l'interface entre les deux régions, et donner une condition de couplage raisonnable à cette interface, voir par exemple [5]. Pour contourner ce problème, il est possible d'écrire des schémas consistant avec l'asymptotique, *i.e.* tels que en passant à la limite  $\varepsilon \rightarrow 0$  dans les schémas, nous obtenons une discréétisation consistante avec l'équation limite obtenue au niveau continu. Dans la suite je vais appeler ces schémas "asymptotique préservants". Ces schémas ont été beaucoup développés et étudiés dans les dernières années, voir les références de section 1.1. Dans mes travaux de recherche, je me suis intéressée aux schémas numériques à répartition discrète des vitesses et à la mise en place de schémas asymptotiquement préservants, voir [M11]-[M14]. Dans ces travaux j'ai considéré d'une part le limite de collisions rasant liant l'opérateur de Boltzmann à l'opérateur de Boltzmann-Lorentz, et d'autre part à l'asymptotique de diffusion des équations de type Boltzmann-Lorentz vers des modèles de diffusion. Les résultats obtenus sont détaillés en chapitre 1.

Concernant les modèles macroscopiques, dans le cadre de deux post-doctorats, j'ai travaillé sur des problèmes indépendants : l'existence et unicité de solutions pour une équation de conservation à coefficients discontinus (one-sided Lipschitz) ; et la modélisation de la respiration humaine. Le premier sujet est lié à la théorie des systèmes hyperboliques et l'analyse du problème est basée sur la théorie des caractéristiques, le flux de Filippov et sur la notion de solutions en dualité introduite dans [20], voir [M15]. Le deuxième thème de recherche, plus appliqué, a été mené en collaboration avec l'INRIA et Air-Liquide. Ce domaine de recherche est très actif depuis une dizaine d'années et je vais donner plus des références en chapitre 2. Dans un premier temps mon apport a été purement numérique, en simulant le flux d'air,

décrit par les équations de Navier-Stokes incompressibles, dans les premières générations de bronches d'une géométrie de poumon obtenue par de scanner médicaux, voir [M17]. Dans un deuxième temps je suis revenue vers les modèles cinétiques en considérant l'évolution d'un aérosol transporté par un flux d'air, voir [M16]. L'ensemble de ces travaux sont détaillés en chapitre 2.

Le travail concernant la respiration humaine a été l'occasion de découvrir et collaborer à une thématique très appliquée. Depuis cette expérience, l'interaction avec les collègues d'autres disciplines (physique, biologie, etc.) a été déterminante dans le choix de mes futurs sujets de recherche en mathématique appliquée. Cette évolution vers le monde des applications est, par ailleurs, soulignée par les thèmes de recherche que j'ai abordés ces dernières années : la volcanologie (voir chapitre 3), les neurosciences (voir chapitre 4). Ces sujets de recherche sont détaillés dans la suite, dont le fil conducteur est notamment le passage de la description particulière (microscopique) où on suit l'évolution d'une particule type, à la description statistique (mésoscopique), où on suit l'évolution d'une famille de particules - ces dernières étant des bulles de gaz en volcanologie, ou des potentiels d'actions des neurones en neurosciences. Les premiers résultats sont publiés ou soumis pour publication, voir [M19], [M20] et [M21] pour la volcanologie, et [M18] et [M22] pour les neurosciences.

Enfin, ces collaborations ont aussi été le fruit de ma participation au projet ERC-starting grant - DEMONS- en volcanologie (porté par A.Burgisser - ISTO CNRS Orléans), et au projet ANR MANDy en neurosciences (porté par M. Thieullen - LPMA Paris VI), et ont permis le co-encadrement de deux thèses (2008-2012), de plusieurs stages de Master 2, l'organisation, d'un colloque international (en neurosciences) au CIRM en Janvier 2010, et de deux rencontres "Mathématiques & Géosciences", au BRGM d'Orléans en Février 2010 et au SMAI 2011, mettant en évidence les besoins de géosciences en mathématiques (principalement en statistique, traitement de signal et calcul scientifique). Suite aux collaboration en neurosciences, plus récemment, j'ai initié une collaboration avec R.M. Mège et son équipe à l'INSERM qui étudient l'adhésion et migration de cellules neuronales : ceci a donné lieu à un projet PEPS Bio-Math-Info (MAC : Modélisation d'adhésion des cadhérines) concernant l'adhésion et croissance des cadhérines, dont je suis porteuse. L'idée étant de modéliser l'évolution de deux populations de cellules (libres et liées) par un système d'équations de réaction-diffusion dégénéré. Les images de croissance de contacts trans-cellulaires et cis-cellulaires obtenus par l'équipe de R.M. Mège, ressemblent aussi à des modèles de croissance de villes étudiés par A. Batakis et M. Zinsmeister de l'université d'Orléans (projet région-TRUC). Nous allons commencer une collaboration sur l'étude des modèles liés à la croissance de cadhérines en co-encadrant une thèse à partir de septembre 2012. Ce nouvel axe de recherche ainsi que le travail fait en neurosciences, m'ont portée à m'intéresser, très récemment, aussi à la modélisation en sciences sociales (groupe de travail Humaniste co-organisé avec L. Boudin et O. Guéant du laboratoire Jacques-Louis Lions, Paris VI et VII, démarré en février 2012).

Dans la suite, je vais détailler mes travaux de recherche en l'organisant en quatre parties : le premier chapitre (voir 1) détaille les recherches concernant les schémas numériques pour le cinétique ; le deuxième chapitre (voir 2) reporte les résultats concernant les modèles macroscopiques ; dans le troisième chapitre (voir 3) est présenté le thème de recherche en volcanologie ; enfin le dernier chapitre (voir 4) concerne les neurosciences computationnelles. Les travaux qui constituent cette Habilitation à Diriger des Recherches sont référencés à page 71 et correspondent à mes publications après la thèse, de [M11] à [M17] pour la période post-doctorale et qui sont détaillés en chapitres 1 et 2 ; de [M19] à [M23] qui correspondent à mes nouvelles directions de recherche, menées à l'université d'Orléans, et qui sont décrites dans les chapitres 3 et 4.

# Chapitre 1

## Schémas numériques pour le cinétique

Dans cette partie, je présente mes résultats concernant de schémas numériques pour les équations cinétiques à répartition de vitesses, avec des opérateurs de collisions de type Lorentz. Les travaux présentés ici, ont été effectués au laboratoire Jacques-Louis Lions (Paris VI), pendant deux post-doctorats (de 2000 à 2003) financés par deux projets différents : le TMR-Network "Asymptotic methods in kinetic theory" (1 an), et le "Marie-Curie" du  $V^e$  programme de l'U.E. (2 ans). À cette occasion, j'ai principalement approfondi les aspects numériques liés aux équations cinétiques, et je me suis intéressée plus précisément à l'étude des schémas numériques à répartition de vitesses qui soient "asymptotiquement préservant" (ici et dans la suite ce terme sera utilisée à fin de garder l'acronyme "AP" qui est très diffuse). Ces recherches, faites en collaboration avec C. Buet (CEA), B. Lucquin-Desreux (Paris VI) et S. Cordier (Orléans), ont donné lieu aux publications [M11], [M13], [M14], [M12].

Nous considérons un ensemble de particules, des photons, qui se déplacent à vitesse constante et soumises à des collisions élastiques avec des particules plus lourdes, *i.e.* ces collisions modifient uniquement la direction de la vitesse. Dans le cas unidimensionnel, la fonction distribution  $f = f(x, \theta, t)$  qui décrit l'évolution de cet ensemble de particules doit satisfaire l'équation cinétique :

$$\varepsilon \partial_t f + \cos \theta \partial_x f = \frac{1}{\varepsilon} Q(f). \quad (1.1)$$

où  $x \in \mathbb{R}$ ,  $\theta \in [-\pi, \pi]$  et représente la direction du déplacement, *i.e.* la vitesse de particules est donnée par  $v = |v|(\cos \theta, \sin \theta)$  ; enfin,  $\varepsilon$  est un petit paramètre. Dans le cadre des collisions élastiques, comme expliqué dans l'introduction, l'opérateur de collision  $Q(f)$  devient un opérateur de type Lorentz et prend la forme d'un opérateur de Boltzmann-Lorentz :

$$Q(f)(\theta) = \int_{S^1} B(\theta' - \theta) (f(\theta') - f(\theta)) d\theta', \quad (1.2)$$

ou d'un opérateur de Laplace-Beltrami :

$$Q(f)(\theta) = \partial_{\theta\theta}^2 f(\theta), \quad (1.3)$$

Comme expliqué aussi en section 1.2, quand l'angle de déviation  $\theta' - \theta$  est très petit, l'opérateur de Boltzmann-Lorentz converge vers l'opérateur de Laplace-Beltrami (voir aussi [26], [43], [41]). Cette limite est appelée la limite de collisions rasantes. Un des mes travaux, [M13], concerne une approximation numérique de type éléments finis pour l'opérateur de Boltzmann-Lorentz consistante avec la limite de collisions rasantes, voir section 1.2.

Un autre aspect numérique que nous avons étudiée concerne la limite de diffusion de l'équation cinétique (1.1), [M11]. En effet, il est facile de voir que, quand  $\varepsilon$  converge à zéro, la solution de (1.1) converge à la solution d'un problème de diffusion par rapport à la seule variable spatiale  $x$  :

$$\partial_t f^0 - \frac{1}{2} \partial_{xx}^2 f^0 = 0. \quad (1.4)$$

dont le coefficient de diffusion peut être calculé par une expansion de Hilbert et où  $f^0 = f^0(t, x)$  est le premier terme de l'expansion d'Hilbert de  $f$  :

$$f = f^0 + \varepsilon f^1 + \varepsilon^2 f^2 + \dots$$

Les résultats obtenus sont détaillés en section 1.1.

Enfin, nous avons mis au point un test numérique dit de focalisation, [M14], qui est basé sur la défocalisation d'un Dirac, et qui permet de déterminer la nature des collisions (rasantes ou pas), sans la connaître a priori et en se basant juste sur des simulations numériques, voir section 1.3.

En d'autre termes, dans ce chapitre, il est question d'une approche numérique des asymptotiques suivantes :

$$\begin{array}{ccc} \text{Boltzmann} & \xrightarrow{m_e/m_i \rightarrow 0} & \text{Boltzmann-Lorentz} \\ \varepsilon \rightarrow 0 & \downarrow & \downarrow \varepsilon \rightarrow 0 \\ \text{Fokker-Planck-Landau} & \xrightarrow{m_e/m_i \rightarrow 0} & \text{Fokker-Planck-Lorentz} \end{array}$$

Au niveau théorique l'asymptotique de l'opérateur de Boltzmann ou Fokker-Planck-Landau vers les opérateurs de type Lorentz dans le cadre d'un rapport de masse entre particules petit a été étudiée dans [42]. L'asymptotique dite des collisions rasantes a été étudiée dans [41] et [26] concernant les opérateurs de Lorentz, et dans [43] concernant l'opérateur non-linéaire de Boltzmann.

## 1.1 Schémas “asymptotiquement préservant”

Cette partie concerne les schémas asymptotiquement préservant, c'est à dire ces schémas dépendant d'un paramètre  $\varepsilon$  et tels que, quand  $\varepsilon$  tend vers zéro, ils convergent vers un schéma consistant avec la discréétisation de l'équation limite au niveau continu. Ce type de problèmes est souvent pris en compte lorsqu'une région contenant un grand nombre des particules (région dense) est en contact avec une région contenant un petit nombre de particules (région raréfiée). Généralement, l'évolution du système est décrite par le biais d'une équation de diffusion pour la région dense, et d'une équation cinétique pour la région raréfiée. Reste alors à modéliser mathématiquement l'interface entre les deux régions, *i.e.* la frontière de contact, ce qui renvoie à la résolution de problèmes de frontière libre (problèmes de type de Stefan). Une autre façon d'étudier mathématiquement cette situation, est d'écrire un schéma numérique pour l'équation cinétique, consistant avec la limite de diffusion. De cette façon, nous pouvons décrire avec une seule équation et en variant la valeur du paramètre  $\varepsilon$  le problème sur la totalité du domaine sans avoir à connaître *a priori* les domaines denses et raréfiés, et donc sans avoir à traiter des problèmes de frontière libre. Grâce à son large spectre d'application, ce thème de recherche a été très développé dans les dernières années et par différentes approches. Dans les papiers fondateurs nous citons par exemple [70], [58] ; concernant les schémas "well-balanced" voir par exemple [61], [62] [51] ; pour l'asymptotique diffusive voir par exemple [30], [38], [40], [78], pour le cadre multidimensionnel voir par exemple [27].

Dans [M11] nous étudions, en particulier, l'équation cinétique uni-dimensionnelle (1.1), où pour simplicité, nous avons considéré  $Q(f)$  donné par l'opérateur de collision de Fokker-Planck-Lorentz (1.3), mais nos résultats peuvent se traduire dans le cadre de l'opérateur de collision de type Boltzmann-Lorentz (1.2).

Plus précisément, nous avons étudié plusieurs schémas numériques (centré, décentré,  $\theta$ -schéma, Jin-Levermore modifié). Premièrement, nous avons montré qu'il faut utiliser une discréétisation non-uniforme par rapport à l'angle  $\theta$ . Autrement, à la limite, le coefficient de diffusion serait  $1/2\lambda$ , avec  $\lambda \neq 1$ , valeur propre associée au vecteur propre  $\cos(\theta)_{j=0,\dots,N-1}$  et à la matrice de discréétisation de l'opérateur de Laplace-Beltrami. Nous avons aussi constaté que dans le cadre unidimensionnel, pour un maillage non-uniforme il suffit de 4 points de discréétisation pour assurer la consistance de la limite du coefficient de diffusion discret à  $1/2$ . Une fois introduite la discréétisation de la variable spatiale  $x$  (uniforme), nous avons montré que :

- le schéma centré n'est pas consistant avec la limite, puisqu'il converge vers l'équation de diffusion stationnaire, *i.e.* le coefficient de diffusion est infini ;
- le schéma centré est consistant avec la limite, *i.e.* nous obtenons le bon coefficient de diffusion, mais il donne lieu à des oscillations dues au découplage entre les mailles paires et impaires ;

- le  $\theta$ -schéma semble être un bon compromis, mais les oscillations du schéma centré persistent si la donnée initiale est un Dirac défini sur une seule maille, et nous obtenons une erreur d'ordre  $\Delta x$  pour le coefficient de diffusion ;
- enfin, le schéma dit de Jin-Levermore modifié, car inspiré par [69], correspond au comportement attendu.

Je reporte à titre d'exemple, en figure 1.1, les courbes en fonction de  $\theta$  correspondantes au coefficient de diffusion calculé à partir du moment d'ordre deux de la solution obtenue par le schéma dit de Jin-Levermore modifié et de la solution exacte. Les deux courbes croisent la valeur théorique  $1/2$  pour un angle optimal  $\theta_0 = 0.864$ . Cette valeur correspond à la valeur optimale du premier angle de discréétisation, pour un schéma à 4 points en vitesse, valeur nécessaire à l'obtention du coefficient de diffusion  $1/2$  (voir les détails dans [M11]).

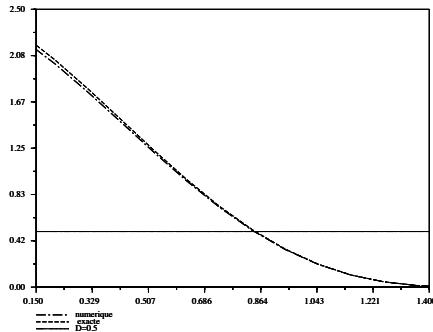


Figure 1.1: *Coefficient de diffusion par rapport à  $\theta$*

## 1.2 Limite des collisions rasantes

Un des thèmes de recherche auquel je me suis intéressée, voir [M13], concerne la définition d'un schéma numérique pour l'opérateur de Boltzmann-Lorentz consistant avec la limite de collisions rasantes : le schéma numérique proposé est tel que, à la limite de collisions rasantes, *i.e.* quand l'angle de déviation est très petit, le schéma donne une approximation de l'équation limite continue, l'équation de Fokker-Planck-Lorentz. Cette type d'approximation a lieu essentiellement quand les potentiels d'interactions sont à longue portée, comme par exemple le potentiel coulombien. La convergence au niveau continu de l'équation de Boltzmann vers l'équation de Fokker Planck (ou Laplace-Beltrami) a été prouvé dans [41], dans le cadre du potentiel coulombien, et dans [43] pour des noyaux de collision réguliers. Nous rappelons aussi les résultats de [63] pour des forces inversement proportionnelles à la distance ( $1/r^s$ , avec  $s > 1$ ), *i.e.* et sans "cut-off". Enfin, la convergence dans la limite des collisions rasantes de l'opérateur de Boltzmann-Lorentz vers celui

de Fokker-Planck-Lorentz a été prouvée dans [26].

L'approximation numérique de ce type de problème a été traitée dans [89] par une méthode spectrale ou encore dans [66] par une méthode de type particulaire. Nous avons choisi d'approcher le modèle par des éléments finis P1, parce que ils sont particulièrement bien adaptés au problème (voir [34] pour le cas 3D) ; ceci évite de passer par une quadrature pour le calcul de l'intégrale, ainsi nous pouvons considérer la limite de collisions rasantes, tout en gardant fixé le pas d'espace. En particulier, nous avons considéré l'équation (1.1) avec l'opérateur  $Q(f)$  défini par (1.2) et  $\varepsilon = 1$ . Le noyau de collision est donné par :

$$B(\theta - \theta') = B_0 \mathbf{1}_{|\theta - \theta'| < \varepsilon \pi},$$

et l'équation est complétée par des conditions au bords de type de réflexion. À titre d'exemple je reporte en figure 1.2 un résultat numérique, qui montre bien la très bonne approximation pour  $\varepsilon$  qui converge vers zéro de l'opérateur de Laplace-Beltrami par les collisions rasantes.

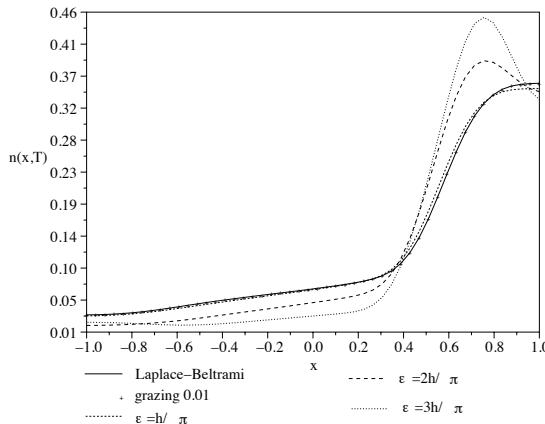


Figure 1.2: La densité  $n(x, T)$ , pour plusieurs valeurs de  $\varepsilon$ :  $0.01, \frac{\Delta x}{\pi}, \frac{2\Delta x}{\pi}, \frac{3\Delta x}{\pi}$  et pour l'opérateur de Laplace-Beltrami

Les méthodes particulières ou volumes finis nécessitent un coût de calcul prohibitif afin de vérifier l'asymptotique de collisions rasantes, à moins de considérer des schémas d'ordre deux. De plus, pour la discréétisation du problème tridimensionnel, il est préférable d'utiliser une méthode spectrale, une approche de type éléments finis Q1 étant très complexe dans le calcul exact des intégrales. Enfin, l'approche spectrale pour l'opérateur non-linéaire de Boltzmann a été développée dans [88] et [53].

### 1.3 Focalisation

L'effet régularisant de l'opérateur de Fokker-Planck-Lorentz par rapport à l'opérateur de Boltzmann-Lorentz, est bien connu, voir par exemple [22], [108]. Le travail sur la limite de collisions rasantes, [M13], nous a permis d'identifier et étudier numériquement par un cas test très simple, dit test de focalisation, cet effet. Cette section résume brièvement les résultats publiés dans [M14].

Nous considérons un domaine  $\Omega = [0, 1]$  initialement vide, *i.e.*  $f(x, \theta, t = 0) = 0$ . Un faisceau de particules localisé au tour de l'angle  $\theta = 0$  est injecté au bord  $x = 0$  du domaine  $\Omega$ ,  $f(x = 0, \theta, t) = \delta_{\theta=0}$ . Les particules sont supposées traverser le domaine avec une vitesse dont l'angle est  $\theta = 0$  et éventuellement subir des collisions élastiques. Leur évolution est donc régie par l'équation (1.1), où l'opérateur de collision  $Q(f)$  est donné par (1.2) ou (1.3), et comme en section 1.2,  $\varepsilon = 1$ .

Le test de focalisation permet d'évaluer l'effet régularisant ou pas de l'opérateur de collision en comparant la densité de particules en entrée du domaine (en  $x = 0$ ) le long d'une direction donnée, avec celle en sortie (en  $x = 1$ ) le long de la même direction (ici celle perpendiculaire au bord du domaine,  $\theta = 0$ ). Nous définissons le coefficient de focalisation comme le rapport entre le nombre de particules injectées en  $x = 0$  avec direction  $\theta = 0$  et celles arrivant au même temps en  $x = 1$  avec la même direction. En raffinant le maillage en vitesse, nous constatons deux comportements différents selon l'opérateur de collisions considéré : dans le cas de Boltzmann-Lorentz le coefficient de focalisation converge vers une valeur finie ; pour l'opérateur de Laplace-Beltrami cette limite est zéro.

Avec ce test de focalisation, il est donc possible de classifier les opérateurs de collision en deux familles : ceux de type Boltzmann-Lorentz, et ceux de type Laplace-Beltrami. À titre d'exemple, nous avons considéré l'opérateur (1.2) pour des collisions rasantes avec "cut-off". Le noyau est alors défini par :

$$B_\varepsilon(z) = C_{\alpha, \varepsilon} \mathbf{1}_{\{|z| > \varepsilon\}} |z|^{-\alpha},$$

avec  $\alpha \geq 0$ , et la constante  $C_{\alpha, \varepsilon}$  donnée par :

$$C_{\alpha, \varepsilon} = \begin{cases} 1 & \text{pour } \alpha \in [0, 3[ \\ 1/\log \varepsilon & \text{pour } \alpha = 3 \\ 1/\varepsilon^{3-\alpha} & \text{pour } \alpha > 3 \end{cases}$$

Quand  $\varepsilon$  converge vers zéro, le noyau de l'opérateur de Boltzmann-Lorentz admet une singularité intégrable pour  $\alpha < 1$ , qui correspond à l'hypothèse de "cut-off" angulaire de Grad. Au contraire, quand  $\alpha \geq 1$ , *i.e.* dans le cas de "non cut-off", une expansion de Taylor dans l'intégrale montre qu'il y a compensation entre le terme de perte et de gain (voir par exemple [26] et [41]). Enfin, si  $\alpha \geq 3$ , l'opérateur de Boltzmann-Lorentz converge à l'opérateur de Laplace-Beltrami quand  $\varepsilon$  converge

vers zéro (le cas  $\alpha = 3$  étant le cas des interactions coulombiennes). En d'autre termes, pour  $\alpha < 1$  on s'attend à ce que une partie des particules restent focalisées autour de la direction  $\theta = 0$  ; et pour  $\theta \geq 1$ , le faisceau tendra à être de plus en plus diffusé. Ce comportement est mis en évidence dans le tableau suivant :

	$F_{N_\theta=320}$	$F_{N_\theta=160}$	$F_{N_\theta=320}/F_{N_\theta=160}$
Boltzmann-Lorentz	0.3794	0.3819	0.9934
$\alpha = 0.95$	0.2137	0.2066	1.0344
$\alpha = 1$	0.1584	0.1624	0.9753
$\alpha = 1.1$	0.0771	0.0939	0.8211
$\alpha = 2$	0.0066	0.0133	0.4962
$\alpha = 3$	0.0036	0.0078	0.4615
Laplace-Beltrami	0.0078	0.0156	0.5

Table 1.1: coefficient de focalisation

où  $F_{N_\theta} = F_{N_\theta}(t)$  est le coefficient de focalisation pour  $N_\theta = 320$  et 160 points de discréétisation, défini par :

$$F_{N_\theta}(t) = \frac{f(x = 1, \theta = 0, t)}{f(x = 0, \theta = 0, t)}.$$

Comme nous nous y attendions, pour  $\alpha < 1$  le coefficient de focalisation converge vers une valeur finie non nulle, et pour  $\alpha > 1$  le coefficient de focalisation converge vers zéro. Ceci permet donc de caractériser le type d'opérateur en observant les solutions, voir [M13] pour plus de détails.

## Chapitre 2

# Équations macroscopiques

Les équations cinétiques et les systèmes hyperboliques sont liés : plus précisément, ces derniers peuvent être dérivés des premiers. Formellement, en considérant les deux premiers moments de la solution  $f(t, x, v)$  de l'équation cinétique (2) :

$$\rho(t) = \int_{\Omega_v} f(t, x, v) dv, \quad (\rho u)(t) = \int_{\Omega_v} v f(t, x, v) dv,$$

correspondant respectivement aux quantités macroscopiques de la densité (ou masse) et de la quantité de mouvement, nous pouvons écrire les équations de conservation suivantes :

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \partial_x (\rho u) &= \int_{\Omega_v} Q(f) dv, \\ \partial_t (\rho u) + \partial_x (\rho u^2) &= \int_{\Omega_v} v Q(f) dv. \end{aligned}$$

Selon la nature de l'opérateur d'interaction de particules  $Q(f)$ , les membres de droite de ce système d'équations seront zéro ou donneront un terme dépendant de  $f$ . Le lien et l'étude théorique du passage d'une équation cinétique à une équation macroscopique est un sujet de recherche très compétitif, et est lié au 6<sup>eme</sup> problème d'Hilbert concernant le la cohérence entre les modèles de la mécanique des fluides (Euler et Navier-Stokes) et le modèle de la théorie cinétique (Boltzmann). Un apport essentiel a été donné par les travaux de L. Saint-Raymond, voir par exemple [59], [100], citeStR02-2, [101] et [102].

Du fait de ce lien, en parallèle des développements de schémas numériques pour les modèles cinétiques, je me suis intéressée aux systèmes hyperboliques. Plus précisément, en collaboration avec F. James (Orléans) et F. Bouchut (Marne-la-Vallée), j'ai travaillé sur la généralisation à plusieurs dimensions (voir [20] et [60] pour le cadre unidimensionnel) du résultat d'existence et unicité pour les solutions en dualité de systèmes hyperboliques à coefficient discontinu. Ce travail a donné lieu à l'article [M15] qui est détaillé en section 2.1.

Enfin, dans le cadre de l'application des mathématiques à la biologie, j'ai collaboré aux débuts du projet sur la modélisation de la respiration dans le poumon humain, voir section 2.2. Le flux d'air dans les premières générations de bronches étant modélisé par les équations de Navier-Stokes incompressible

$$\begin{aligned} \partial_t u + u \cdot \nabla u - \nu \Delta u + \rho^{-1} \nabla p &= 0 \\ \nabla \cdot u &= 0 \end{aligned} \tag{2.1}$$

où  $u$  et la vitesse du fluide,  $p$  sa pression et  $\rho$  la densité du fluide. J'ai simulé et étudié l'évolution du flux d'air dans deux géométries de poumon obtenues par imagerie médicale. En plus de la compréhension et l'adaptation du code pour la simulation des solutions de l'équation de Navier-Stokes, j'ai participé à la construction du maillage 3D à partir de l'image médicale, ainsi que à la visualisation des résultats (un des films créés dans le cadre du suivi de lignes de flux d'air dans les premières générations des bronches est visible sur l'écran d'accueil du laboratoire Jacques-Louis Lions depuis 8 ans). Ce sujet de recherche m'a demandé un investissement important, tant au niveau numérique que théorique n'ayant jamais abordé auparavant les équations de Navier-Stokes. Une partie des résultats a été publiée (voir [M17]). Par la suite, j'ai commencé à travailler, lors du CEMRACS 2004, à l'étude de la façon de diffuser d'un aérosol dans les premières voies respiratoires, ce qui implique un modèle couplé fluide-cinétique. Un travail préliminaire, concernant la simulation d'un ensemble des particules diffusant dans un fluide de vitesse constante a été publié (voir [M16]). Ces résultats sont le point de départ de beaucoup de travaux et développements des dernières années sur la modélisation de la respiration humaine, voir par exemple [9], [23], [24].

## 2.1 Équation de transport à coefficients discontinus

Cette partie détaille les résultats obtenus en collaboration avec F. James (Orléans) et F. Bouchut (Marne-la-Vallée) concernant les solutions en dualité pour l'équation de conservation à coefficients discontinus, voir [M15]. La notion de solutions en dualité a été utilisée récemment pour l'étude d'un modèle de chemotaxis, voir [68].

Soit  $\mathbf{a} \in L^\infty((0, T) \times \mathbb{R}^N)$  un vecteur des vitesses satisfaisant à la condition, dite *one-sided Lipschitz condition* (OSLC) : pour presque tout  $(t, x, y) \in (0, T) \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$ , il existe  $\alpha \in L^1_+(0, T)$  tel que :

$$\langle \mathbf{a}(t, y) - \mathbf{a}(t, x), y - x \rangle \leq \alpha(t) |y - x|^2. \tag{2.2}$$

Il est possible de montrer que cette condition implique seulement une borne supérieure de  $\text{div}(\mathbf{a})$ . Nous avons considéré des équations de transport où les vitesses satisfont la condition (2.2), parce qu'elle permet de donner des résultats rigoureux quand  $\text{div} \mathbf{a} < 0$ , ce qui correspond à une situation compressive. Ce type de comportement

apparaît dans plusieurs applications des systèmes hyperboliques non-linéaires, voir par exemple [72], [77] [115], ou pour le système de gaz sans pression [21].

Nous avons considéré donc le problème de transport, dans  $(0, T) \times \mathbb{R}^N$  :

$$\partial_t u + \mathbf{a} \cdot \nabla u = 0, \quad (2.3)$$

avec donnée initiale  $u(0, x) = u^0(x)$ . Cette équation est naturellement liée à l'équation de conservation, dans  $(0, T) \times \mathbb{R}^N$  :

$$\partial_t \mu + \operatorname{div}(\mathbf{a} \mu) = 0, \quad (2.4)$$

par les caractéristiques, aussi appelé flots, définies, pour  $0 \leq s, t \leq T$ ,  $x \in \mathbb{R}^N$ , par les solutions de l'équation différentielle ordinaire :

$$\partial_s X = \mathbf{a}(s, X(s, t, x)), \quad X(t, t, x) = x. \quad (2.5)$$

Il est bien établi que si  $\mathbf{a}$  est suffisamment régulier, le flot est uniquement déterminé et les solutions  $u$  de l'équation de transport (2.3) et  $\mu$  de l'équation de conservation (2.4) sont données respectivement par

$$u(t, x) = u^0(X(0, t, x)), \quad \mu(t, x) = \det(\partial_x X(0, t, x)) \mu^0(X(0, t, x)).$$

La théorie des caractéristiques n'est plus valide si  $\mathbf{a}$  n'est pas régulier, comme pour des vitesses satisfaisant (2.2). Le bien-fondé du problème de transport a été montré pour des vitesses  $\mathbf{a}(t, \cdot) \in W_{loc}^{1,1}(\mathbb{R}^N)$  avec divergence dans  $L_{loc}^\infty$ , [44], en utilisant le cadre des solutions renormalisées. Et dans [2] le résultat a été généralisé à l'équation de Vlasov avec vitesses  $\mathbf{a}(t, \cdot) \in BV_{loc}$  et  $\operatorname{div} \mathbf{a}(t, \cdot) \in L_{loc}^1$ . Des avancées récentes ont été faites pour des vitesses pas  $BV$  en utilisant la formulation lagrangienne, voir par exemple [3], [4], [18] ou encore [32]. Néanmoins, le comportement de discontinuités dans le cadre de vitesses satisfaisant (2.2) est différent, et l'approche de type solutions renormalisées n'est pas adéquate. Enfin, dans [92] et [90, 91] l'étude de l'équation de transport à coefficient discontinu est basée sur la théorie des flots de Filippov, [54]. Cette théorie donne une définition généralisée pour les solutions  $X$  de (2.5) dans le cadre de vitesses discontinues. De plus, la condition (2.2) en assure l'unicité et la stabilité. Néanmoins, l'unicité est valable seulement pour des solutions du problème direct, *i.e.* quand  $s > t$ .

Dans [M15] nous avons adapté et généralisé au cadre multi-dimensionnel les résultats de [20], en utilisant les solutions réversibles et en dualité. L'idée de base est de résoudre l'équation duale du problème de transport (2.3), qui de fait est un problème conservatif rétrograde:

$$\partial_t \pi + \operatorname{div}(\mathbf{a} \pi) = 0 \quad \text{in } (0, T) \times \mathbb{R}^N, \quad (2.6)$$

avec donnée finale  $\pi(T, x) = \pi^T(x)$ .

L'existence de solutions au problème dual implique l'unicité de solutions pour le

problème direct correspondant. Néanmoins, le manque d'unicité, et donc de stabilité, pour le problème rétrograde, ne permet pas de définir les solutions du problème direct par le biais de la relation :

$$\frac{d}{dt} \int u(t, x) \pi(t, x) dx = 0.$$

Le point crucial dans [20] était l'introduction de solutions réversibles du problème rétrograde, assurant ainsi l'existence, l'unicité et la stabilité faible. Dans le cadre multi-dimensionnel, nous avons prouvé l'unicité que pour le problème conservatif rétrograde et pas pour celui de transport. Nous avons donc pu montrer les deux résultats suivants :

**Théorème 2.1.1 (Problème conservatif rétrograde)** *Pour tout  $\pi^T \in L_{loc}^\infty(\mathbb{R}^N)$ , il existe une unique solution de (2.6),  $\pi \in \mathcal{R}^T$ , telle que  $\pi(T, \cdot) = \pi^T$ .*

**Théorème 2.1.2 (Problème transport forward)** *Pour tout  $u^0 \in BV_{loc}(\mathbb{R}^N)$ , il existe un unique solution duale de (2.3), telle que  $u(0, \cdot) = u^0$ .*

## 2.2 Modélisation de la respiration humaine

Dans cette partie, je présente les résultats obtenus, lors d'un post-doc (2003-2004) au laboratoire Jacques-Louis Lions (Université Pierre et Marie Curie), voir aussi [M17] et [M16]. Le thème de cette recherche pluri-disciplinaire concernait la modélisation de la respiration humaine et était une collaboration avec l'hôpital Salpêtrière, l'INRIA et Air Liquide. Il s'agissait des premiers pas dans ce sujet de recherche très appliquée et riche. Après mon arrivée à Orléans (2004), les engagements locaux et des nouvelles axes de recherche ont fait que je n'ai plus participé activement aux avancées de ce thème qui a beaucoup évolué récemment : voir par exemple le projet "Multiscale and multiphysics modelling of the respiratory system" porté par C. Grandmont (INRIA) ou encore les travaux de B. Maury (Paris XI), et ceux de L. Boudin (Paris VI), plus de références sont données dans la suite de cette section.

Le but global du projet est de pouvoir simuler et étudier le flux respiratoire depuis le nez jusqu'aux acinus, pour une optimisation des soins médicaux comme par exemple les inhalations d'aérosols. Le poumon a une structure en arbre constituée de 23 bifurcations (ou générations) ; depuis la trachée jusqu'aux acinus. Cette structure est usuellement partagée en trois parties : les premières 6-7 générations, arbre trachéobronchique supérieur, les générations suivantes jusqu'à la 21ème, arbre bronchique, et les dernières générations jusqu'aux acinus, l'arbre alvéolaire. De façon très succincte, cette répartition correspond à des comportements et mécanismes différents du flux d'air : dans l'arbre trachéobronchique l'air peut être considéré comme un fluide incompressible et son évolution est décrite par les équations de Navier-Stokes incompressibles (2.1) ; dans l'arbre bronchique il est modélisé par un flux de type Poiseuille ; enfin dans l'arbre alvéolaire a lieu le passage de l'air au sang, modélisé

par une mécanique similaire à celle d'une série de pistons avec résistance, voir [9].

Mon travail de post-doctorat concernait en particulier la simulation numérique du flux d'air dans la partie trachéo-bronchique. Le service de médecine de l'hôpital Salpêtrière nous a fourni deux scans tridimensionnels de poumons humains, coupés au début de la trachée et à la 6-7ème génération, consistant d'un maillage de la surface du poumon. Ces maillages étant très irréguliers (à cause des irrégularités naturelles du corps humain), la première étape de mon travail a consisté à leur optimisation/régularisation tout en préservant au maximum la géométrie du maillage original. Aussi pour pouvoir les utiliser comme maillage pour les simulations numériques, il a fallu les transformer en maillages volumiques. Ce travail était fait en utilisant plusieurs codes développés à l'INRIA (YAMS et ghs3d), ainsi que deux codes en C++ que nous avons écrit (BordsDetection et/ou BordsCylindres). Un script en Perl permettant d'automatiser les différentes étapes afin d'obtenir le maillage volumique en une seule commande à enfin simplifié en une seule commande toute cette procédure.

Une fois obtenu le maillage volumique, pour les simulations des équations de Navier-Stokes, nous utilisons un code en Fortran développé au laboratoire Jacques-Louis Lions (NS3IFS). Concernant les conditions aux bords du modèle, il est admis que la respiration humaine est due à une différence de pression provenant de la dilatation des acini (ou au mouvement du diaphragme) et que, pendant un cycle respiratoire (inhalation, expiration), la première phase est plus courte que la deuxième. À cause du code utilisé et du fait que les résultats devaient être comparés avec ceux obtenu par L. Vial (à l'époque en thèse à Air-Liquide), utilisant GAMBIT et FLUENT pour les remaillages et simulations numériques et ne pouvant pas prendre en compte de conditions aux bords en pression, nous nous sommes limités à des conditions en vitesse, en imposant une vitesse constante ou bien sinusoïdale en entrée de la trachée, en laissant des sorties libres aux bouts des 6ème générations, et une vitesse nulle sur la paroi du poumon. Malgré ce bémol, les résultats obtenus, ainsi que leur comparaison étaient tout à fait satisfaisants. Les avancées récentes et l'utilisation du code LifeV, voir [9], permettent aujourd'hui de prendre en compte des conditions aux bords plus réalistes.

La dernière étape de mon travail, mais pas la moindre, a été la visualisation de résultats numériques. L'idée était de montrer comment l'air se répartit dans les premières générations de l'arbre trachéo-bronchique, en visualisant des particules fictives suivant les lignes de courant. Un premier essai a été fait en utilisant Medit (développé par l'INRIA), mais à l'époque les outils nécessaires à cette visualisation n'étaient pas encore disponibles, seules les différences de pressions étaient bien représentées. J'ai donc opté pour un logiciel libre (OpenDx). Il a fallu convertir les résultats des simulations numériques dans un format lisible par ce logiciel (à l'aide d'un programme C++ que nous avons développé). Les films ainsi obtenus sont disponibles sur ma page web (dans la partie recherche/films) et l'un d'eux est depuis visible sur l'écran d'accueil du laboratoire Jacques-Louis Lions. Je reporte ici, les images correspondant à trois temps pour la visualisation avec les particules fictives.

Enfin, une partie de ces résultats ont été publiés dans une revue de bio-médecine computationnelle, [M17].



Figure 2.1: Visualisation du flux d'air par des particules fictives pour une condition de vitesse entrante sinusoïdale.

Après cette validation numérique, une question se pose de façon naturelle : est-il possible récupérer des informations sur la santé du patient à partir des simulations/données. Une possibilité est de considérer le rapport entre le débit en sortie et la surface de chaque sortie de 6ème génération. En traçant en échelle logarithmique ces rapports pour chaque sortie, j'ai remarqué un bon alignement (avec  $D \sim S^{4/3}$ ) pour ce qui concerne la géométrie du poumon sain, alors que pour la géométrie correspondant au poumon malade, les points sont répartis en deux groupes, correspondant aux parties droite et gauche du poumon. Or il faut dire que cette deuxième géométrie était gravement pathologique, en effet un cancer bouchait quasi en totalité la première bifurcation à droite, et donc ce résultat n'est pas du tout étonnant. Cette première étude portant seulement sur deux géométries de poumon ne permet pas de conclure sur son utilité effective, et mérirait d'être approfondie.

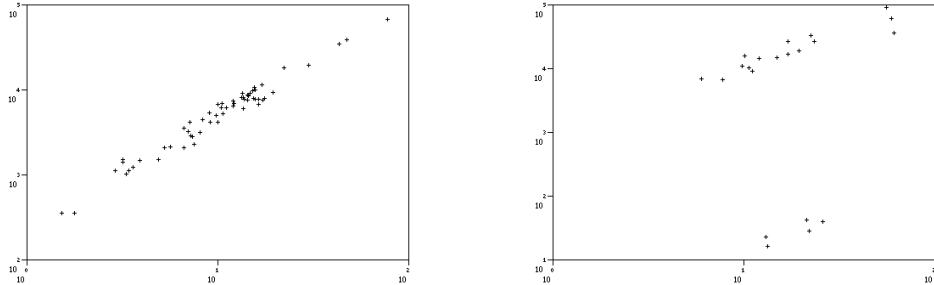


Figure 2.2: Débit vs. surface. Gauche : poumon sain. Droite : poumon pathologique

Enfin, lors du CEMRACS 2004, en collaboration avec C. Baranger, L. Boudin et P-E. Jabin, voir [M16], nous avons considéré un modèle cinétique décrivant l'évolution d'un ensemble de particules, représenté par la fonction distribution  $f(x, v, t)$ , dans un fluide de vitesse  $u$ . C'était une première approche du couplage fluide-cinétique pour la modélisation d'un aérosol injecté et/ou inhalé au niveau de la bouche ou du

nez.

$$\begin{aligned}
\partial_t f + v \cdot \nabla_x f &= \nabla_v(\mu(v - u)f + \lambda \nabla_v f) \\
f(x, v, t) &= 0, \quad x \in \Gamma - \{0\}, \quad v \cdot n < 0 \\
f(x = 0, v, t) &= \delta_{v_x}, \quad v_x > 0 \\
f(x, v, t = 0) &= 0
\end{aligned}$$

Nous avons considéré deux géométries : un cylindre de section circulaire avec une vitesse du fluide  $u$  de profil parabolique, et un coude de section carrée avec une vitesse du fluide  $u$  de profil plat. Nous avons approché le modèle par une méthode particulaire. Je reporte ici à titre d'exemple deux tests simulant deux conditions initiales modélisant un aérosol injecté en apnée ( $v(t = 0) = 10$  m/s et  $u = 0.1$  m/s), ou un aérosol initialement en suspension et inhalé ( $v(t = 0) = 10^{-3}$  m/s et  $u = 1$  m/s). Nous remarquons que les particules d'aérosol inhalées sont plus diffusées que celles injectées en apnée, ce qui semble tout à fait raisonnable.

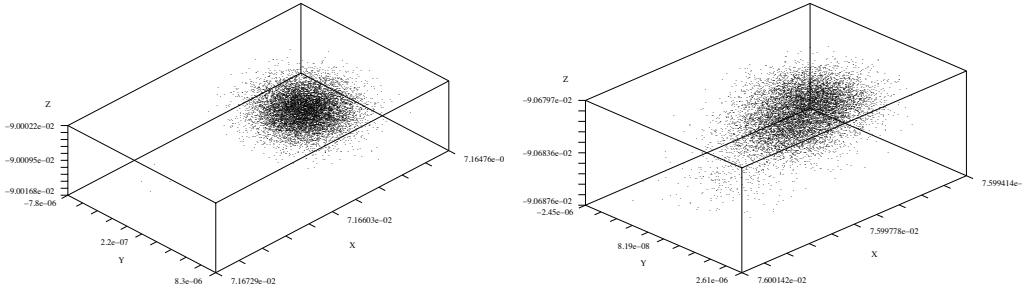


Figure 2.3: Gauche : distribution des particules pour un spray injecté. Droite : distribution des particules pour un spray inhalé.

Cette thématique a été développée depuis, voir par exemple [23] ou l'existence des solutions pour le couplage des équations de Vlasov et Navier-Stokes a été montrée, ou [24] où est étudiée l'influence rétroactive du spray sur le flux d'air.

## Chapitre 3

# Modélisation en volcanologie

Plusieurs aspects de la volcanologie font l'objet de modélisation mathématique et utilisent des simulations numériques pour comprendre ou prévoir les phénomènes complexes mis en jeu, comme par exemple : l'étude des coulées de lave ou pyroclastiques ou avalanches (voir par exemple [84]) ; la diffusion et retombée des cendres émises lors des éruptions (voir par exemple [35]). Le sujet que nous considérons est émergeant en mathématiques appliquées, et nous allons donc décrire les motivations et la physique du problème plus en détail.

L'étude des mécanismes des éruptions volcaniques est un thème intéressant du point de vue scientifique mais aussi pour la société. D'une part, cette étude est liée à la compréhension de la construction de la croûte terrestre et donc de notre planète et d'autre part elle est à la base de la prévention des risques liés aux volcans.

Les éruptions volcaniques peuvent être de deux types : explosives ou effusives. Les premières éjectent des colonnes de cendre qui peuvent mesurer plusieurs kilomètres et provoquer localement un hiver volcanique (ce qui s'est produit en Europe à la fin du XVIII siècle, suite à l'éruption d'un volcan en Islande, provoquant la famine, qui a été un des facteurs déclenchant la Révolution) ; de plus, les cendres retombent pendant plusieurs mois, rendent l'air irrespirable, et en s'accumulant peuvent causer de gros problèmes aux infrastructures humaines ; enfin, si la colonne de cendre est trop dense, elle peut produire des coulées pyroclastiques, *i.e.* des coulées composées de gaz brûlants transportant des masses considérables de lave et avançant à des vitesses supérieures à  $100 \text{ km/h}$ . Deux exemples récents d'éruptions explosives sont celle du mont Saint Hélène en 1980, et celle des volcans Pinatubo (Philippines, 1991) et Chaitén (Chili, 2008). Les éruptions effusives, comme les éruptions du Stromboli ou de l'Etna, sont moins dangereuses, et leurs effets sont limités aux alentours du volcan même ; elles sont caractérisées par l'émission séparée du magma et des gaz, cependant elles peuvent aussi produire des coulées pyroclastiques.

Le lien entre le type d'éruption et l'évolution des bulles de gaz contenues dans le

magma est clair pour les magmas visqueux (*i.e.* ceux riches en silice, dits magmas acides ou rhyolites pour ceux les plus riches en silices) : le type d'éruption pour les magmas acides est directement lié à la façon dont les bulles de gaz se comportent. Cependant, il est possible que un même volcan oscille à la fois entre ces deux types d'éruptions (par exemple Montserrat). Le magma d'un volcan ne changeant pas sa composition chimique, le type d'éruption doit être contrôlé par l'évolution des bulles de gaz dans le conduit volcanique. Nous nous intéressons donc à la modélisation, au niveau microscopique (population de bulles mono-disperses) et aussi mésoscopique (population de bulles poly-disperses), de la croissance de bulles de gaz dans les conduits volcaniques lors d'éruptions.

Le modèle de référence, en volcanologie, concernant la croissance des bulles par décompression et exsolution (*i.e.* diffusion du gaz du magma vers les bulles), est un modèle microscopique et considère les bulles de gaz comme une famille de bulles mono-disperses, *i.e.* les bulles sont supposées avoir toutes les mêmes caractéristiques physiques - rayon, masse - et évoluer en temps chacune de la même façon. Dans ce cadre, on réduit de fait l'étude à celui de l'évolution d'une seule bulle représentative. Le modèle mathématique le plus utilisé est celui initialement écrit par Scriven dans les années '50, voir [103], introduit en volcanologie dans les années '90 par Prousevitch *et al.*, voir [93] et [94], et repris plus récemment (2004) par Lensky *et al.*, voir [79]. Il s'agit de deux équations différentielles, décrivant la variation du rayon et de la masse de la bulle, couplées à une équation de diffusion, donnant le flux de gaz diffusant depuis le magma dans la bulle. Ces équations ainsi que leur analyse sont présentées en section 3.2 dans un cadre simplifié ; leur étude et simulations numériques ont fait l'objet d'une publication, [M19], et de la thèse de L. Forestier-Coste.

Cependant, plusieurs expériences de laboratoire montrent qu'il est important de prendre en compte l'aspect poly-disperse (*i.e.* le fait que les bulles ont des tailles différentes) de la population de bulles et en particulier la coalescence des bulles, ce que le modèle précédent ne peut prendre en compte. À notre connaissance, un seul travail concernant un modèle poly-disperse et considérant la coalescence des bulles a été proposé en volcanologie, voir [81]. Dans [81] l'équation considérée est une équation cinétique de type expansion-coalescence dont l'inconnue est la fonction distribution des bulles en temps et volume. Encore, le taux de croissance des bulles est donné par une fonction décrivant la croissance en volume à l'équilibre chimique et mécanique, nous avons montré que ce modèle ne reproduit pas les résultats d'une décompression hors cet équilibre. C'est pourquoi nous avons étudié et construit un nouveau modèle cinétique qui soit applicable aussi pour des simulations à fort taux de décompression.

En se basant sur l'approche cinétique et sur une étude mathématique du modèle mono-disperse, nous avons proposé un modèle cinétique, décrivant l'évolution d'une population de bulles, voir section 3.3 par le biais d'une fonction distribution dépendant du temps, du volume et de la masse de gaz dans la bulle. Ce modèle est

homogène en espace, puisque les bulles évoluent dans un fluide très visqueux et que nous supposons qu'elles remontent le conduit solidairement au magma. Le temps et la position sont donc deux variables liées, voir aussi [81], et nous choisissons de décrire l'évolution par la variable temporelle, parce que c'est la variable que nous pouvons contrôler dans les expériences de laboratoire. En effet, comme nous le verrons en section 3.1, la variable temporelle est dans ce modèle liée à la décompression subie par les bulles. La coalescence est décrite par un opérateur de type Smoluchovsky et le noyau de coalescence que nous considérons est défini et justifié à l'aide des observations physiques faites sur les images de coalescence des bulles obtenues par tomographie, voir aussi [M21]. Enfin, pour l'approximation numérique de la coalescence nous avons développé un schéma volumes finis 2D, voir [M20], qui a été validé sur des cas tests classiques en 1D et 2D, y compris la gélation. Ce schéma est détaillé en section 3.4.2, ainsi que son application à la volcanologie et que quelques tests préliminaires sur le modèle cinétique proposé. Malgré que les premiers modèles de coalescence 2D datent de la fin des années 70 (voir [82] et [97]), leur étude n'a pas été très développé, jusqu'à récemment, pour un manque de puissance computationnelle.

Ce thème de recherche fait partie du projet "ERC - jeunes chercheurs" DEMONS (Deciphering Eruptions by Modeling Outputs of Natural Systems, 2008-2012), porté par A. Burgisser (ISTO) auquel j'ai participé. Les premiers échanges scientifiques datent de 2007, lors d'un stage de Master 1, suivi par un stage de Master 2 et une thèse (L. Forestier-Coste, 2008-2012) co-encadrée avec F. James (MAPMO). Les résultats obtenus sont en cours de publication, [M19], [M20], [M21], et ont été présentés à plusieurs congrès, dont en particulier, le congrès annuel de la société de géophysique américaine (AGU-2011). Le rapprochement avec la communauté de géophysique, a conduit à l'organisation de la journée "Mathématiques et Géosciences" (dans le cadre de journées SMAI "Maths & Industries"), qui a eu lieu à Orléans en Février 2010 (avec près de 100 participants), ainsi que du mini-symposium "Mathématiques et Géosciences" dans le cadre du SMAI 2011. Ces deux événements et les discussions qui ont eu lieu lors des tables rondes ont mis en évidence les besoins mathématiques pour les géosciences : statistique, traitement des signaux et calcul scientifique.

En section 3.1 est décrit brièvement le contexte physique ainsi que l'état de l'art de la recherche dans la communauté des géosciences. Le travail que nous avons mené jusqu'à aujourd'hui est détaillé par la suite : l'étude du modèle mono-disperse en section 3.2 ; la section 3.3 concerne le modèle poly-disperse ; un schéma non-uniforme et conservant le moment d'ordre 1 de l'opérateur de coalescence est présenté en section 3.4.2, ainsi que le schéma pour la résolution du modèle poly-disperse. Enfin, section 3.6, résume quelques perspectives de recherche.

### 3.1 Problème physique

Un volcan est constitué d'une chambre magmatique, d'un ou plusieurs conduits reliant la chambre magmatique à la surface et d'un ou plusieurs cratères. Le magma est une roche partiellement ou totalement fondu qui provient de la fusion du manteau terrestre, il contient les trois états de la matière : liquide de fusion, cristaux et bulles de gaz.

Chaque éruption est caractérisée par l'évacuation d'une quantité de lave, *i.e.* du magma dégazé qui est arrivé à la surface du volcan, et des gaz provenant des bulles. Il y a plusieurs volatils présents dans les bulles de gaz, les concentrations majeures sont l'eau ou le gaz carbonique. Ces volatils sont soit dissous dans le magma, soit présents sous forme gazeuse. Toutes les éruptions impliquent une très forte décompression du magma lors de sa remontée vers la surface. Cette décompression induit la formation (par nucléation) et la croissance (par décompression et par exsolution des volatils dissous dans le liquide) des bulles de gaz.

Lors des éruptions effusives les bulles grossissent et coalescent pendant la remontée du magma, ceci permettant au gaz de s'échapper doucement ; le magma arrive dégazé à la surface et forme un dôme de lave. Lors des éruptions explosives les bulles grossissent sans coalescer ; le magma est alors rempli de gaz et fragilisé par la présence des bulles, et il fragmente en libérant dans l'atmosphère d'un seul coup gaz et morceaux de lave.

Nous nous intéressons à la modélisation de la croissance des bulles contenues dans un magma très visqueux, de leur nucléation (au tour d'une pression entre 200 et 60 MPa selon la quantité des volatils dissoute dans le magma), jusqu'à la phase de fragmentation/percolation (au tour d'une porosité de 70%), voir figure 3.1. Pendant cette phase de remontée/croissance les rayons des bulles peuvent varier de plusieurs ordres de grandeur : de quelques microns à quelques dizaines de centimètres.

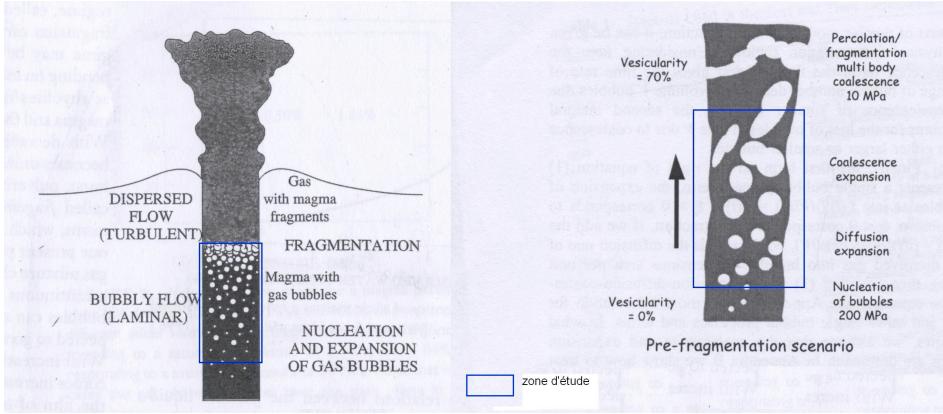


Figure 3.1: Zone d'étude du conduit volcanique. ©Lovejoy

Mis à part la difficulté et le danger d'obtenir des données naturelles, une des problèmes de l'étude de la croissance des bulles de gaz est dû à la différence des tailles caractéristiques impliquées dans la modélisation. Une bulle mesure généralement  $10^{-5} \text{ m}$  et évolue dans un conduit volcanique qui peut avoir un diamètre de  $10 \text{ m}$  et mesurer plusieurs kilomètres de longueur. L'étude et la simulation en laboratoire de la croissance des bulles de gaz dans de fragments de lave mesurant entre  $10^{-3}$  et  $10^{-2} \text{ m}$ , permettent de pallier à ce problème.

Les échantillons de magma sont saturés en eau en les laissant immerger pendant plusieurs jours à forte pression et forte température. Un saut de pression provoque la nucléation de bulles. Après avoir attendu que les échantillons atteignent l'équilibre thermodynamique, ils sont soumis à une décompression par petits sauts de pression suivis par des temps de repos pour re-établir l'équilibre. Cette décompression peut être considérée comme une décompression linéaire en temps. Les échantillons sont aussi étudiés à l'aide d'une tomographie (voir figure 3.8) et en 2D au microscope, ce qui nous permet d'avoir des mesures de rayons de bulles, à différents temps de la décompression, (comme pour les données utilisées en figure 3.7).

## 3.2 Modèle mono-disperse

Cette section concerne le modèle mono-disperse que nous avons étudié et résume les résultats les plus importants que nous avons obtenus. Par simplicité, nous allons présenter un cadre simplifié par rapport à celui étudié dans [79] : la température  $T$  est constante, ainsi que la diffusion  $D$  ; une étude du cas général est développée dans la thèse de L. Forestier-Coste.

Nous représentons, voir figure 3.2, la bulle de gaz comme une sphère de rayon  $R = R(t)$  et de masse  $M = M(t)$ , entourée par une sphère de rayon  $S = S(t)$ .

Cette dernière est dite zone ou sphère d'influence et représente le volume de magma autour de la bulle pour lequel le gaz, qui y est dissout, diffuse dans la bulle. Puisque le magma dans lequel grossit la bulle est très visqueux il est raisonnable de supposer que le volume de la sphère d'influence reste constant en temps, et que donc le rayon de la sphère d'influence vérifie :

$$S^3 - R^3 = S_0^3, \quad (3.1)$$

où  $S_0^3$  est une constante représentant le volume de la sphère d'influence supposant que le rayon  $R$  de la bulle y contenue est égale à zéro.

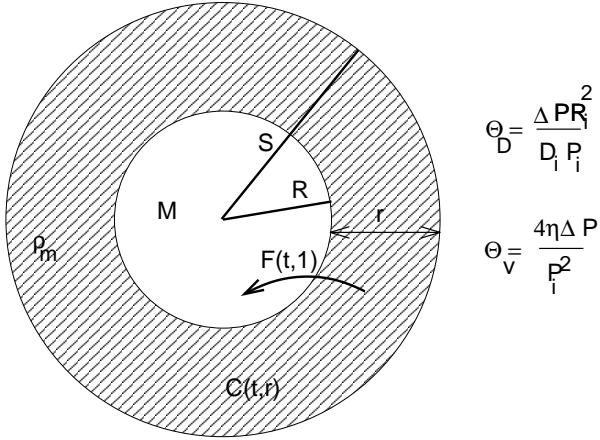


Figure 3.2: Une bulle entourée par la zone d'influence.

Nous supposons que le magma initialement soumis à une forte pression est décompressé linéairement, ce qui donne, après adimensionnement, la loi suivante pour la pression ambiante  $P_a = P_a(t)$  :

$$P_a = 1 - t, \quad (3.2)$$

faisant correspondre la décompression à une évolution temporelle du système de zéro à 1. Cette hypothèse de décompression continue est réaliste si on pense à la remonté du magma dans le conduit volcanique, cependant en laboratoire la décompression est faite par sauts de pression suivis par des temps d'arrêt pour que le système bulles-magma revienne à l'équilibre thermodynamique. Enfin, nous avons relaxé cette hypothèse soit dans l'analyse des cas limites, soit dans les simulations numériques, voir la thèse de L. Forestier-Coste, observant toujours un bon accord entre simulations numériques et résultats expérimentaux.

Suivant les travaux de [94] et [79], le système d'équations, adimensionnées, décrivant

l'évolution du rayon et de la masse s'écrit :

$$\dot{R} = \frac{R}{\Theta_V \eta_{eff}} \left( P - P_a - \frac{\Sigma}{R} \right), \quad (3.3)$$

$$\dot{M} = \frac{3\rho_m}{\Theta_D} F_R, \quad (3.4)$$

où  $P = M/R^3$  (si la température est considérée constante) est la pression de la bulle,  $P_a = P_a(t)$  est la pression ambiante, *i.e.* la pression du magma,  $\Sigma$  est la tension de surface de la bulle,  $\eta_{eff} = \eta_{eff}(t)$  est la viscosité effective du magma,  $\rho_m$  est la densité du magma,  $F_R = F_R(t)$  est le flux de gaz entrant dans la sphère qui dépend de la concentration de gaz dans la magma  $C = C(t, r)$  et que nous détaillons après. L'adimensionnement a fait apparaître dans le système d'équations (3.3)-(3.4) deux paramètres de relaxation  $\Theta_V$  et  $\Theta_D$  :

$$\Theta_V = \frac{4\eta_i \Delta P}{P_i^2}, \quad \Theta_D = \frac{R_i^2 \Delta P}{D_i P_i}. \quad (3.5)$$

où  $\eta_i$  est la viscosité initiale du magma,  $\Delta P$  est le taux de décompression,  $P_i$  est la pression initiale dans la sphère,  $R_i$  est le rayon initial de la sphère et  $D_i$  le coefficient de diffusion. Ces paramètres peuvent varier de plusieurs dizaines d'ordre de grandeurs, influençant le comportement de solutions.

Comme expliqué le gaz diffuse du magma vers la bulle. Nous supposons que initialement le gaz est distribué uniformément dans la sphère d'influence,  $C(r, 0) = C_0$ , et que la concentration  $C = C(t, r)$  est solution de l'équation d'advection-diffusion en radial :

$$\partial_t C + \frac{\dot{R} R^2}{r^2} \partial_r C = \frac{1}{\Theta_D} \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r DC), \quad r \in [R, S], t > 0 \quad (3.6)$$

complétée par une relation de solubilité au bord de la bulle ( $r = R$ ) et une condition de flux nul sur le bord externe de la sphère d'influence ( $r = S$ ) :

$$C(R, t) = C_i \sqrt{P}, \quad \partial_r C|_{r=S} = 0. \quad (3.7)$$

Dans (3.6)-(3.7),  $D$  est le coefficient de diffusion et  $C_i = K_H \sqrt{P_i}$ , avec  $K_H$  la constante de solubilité d'Henry. Il en suit que le flux  $F_R(t)$  dans (3.4) est défini par :

$$F_R(t) = \left( r^2 D \frac{\partial C}{\partial r} \right)_{r=R}. \quad (3.8)$$

Dans [79] il est développé une étude de la croissance d'une bulle à travers trois régimes selon l'intensité de la diffusivité. Notre étude analyse aussi trois régimes, définis selon le rapport entre les paramètres de relaxation  $\Theta_V$  et  $\Theta_D$  (visqueux, diffusif et à l'équilibre), et il est plus complet : nous retrouvons une des solutions

déjà étudiée dans [79], et nous proposons des nouveaux solutions pour les cas limites.

Plusieurs schémas numériques ont été proposés pour simuler les solutions du système (3.2)-(3.7), soit en dehors de la communauté de volcanologie, voir [7], [110], [111], [13], [98], soit plus récemment concernant la simulation de la croissance de bulles de gaz dans le magma, voir [94], [93], [106], [16], [79], [33]. Néanmoins tous ces schémas ne conservent pas la masse totale du système magma-gaz, alors que, au niveau continu, le système d'équations conserve la masse totale de l'ensemble bulle-magma. De plus, ces schémas demandent un très grand nombre de points de discréétisation pour la résolution de l'équation de diffusion, en particulier pour bien capturer le profil de la concentration au bord de la bulle et donc le flux entrant dans la bulle de l'équation (3.4). Enfin, le schéma introduit dans [93], qui est actuellement le schéma de référence, implique le calibrage des paramètres par l'utilisateur pour assurer la convergence et/ou la précision du schéma, et notamment la conservation de la masse totale du système.

Dans le cadre de la thèse de L. Forestier-Coste, voir aussi [M19], nous proposons un schéma numérique pour le système d'équations (3.2)-(3.7), basé sur la méthode des volumes finis, qui conserve la masse totale du gaz. Ce dernier point, a été résolu en déterminant le flux discret à l'interface bulle-magma de sorte que la masse totale discrète soit conservée. Il s'avère que le choix du maillage spatial dans la zone d'influence n'intervient pas dans la définition du flux discret. La résolution numérique de l'équation de diffusion (3.6), est aussi faite différemment que dans [94]. Nous traitons la partie advective de l'équation de façon lagrangienne, et avec un maillage non-uniforme, ce qui nous permet entre autre de réduire drastiquement le nombre de points de discréétisation en  $r$ , tout en capturant bien le profil de la concentration à l'interface bulle-magma, même quand il est très raide. La figure 3.3 montre l'évolution du profil de concentration du gaz (en pointillé) au bord de la bulle (cercles gris) ainsi que la croissance de la bulle au cours d'une décompression linéaire de la pression ambiante.

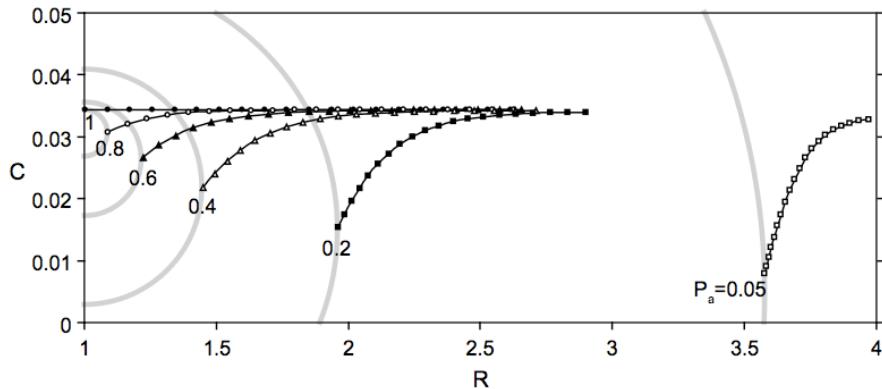


Figure 3.3: Evolution du profil de concentration au bord de la bulle.

Néanmoins, les temps de calcul dépendent fortement des paramètres de relaxation  $\Theta_V$  et  $\Theta_D$  et peuvent être très longs, notamment quand ces derniers sont très petits. D'où l'intérêt d'utiliser les modèles simplifiés quand cela est justifié. Le code de référence proposé dans [94] est beaucoup plus rapide, par rapport à la résolution du modèle complet qu'on propose, mais a des temps de calculs comparables, voir plus longs, quant à la résolution des modèles simplifiés. Encore, le code de référence nécessite la détermination d'un paramètre de calibration (dont la façon de le déterminer n'est pas clairement expliquée dans [94] et [93]) pour la résolution de l'équation d'advection-diffusion, et la résolution des équations différentielles (3.3)-(3.4) n'est pas détaillée. Enfin, le code que nous avons développé (MonoDeBuG) est actuellement utilisé par des chercheurs en géosciences (A. Burgisser et I. Shipper (ISTO, Orléans)).

Les résultats obtenus, ainsi que le temps de calcul trop onéreux, nous ont dirigés vers l'étude des cas limites du système, *i.e.* quand le rapport de  $\Theta_D/\Theta_V$  tend vers 0 (régime visqueux), ou tend à l'infini (régime diffusif) ou encore est d'ordre 1 (régime à l'équilibre). Pour certains de ces cas limites, il est possible d'expliciter des solutions analytiques du système (3.2)-(3.7), et généralement les expériences physiques se passent dans des conditions intermédiaires ( $\Theta_D$  ou  $\Theta_V$  petit), voir dans le régime dit à l'équilibre pour de valeurs de  $\Theta_D$  et  $\Theta_V$  très petits. La figure 3.4, montre la convergence numérique du code général vers les cas limites, toujours en appliquant une décompression de la pression ambiante linéaire. Cette étude nous a aussi permis de délimiter les ordres de grandeurs en  $\Theta_D$  et  $\Theta_V$  pour chaque régime.

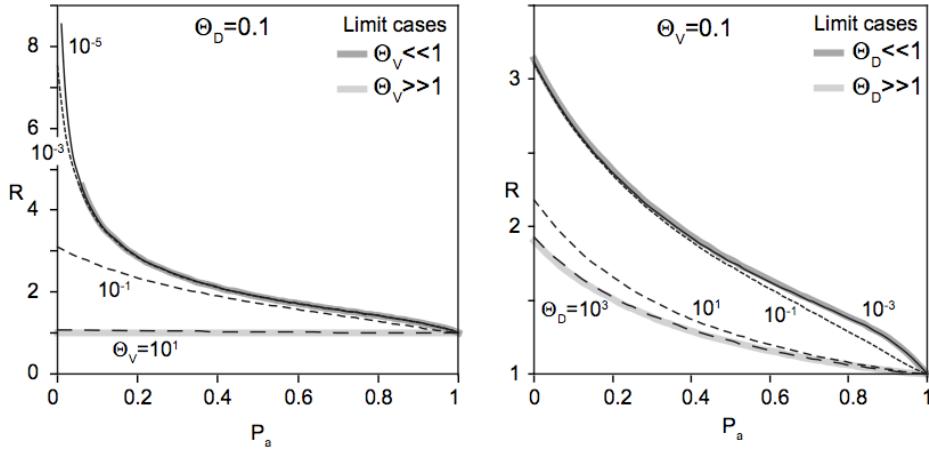


Figure 3.4: Convergence vers les cas limites.

Nous avons aussi étudié analytiquement le système (3.2)-(3.7). En particulier, nous avons souligné l'importance d'avoir des données initiales *bien préparées*, *i.e.* étant donné un rayon et une pression initiaux, la concentration du gaz dans le magma ne peut pas être choisie au hasard, mais doit être telle que le système physique soit

à l'équilibre chimique et mécanique :

$$C_0 = C_i \sqrt{P}. \quad (3.9)$$

Dans ce cas, l'évolution dans l'espace des phases  $(R, M)$  (ou ce qui est équivalent  $(R, P)$ , puisque  $P = R^3 M$ ) de la solution du système reste bornée par les courbes limites déterminées par les valeurs de  $\Theta_D$  à zéro et  $\Theta_D$  à l'infini (voir figure 3.5).

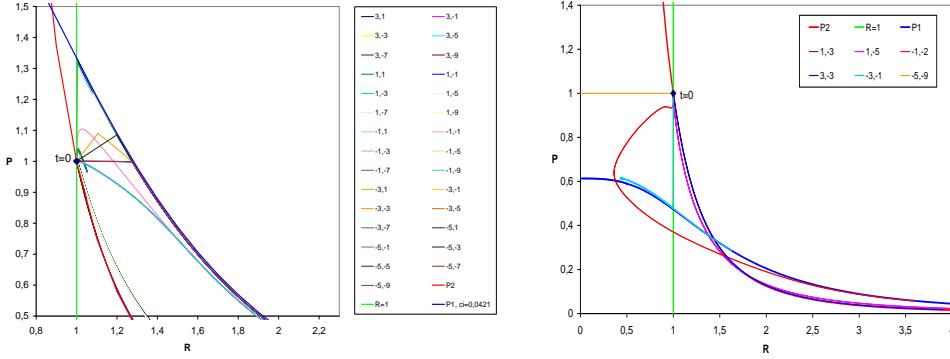


Figure 3.5: Solutions pour données initiales sur-saturées (gauche) et sous-saturées (droite) et zone d'évolution. Dans les légendes  $P_1$  et  $P_2$  correspondent aux deux courbes limites pour  $\Theta_D = 0, \infty$  respectivement.

Dans les cas contraires nous parlerons de cas sur-saturé ou sous-saturé. Généralement, si la condition initiale n'est pas bien préparée, les solutions numériques tendent à rejoindre, même par saut en rayon ou masse (pression), la zone d'évolution de l'espace des phases  $(R, M)$  précédemment décrite (voir figure 3.5). Nous montrons aussi que lorsque la concentration du gaz est trop petite, il peut n'y avoir pas de solution du système d'équations (3.2)-(3.7) tel que  $R > 0$ , ou encore le gaz peut diffuser vers le magma et les bulles rétrécir au lieu que grossir (voir la thèse de L. Forestier-Coste).

Cette étude nous a permis aussi de simplifier le couplage des équations différentielles avec l'équation de diffusion (3.6), en introduisant un taux de croissance en masse approchée,  $F_R$ , indépendant de la résolution de l'équation de diffusion. En effet, la courbe limite  $R(M(t))$  associée au paramètre  $\Theta_V = 0$  et définie implicitement par :

$$M(t) = P_a R^3 - \Sigma R^2,$$

dans l'espace de phase, agit comme un attracteur pour les solutions. De même, nous voulons que à la limite  $\Theta_D = 0$ , la courbe limite  $M_0(R(t))$  correspondant soit un attracteur pour les solutions. Nous remplaçons alors l'équation (3.4) par une nouvelle équation différentielle :

$$\dot{M} = \frac{A}{\Theta_D} (M - M_0). \quad (3.10)$$

où  $A$  est un coefficient à calibrer. Cette simplification est très importante pour le passage au cadre poly-disperse, voir la section 3.3. En figure 3.6 nous avons testé plusieurs valeurs pour  $A$  et nous constatons que  $A = 1$  est celui qui donne la meilleure comparaison. Aussi nous traçons un flux (flux de Green) obtenu par une résolution de (3.6), où nous avons négligé le terme d'advection, via le formalisme de Green. Ce dernier flux approché ne reproduit pas le comportement voulu, en particulier il ne capture pas le saut de pression observé dans la solution du système complet et dans la solution du flux (3.10). C'est pourquoi nous utiliserons le flux approché (3.10) dans le modèle cinétique.

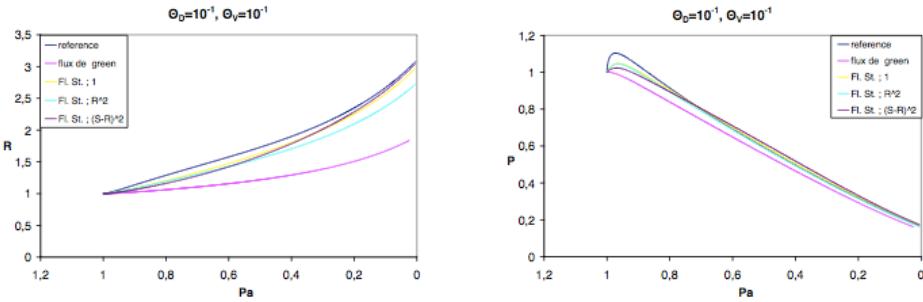


Figure 3.6: Comparaison flux système couplé et système simplifié pour  $\Theta_D = \Theta_V = 10^{-1}$ . Le rayon en fonction de  $P_a$  (gauche), la pression en fonction de  $P_a$  (droite).

La robustesse et adaptabilité du programme ont été mises à l'épreuve en simulant une centaine d'expériences physiques publiées dans ces dernières années dans des revues de géosciences (voir par exemple [28], [57], [83] et [104]). Le code donne des résultats tout à fait satisfaisants pour des modèles similaires à celui que nous avons considéré, et montre l'influence que d'autres phénomènes physiques peuvent avoir par rapport à la simple croissance des bulles par exsolution et décompression, comme par exemple la nucléation pendant la décompression, la cristallisation et la coalescence. Les résultats, font partie de la thèse de L. Forestier-Coste et sont en cours de rédaction pour publication.

À titre d'exemple, nous reportons en figure 3.7, une comparaison entre des résultats expérimentaux comportant de la coalescence et nos simulations numériques. Ces résultats montrent que le modèle mono-disperse que nous avons considéré n'est pas toujours suffisant pour l'étude de la croissance d'une population de bulles, notamment si il y a de la coalescence. Il est donc nécessaire de prendre en compte la poly-dispersion de la population de bulles. Plus particulièrement, nous traçons en figure 3.7 à gauche la porosité  $\alpha$  calculée pour différents valeurs initiales de la porosité (lignes continues ou pointillées,  $\alpha(t=0) = 0.025, 0.056, 0.035$ ) et montrons que les résultats numériques pour la valeur initiale 0.035 concordent avec la porosité calculée expérimentalement. On pourrait donc en déduire que le modèle mono-disperse est un bon choix pour cette expérience. Néanmoins, quand on compare les rayons moyens

calculés expérimentalement avec ceux calculés par les simulations numériques, figure 3.7 à droite, nous remarquons un désaccord (même si tous les résultats numériques tombent dans la barre d'erreur). Ceci est dû à la coalescence. En effet, nous remarquons que les distributions des tailles de bulles (régions grises en figure 3.7) sont très allongés, d'où un rayon moyen numérique sous-estimé par rapport à celui expérimental.

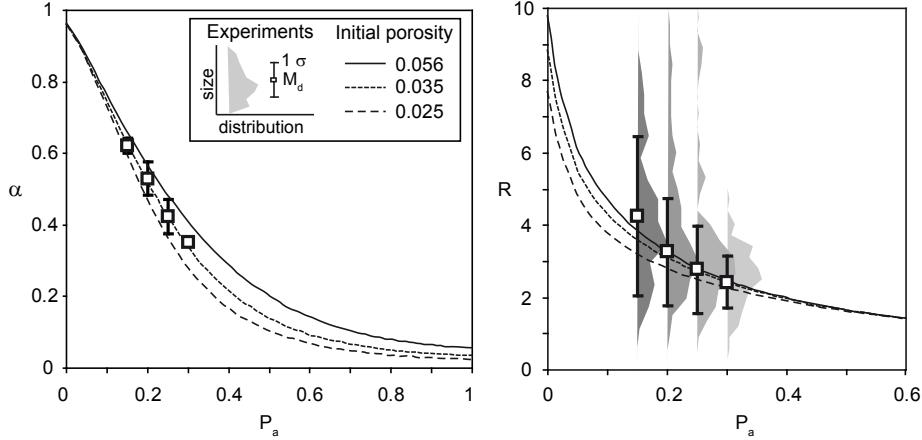


Figure 3.7: Comparaison de la porosité  $\alpha = (R/S)^3$  et du rayon  $R$  : numériques vs. expérimentales.

### 3.3 Modèle poly-disperse

Cette section présente le passage du modèle mono-disperse décrit en section 3.2, au modèle poly-disperse. Ce dernier modèle est basé sur une description statistique de la population de bulles et consiste en une équation cinétique dont l'inconnue est la fonction de distribution  $f = f(t, v, m)$  représentant la probabilité de trouver une bulle au temps  $t$  de volume  $v$  et masse  $m$ . Ces travaux font partie de la thèse de L. Forestier-Coste et sont en partie soumis pour publication, voir [M21] ou en cours de rédaction.

Rappelons rapidement ici les équations gouvernant le modèle mono-disperse pour une bulle. Nous considérons le modèle microscopique découplé, pour lequel la variation de masse du gaz dans la bulle est décrit par (3.10). Nous allons supposer la viscosité  $\eta_{eff}$ , la température  $T$  et la diffusivité  $D$  constantes en temps, et nous décrivons l'évolution d'une bulle par celle de son volume  $V$  et de sa masse  $M$  en fonction du temps  $t$ . Les équations qui régissent la variation temporelle du volume

et de la masse sont :

$$\dot{V} = \frac{3}{\Theta_V} \left( M - V(1-t) - \Sigma V^{2/3} \right), \quad (3.11)$$

$$\dot{M} = \frac{1}{\Theta_D} (M - M_0). \quad (3.12)$$

Nous pouvons associer à ce système d'équations une équation de conservation satisfait par une fonction de distribution  $f = f(t, v, m)$ . De plus, si nous considérons que les bulles de gaz peuvent aussi coalescer, la fonction de distribution  $f$ , définie sur  $[0, 1] \times \Omega$ , doit vérifier une équation de type cinétique :

$$\partial_t f + \partial_v(\Phi f) + \partial_m(\Psi f) = Q(f), \quad (3.13)$$

où les taux de croissance en volume,  $\Phi = \Phi(t, v, m)$ , et masse  $\Psi = \Psi(t, v, m)$ , sont définis à partir des équations (3.11) et (3.12), par:

$$\Phi(t, v, m) = \frac{3}{\Theta_V} \left( m - v P_a(t) - \Sigma v^{2/3} \right), \quad (3.14)$$

$$\Psi(t, v, m) = \frac{1}{\Theta_D} (M - M_0), \quad (3.15)$$

avec  $\Theta_V$  et  $\Theta_D$  les paramètres de relaxation définis par (3.5).

Nous rappelons que  $f$  est homogène en espace (indépendant de  $x$ ) et que les bulles n'ont pas de vitesse. En effet, dans cette modélisation, nous supposons les bulles stationnaires en espace, ceci est consistant avec la physique du problème, puisque les magmas considérés sont très visqueux et les bulles remontent le conduit à la même vitesse du magma.

Remarquons qu'au niveau mono-disperse le volume de la zone d'influence  $S^3$  était aussi une caractéristique physique de la bulle. Ici, nous avons choisi de moyennner la fonction distribution  $f$  par rapport à cette variable, car le taux de croissance du volume de la zone d'influence est nul, voir (3.1). Nous utilisons pour ceci la porosité  $\alpha$  du problème donnée au niveau microscopique par  $\alpha = (R/S)^3$ . Cette moyennisation n'a pas d'influence pour la partie conservative de (3.13), mais pourrait éventuellement jouer un rôle pour la définition de la coalescence. Ce point pourra être approfondi ultérieurement.

Dans (3.13), le terme de source  $Q(f)$  représente la coalescence de bulles et est défini par un opérateur de type Smoluchovsky :

$$\begin{aligned} Q(f) &= \frac{1}{2} \int_0^\omega H(t, \omega - \omega', \omega') f(t, \omega - \omega') f(t, \omega') d\omega' - \\ &\quad - f(t, \omega) \int_\Omega H(t, \omega, \omega') f(t, \omega') d\omega', \end{aligned} \quad (3.16)$$

où le premier terme, dit aussi terme de gain, compte les bulles créées par coalescence de deux bulles et donnant lieu à une bulle de paramètre  $\omega$ , et le deuxième terme,

dit aussi terme de perte, compte les bulles qui avaient un paramètre  $\omega$  avant de coalescer. Notons ici que  $\omega = (v, m)$  et que donc les intégrales dans (3.16) sont en effet des intégrales doubles.

Concernant le noyau de coalescence  $H(t, \omega, \omega')$ , dans (3.16), il représente la fréquence de coalescence des bulles ; nous demandons qu'il soit symétrique  $H(\omega, \omega') = H(\omega', \omega)$  et positif  $H \geq 0$ . Son expression analytique est généralement déterminée par le phénomène physique qu'on est en train de modéliser. N'ayant pas trouvé dans la littérature un noyau de coalescence adapté à la croissance des bulles dans les magmas visqueux, nous avons étudié plus en détail ce phénomène, voir [M21] où nous proposons deux noyaux de coalescence pour les bulles de gaz dans les magmas visqueux. Grâce à des images de tomographie 3D, nous avons observé deux types de mécanisme pour la coalescence entre les bulles : planaire, *i.e.* par élongation du film magmatique compris entre les bulles, et champignon, *i.e.* par déformation de bulles avec pénétration d'une bulle dans l'autre, voir 3.8.

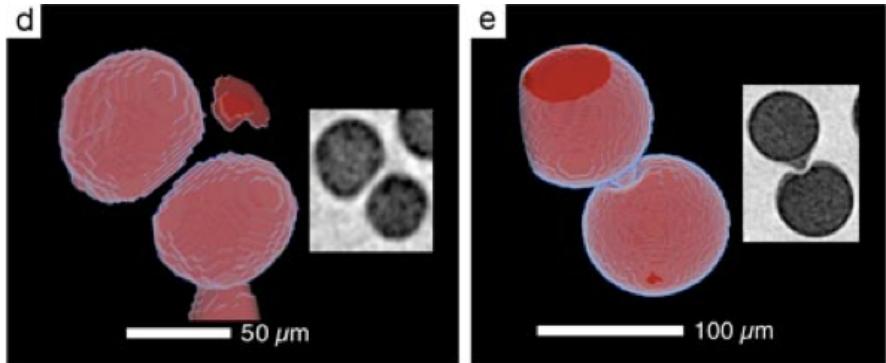


Figure 3.8: Coalescence des bulles dans un magma visqueux, par tomographie 3D. Gauche : planaire. Droite : champignon.

Ces deux mécanismes ont été étudiés et modélisés en supposant que la masse du magma compris entre les deux bulles est conservée pendant la coalescence. Nous les avons comparés à un noyau de coalescence, proposé dans [95], modélisant la coalescence par drainage du film magmatique. Nous montrons que les bulles coalescent majoritairement par le mécanisme de coalescence planaire et les fréquences de coalescences ainsi calculées ont un meilleur accord avec les expériences, voir [M21].

Pour notre modèle cinétique, nous avons considéré deux expressions similaires du noyau de coalescence : la première,  $H_s$ , basée sur des arguments ne prenant pas en compte la physique de la coalescence des bulles (planaire ou champignon), mais considérant seulement leur distance  $z(t)$  et leur vitesse de croissance du rayon  $\phi$ . La

distance peut être exprimée à l'aide de rayons  $(v')^{1/3}$  et  $(v'')^{1/3}$  et, la porosité  $\alpha$  :

$$z(t) = \left( (v')^{1/3} + (v'')^{1/3} \right) \left( \frac{1 - \alpha^{1/3}}{\alpha^{1/3}} \right), \quad (3.17)$$

où nous avons utilisé la fait que

$$\alpha = \frac{v'}{w'} = \frac{v''}{w''},$$

avec  $w'$  et  $w''$  les volumes des sphères d'influence. Les vitesses de croissance des rayons,  $\phi' = \phi(t, v', m')$  et  $\phi'' = \phi(t, v'', m'')$  sont liées aux vitesses de croissance des volumes  $\Psi' = \Psi(t, v', m')$  et  $\Psi'' = \Psi(t, v'', m'')$  données par (3.11) et (3.12) :

$$\phi' = 3(v')^{2/3}\Psi', \quad \phi'' = 3(v'')^{2/3}\Psi''.$$

Le noyau de coalescence est alors défini par :

$$H_s(t, \omega', \omega'') = \left( \frac{\phi' + \phi''}{z_0} \right)_+; \quad (3.18)$$

il représente l'inverse du temps pour que les bords des deux bulles se touchent.

La deuxième expression du noyau,  $H_p$ , est basé sur les résultats de [M21] pour la coalescence planaire. En considérant la masse de magma comprise entre les bulles et en imposant sa conservation jusqu'à la rupture du film magmatique, nous obtenons :

$$H_p(t, \omega', \omega'') = \left( \frac{\phi' + \phi''}{\varepsilon ((v')^{1/3} + (v'')^{1/3})} \frac{\sqrt{z_f}}{\sqrt{z_0} - \sqrt{z_f}} \right)_+. \quad (3.19)$$

Nous dénotons les deux opérateurs de coalescence associées par  $Q_s(f)$  et  $Q_p(f)$ .

Dans (3.18) et (3.19),  $z_0$  est la distance initiale des parois des bulles et les paramètres  $\varepsilon$  et  $z_f$  représentent respectivement la portion des bulles qui est aplatie et l'épaisseur minimum du film magmatique avant rupture. La porosité  $\alpha(t)$ , *i.e.* la fraction du vide dans le magma, est définie, en analogie au cadre mono-disperse, comme le volume occupé par les bulles par rapport au volume total, et peut être calculé à tout temps en utilisant le moment d'ordre 1 de la solution.

Pour conclure la modélisation de la coalescence, il faut aussi déterminer comment se combinent les grandeurs physiques, *i.e.* le volume  $v$  et la masse  $m$ , de deux bulles qui coalescent. Nous avons supposé que deux bulles  $(v', m')$  et  $(v'', m'')$  qui coalescent donnent lieu à une bulle  $(v, m) = (v' + v'', m' + m'')$ . Cette hypothèse est justifiée en ce qui concerne la masse  $m$ , mais ceci n'est pas le cas pour le volume  $v$ , car masse, volume et pression sont liées par la loi des gaz parfaits. Nous rappelons que dans le cadre de cette modélisation  $m$  et  $v$  sont deux variables indépendantes. En effet, les bulles de gaz peuvent ne pas être à l'équilibre chimique et/ou mécanique. Ceci est une différence essentielle par rapport aux travaux sur la coalescence plus classiques

comme ceux concernant les polymères, voir par exemple [6].

Nous montrons que le noyau de nos opérateurs de coalescence,  $\text{Ker}(Q_s)$  et  $\text{Ker}(Q_p)$ , sont caractérisés par l'ensemble des fonction  $f = f(t, v, m)$  de la forme :

$$f(t, v, m) = \begin{cases} 0 & m \geq \Sigma v^{2/3} \\ g & \text{sinon,} \end{cases} \quad (3.20)$$

où  $g = g(t, v, m)$  est n'importe quelle fonction positive. Les fonctions vérifiant (3.20) sont des solutions stationnaires de l'équation  $\partial_t f = Q(f)$  : *i.e.* si la donnée initiale  $f(0, v, m)$  est contenue dans la région  $m < \Sigma v^{2/3}$ , comme il n'y a pas ni croissance ni coalescence, alors aucune bulle peut grossir, et donc la solution restera indéfiniment dans cette région. Ce résultat a été aussi vérifié numériquement (voir thèse de L. Forestier-Coste). A titre d'exemple, en figure 3.9, nous montrons la différence de l'évolution des solutions relatives aux opérateurs  $Q_p$  (gauche) et  $Q_s$  (droite) à un temps donné et en partant d'une donnée initiale définie hors de cette région. L'opérateur  $Q_s$  a plus diffusé, *i.e.* la coalescence est plus forte pour cet opérateur.

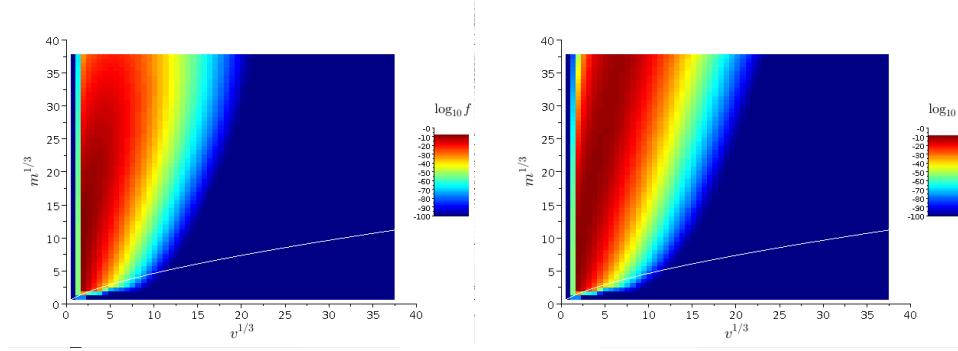


Figure 3.9: Solution pour coalescence pure avec donnée initiale égale à zéro dans la région de rétrécissement :  $Q_p$  (gauche) et  $Q_s$  (droite).

## 3.4 Discretisation

Nous avons choisi de discréteriser le modèle cinétique présenté en section 3.3 par une méthode de volumes finis et avec un splitting temporel entre la partie "transport" (à gauche de l'égalité) et l'opérateur de coalescence (à droite de l'égalité). Les deux discréterisation sont expliquées par la suite. En particulier, la discréterisation pour la partie coalescence (voir section 3.4.2), que nous proposons est soumise pour publication, voir [M20].

### 3.4.1 Schéma numérique pour le transport

Soit  $t^k$  une discréterisation du temps  $t$  et  $\Delta t^k = t^{k+1} - t^k$  le pas de temps, et notons par  $f^k$  la fonction distribution au temps  $t^k$ ,  $f^k = f(t^k, v, m)$ . Étant donné que le pas

de temps de la partie transport serait contrôlé par une résolution en explicite par le minimum des paramètres de relaxation  $\Theta_V$  et  $\Theta_D$  et que ces derniers sont souvent très petits (de l'ordre de  $10^{-7}$  voir plus), nous avons discrétisé la partie transport de l'équation (3.13) en implicite. Ainsi le pas de temps sera fixé par l'étape de coalescence.

Nous remarquons que le schéma numérique résolvant en premier la partie coalescence et ensuite la partie transport donne une résolution consistante avec l'équation cinétique (3.13). En fait, soit  $\tilde{f}^{k+1}$  le résultat d'un pas de calcul pour la coalescence:

$$\tilde{f}^{k+1} = f^k + \Delta t^k Q(f^k),$$

alors la partie transport discrétisée en implicite s'écrit :

$$f^{k+1} \left( 1 + \Delta t^k \left( \partial_v(\Phi(t^{k+1}, v, m)) + \partial_m(\Psi(t^{k+1}, v, m)) \right) \right) = \tilde{f}^{k+1},$$

ce qui donne :

$$\frac{f^{k+1} - f^k}{\Delta t^k} + \partial_v(\Phi(t^{k+1}, v, m)) + \partial_m(\Psi(t^{k+1}, v, m)) = Q(f^k).$$

Avant de détailler la résolution numérique de la partie transport par rapport aux variables  $v$  et  $m$ , nous introduisons la discrétisation des espaces en  $v$  et  $m$ . Les données expérimentales nous fournissent que une distribution des bulles en fonction de leur rayon, et nous avons donc besoin de définir aussi une discrétisation en masse. Pour ceci, nous considérons que les mesures sont prises pour des bulles à l'équilibre, et donc la masse sera définie en utilisant (3.12). Nous considérons ainsi le maillage suivant :

$$v_{i-1/2} = \left( \frac{R_0 + i\Delta R}{R_m} \right)^3, \quad m_{i-1/2} = v_{i-1/2} + \Sigma v_{i-1/2}^{2/3},$$

avec  $R_m$  le rayon moyen de l'échantillon initial,  $R_0$  le plus petit rayon considéré,  $\Delta R$  la pas du maillage uniforme en rayon (fourni par l'échantillonnage) et  $\Sigma$  la tension de surface adimensionnée.

Pour la résolution en implicite de la partie transport

$$\partial_t f + \partial_v \Phi f + \partial_m \Psi f = 0,$$

nous considérons un splitting directionnel. Pour la discrétisation en  $v$  (celle en  $m$  étant analogue), en réorganisant les éléments  $f_{ij}^k = f(t^k, v_i, m_j)$  de la matrice de distribution dans un vecteur colonne  $X_h^k$ , avec  $h = i + jN$ , où  $N$  est le nombre de points de discrétisation, nous nous ramenons à un problème de transport de type :

$$D_{h,h-1}^{k+1} X_{h-1}^{k+1} + D_{h,h}^{k+1} X_h^{k+1} + D_{h,h+1}^{k+1} X_{h+1}^{k+1} = X_h^k$$

avec  $D$  matrice tridiagonale, inversée par une méthode LU. Ainsi nous n'avons pas de problèmes de stabilité du schéma et le pas de temps sera fixé par la discrétisation de l'opérateur de coalescence.

### 3.4.2 Schéma numérique pour la coalescence

Cette section concerne le schéma volumes finis que nous avons développé et utilisé pour la simulation de la coalescence des bulles de gaz, ainsi que sa validation numérique. Les résultats détaillés dans cette partie sont décrits sur un modèle bi-dimensionnel quelconque et sont soumis pour publication, voir [M20]. Nous rappelons que, suite à la modélisation présentée en section 3.3, nous avons besoin de développer un code pour la coalescence bi-dimensionnelle que l'on souhaite coupler avec le code pour la partie transport de l'équation cinétique (3.13).

Nous considérons ici que la fonction de distribution  $f$  dépend du temps  $t$  et de la variable  $\vec{x} \in \mathbb{R}^d$ , et qu'elle satisfait à une équation de type Smoluchowski, [105] :

$$\begin{aligned} \partial_t f(t, \vec{x}) = & \frac{1}{2} \int_0^{\vec{x}} H(\vec{x}', \vec{x} - \vec{x}') f(t, \vec{x}') f(t, \vec{x} - \vec{x}') d\vec{x}' \\ & - \int_0^{\infty} H(\vec{x}, \vec{x}') f(t, \vec{x}) f(t, \vec{x}') d\vec{x}', \end{aligned} \quad (3.21)$$

où  $H(\vec{x}, \vec{x}') \geq 0$  est le noyau de coalescence et représente la fréquence de coalescence de deux particules de paramètres  $\vec{x}$  et  $\vec{x}'$ . Dans cette section, pour valider le schéma numérique, nous avons considéré des noyaux de coalescence de la forme :

$$H(x, x') = x^\mu (x')^\nu + x^\nu (x')^\mu, \quad 0 \leq \mu \leq \nu \leq 1. \quad (3.22)$$

En particulier, nous avons considéré : le noyau constant,  $H(x, x') = 1$ , ou le noyau additif,  $H(x, x') = x + x'$ , ou encore le noyau multiplicatif,  $H(x, x') = xx'$ . L'équation (3.21) munie de ces noyaux admet des solutions explicites, d'où l'intérêt de valider notre schéma sur ces cas test particuliers.

Avant de détailler les résultats obtenus, nous rappelons ici, dans le cadre unidimensionnel,  $d = 1$ , (pour simplifier les notations), quelque résultat théorique connu concernant l'équation (3.21). Sous des hypothèses de régularité, nous définissons les moments d'ordre  $p$  de la solution  $f(t, x)$  de (3.21) comme :

$$\mathcal{M}_p(t) = \int_{\mathbb{R}_+} x^p f(t, x) dx. \quad (3.23)$$

**Proposition 3.4.1** *Soit  $f(t, x)$  une solution de l'équation de Smoluchowski (3.21), alors :*

- i. pour tout  $p < 1$ , les moments  $\mathcal{M}_p(t)$  sont décroissantes en temps;
- ii. pour  $p = 1$ , les moments  $\mathcal{M}_p(t)$  sont constantes en temps,
- iii. pour tout  $p > 1$ , les moments  $\mathcal{M}_p(t)$  sont croissantes en temps.

Du point de vue physique, la proposition 3.4.1 s'interprète ainsi : quand il y a coalescence le nombre des particules (*i.e.* le moment d'ordre 0) décroît alors que leur "masse" (*i.e.* le moment d'ordre 1) est constante. Cependant, pour le noyau multiplicatif  $H(x, x') = xx'$ , le moment d'ordre 1 n'est pas constant, et il existe un temps  $t^*$  tel qu'il décroît, nous parlons alors de gélation, *i.e.* la création de particules de dimension infinie en un temps fini (voir par exemple [45], [1], [50], [49]).

Ces résultats sont valables aussi dans le cas  $x = (x)_{i=1 \dots d} \in \mathbb{R}_+^d$  avec  $d > 1$ . Les moments d'ordre  $p$  sont définis alors par :

$$\mathcal{M}_{p_1, \dots, p_d} = \int_{\mathbb{R}_+^d} \prod_{i=1}^d x_i^{p_i} f(t, \vec{x}) d\vec{x},$$

où les  $p_i$  sont tels que :

$$p = \sum_{i=1}^d p_i.$$

De cette définition, on en déduit que en plusieurs dimensions il y a plusieurs moments d'ordre 1 qui sont conservés en temps, par exemple en deux dimensions ( $d=2$ ) :  $\mathcal{M}_{1,0}$  et  $\mathcal{M}_{0,1}$ . De plus si ces deux moments sont conservés, alors aussi toute combinaison linéaire est aussi conservée, comme par exemple  $\mathcal{M}_{1,0} + \mathcal{M}_{0,1}$ .

Ces dernières années, la résolution numérique des équations de coalescence a été beaucoup étudiée, et par le biais des schémas déterministes (voir par exemple [48], [52], [73], [74], [96] et [76]), et par celui des schémas stochastiques (voir par exemple [8], [36], [46], et [47]). Il y a plusieurs aspects à prendre en compte lors de la discréétisation de l'équation (3.21). Premièrement, il faut choisir une troncature pour le calcul de l'intégrale représentant le terme de perte. Ce choix peut fortement influencer la précision du résultat numérique, en particulier lorsque le noyau de coalescence induit une croissance très rapide (par exemple, le noyau multiplicatif). Ensuite, le choix du maillage pour la variable  $x$  : maillage uniforme ou non-uniforme. Dans le premier cas, nous allons considérer un pas de discréétisation en espace constant,  $\Delta x$ . Ce choix, qui paraît le plus simple en utilisation, est de fait le moins adapté, car étant trop fin pour les grandes volumes de  $x$ , il implique des temps de calcul trop longs (voir prohibitifs) pour l'étude de l'évolution sur des domaines grands. Le deuxième choix, maillage non-uniforme, considère des pas d'espace variables selon le point de discréétisation qu'on regarde,  $\Delta x_j$  : par exemple, pour la modélisation en volcanologie, le maillage naturel suit une loi cubique:  $x_j = (j\Delta x)^3$ . Nous remarquons numériquement que ce deuxième choix admet des temps de calcul plus petits par rapport au choix du maillage uniforme. Ainsi, il permet d'étudier l'évolution sur des domaines plus grands, et de choisir une troncature plus grande dans l'intégrale du terme de perte. Par contre, le choix du maillage non-uniforme implique le traitement du chevauchement de particules créées par rapport à plusieurs mailles du maillage. En effet, comme nous pouvons le montrer via le théorème de Fermat (voir [112]), quand deux particules de paramètres respectifs  $x_j$  et  $x_k$  coalescent en une particule de paramètre  $x_i$ , cette

dernière ne correspond pas exactement à une maille du maillage, mais sera à cheval entre deux ou plusieurs mailles, voir figure 3.10.

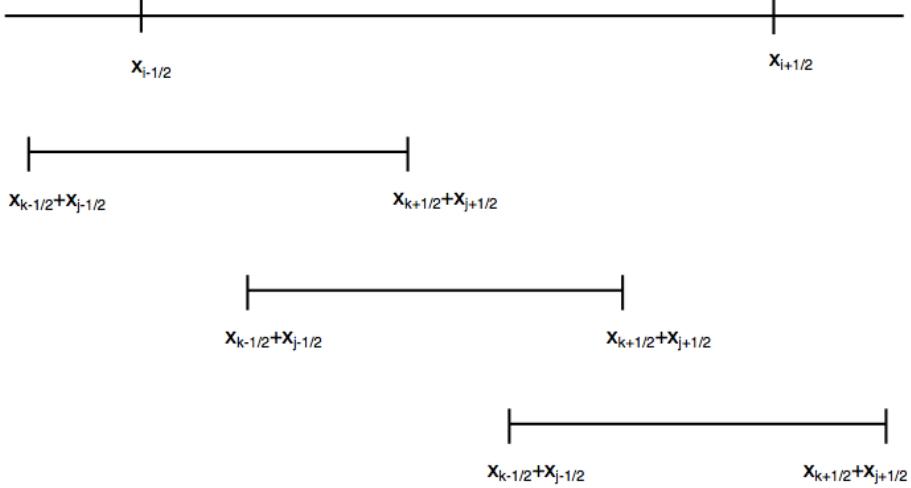


Figure 3.10: Chevauchement

Enfin, comme rappelé le moment d'ordre 1 est constant en temps, au moins pour les noyaux de coalescence qui ne croissent pas trop rapidement. Dans [M20], nous proposons une discréétisation de l'équation (3.21) par un schéma préservant le moment d'ordre 1 au niveau discret :

$$f_i^{n+1} = f_i^n + \Delta t^n \left( \frac{1}{2} \sum_{(j,k) \in S^i} \tilde{H}_{j,k} f_j^n f_k^n \lambda_{j,k}^i \frac{\Delta x_j \Delta x_k}{\Delta x_i} - \sum_{j=0}^{\infty} H_{i,j} f_i^n f_j^n \Delta x_j \right) \quad (3.24)$$

où  $\tilde{H}_{j,k}$  est un noyau modifié de façon à assurer la conservation du moment d'ordre 1,  $\lambda_{j,k}^i$  est un coefficient de proportionnalité qui prend en compte le chevauchement. et, pour toute maille  $i$ , le terme  $\sum_{(j,k) \in S^i}$  représente la double somme sur tous les mailles  $k$  et  $j$  telles que l'intersection de leur somme avec la maille  $i$  est non-vide. Ce schéma gère aussi bien les maillages uniformes que ceux non-uniformes, il prend en compte les chevauchements et il préserve, par construction, le moment d'ordre 1 discret.

Nous avons montré que la gélation est bien reproduite par notre schéma. Nous comparons nos résultats en particulier avec ceux de [52] et [74], pour le cas 1D, et [96], pour le cas 2D. Dans ces papiers, les schémas numériques conservent le moment d'ordre 1 (puisque basés sur une formulation conservative de l'équation (3.21)) :

$$x \partial_t f = -\partial_x \int_0^x \int_{x-x'}^{\infty} x' H(x', y) f(y) f(x') dy dx,$$

et considèrent des maillages non-uniformes.

Reportons ici quelques résultats numériques. Figure 3.11, concernant le noyau  $H(x, x') = x + x'$ , montre l'évolution temporelle des moments d'ordre 0, 1, 2 et 3 obtenus numériquement (lignes pointillées), en comparaison avec les expressions analytiques (lignes continues) que sont connues pour la donnée initiale  $f(0, x) = Ce^{-x}$ , voir [M20]. Il est mis en évidence la décroissance du moment d'ordre 0, la conservation du moment d'ordre 1, et la croissance de plus en plus rapide des moments d'ordres plus grands que 1.

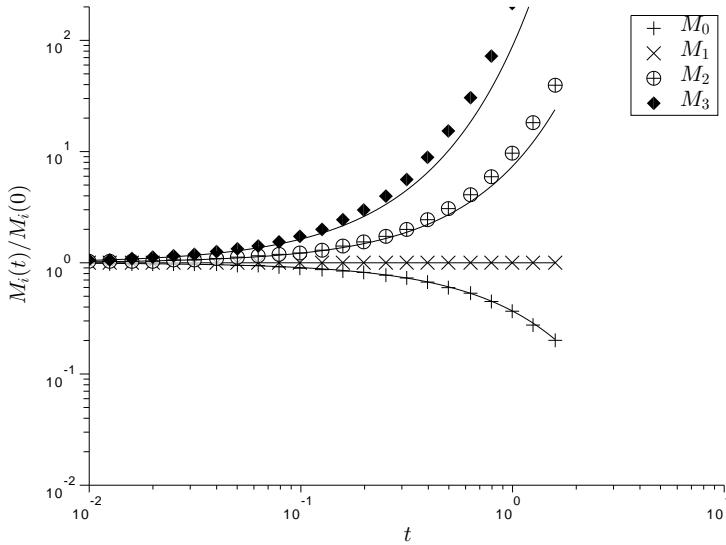


Figure 3.11:  $H(x, x') = x + x'$ : moments d'ordre 0, 1, 2 et 3.

Figure 3.12, concernant le noyau  $H(x, x') = xx'$ , montre une comparaison entre les moments d'ordre 1 calculés à partir des simulations numériques et ceux donnés par les formules analytiques, pour des maillages uniformes (gauche) et des maillages non-uniformes (droite). Comme pour le noyau additif, les expressions analytiques des moments sont connues pour la donnée initiale  $f(0, x) = e^{-x}/x$ , voir [M20] pour plus de détails. Il est mis en évidence l'intérêt de l'utilisation des maillages non-uniformes. En effet, ces derniers permettent de calculer la solution sur des domaines plus grands, réduisant ainsi l'erreur due au choix de la troncature (il faut choisir une valeur maximale  $x_{max}$  pour le calcul des intégrales), et ceci avec un coût en terme de CPU plus petit que pour les maillages uniformes (on gagne un ordre de grandeur). La décroissance très rapide du moment d'ordre 1, est due à la gélation, et elle est aussi mieux capturée en utilisant des maillages non-uniformes. En comparant les résultats pour les différents maillages non-uniformes, il apparaît que le maillage 6

avec une troncature plus grande permet de mieux approcher l'endroit où la gélation a lieu. Concernant les maillages 5 et 7 nous remarquons que le maillage 7 approche mieux la solution tronquée, ce qui est naturel ayant le maillage 7 le double de points par rapport au maillage 5.

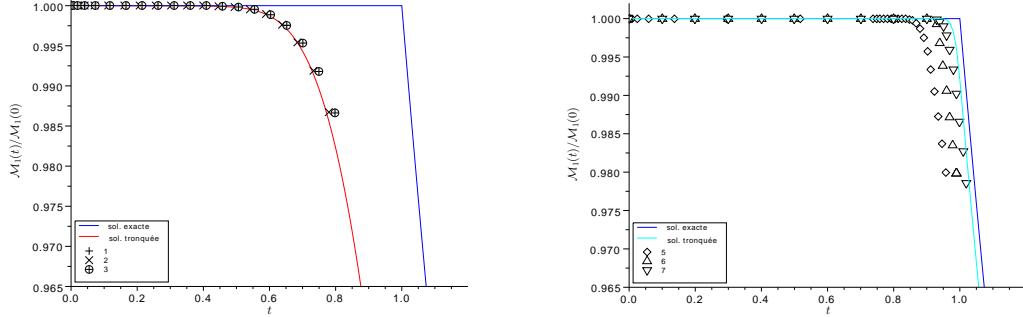


Figure 3.12:  $H(x, x') = xx'$ : maillages uniformes (gauche) et maillages non-uniformes (droite). Les courbes 1, 2, 3 correspondent à trois maillages uniformes avec 50 points et pas d'espace 0.1, 0.5 et 0.01 ; la courbe 5 correspond au maillage non-uniforme  $x_i = x_{\max} 2^{(i-N)/3}$  avec  $N = 150$  et  $x_{\max} = 5000$  et la courbe 7 à le doubles de points que 5. Pour la courbe 6 nous avons  $x_{\max} = 500000$ , et  $N = 165$ .

Dans le cas bi-dimensionnel, nous considérons que le noyau  $H(\vec{x}, \vec{x}') = 1$  et nous comparons nos résultats avec ceux présentés dans [96], ainsi qu'avec les solutions explicites qu'y sont présentées. En figure 3.13, nous montrons la solution donnée par nos simulations numériques (gauche), et nous comparons les moments d'ordre 0, 1 et 2 avec ceux donnés par les expressions analytiques, voir [M20] pour plus de détails. En particulier, notre solution ne montre pas d'irrégularités, comme celle de [96], mais diffuse beaucoup moins aux extrema du domaine et plus au niveau de la diagonale ( $x = y$ ). Enfin, notre schéma capture mieux les moments d'ordre plus grand que 1.

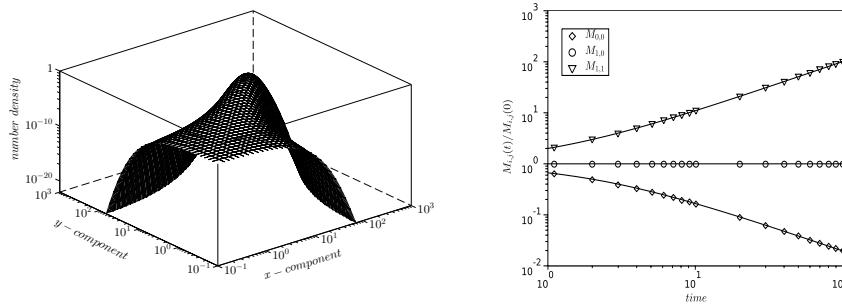


Figure 3.13: Solution numérique (gauche). Moments d'ordre 0, 1, et 2 (droite).

### 3.5 Application à la volcanologie

Nous sommes en mesure maintenant de simuler les solutions du modèle cinétique et de les comparer avec les expériences de laboratoire. Je reporte dans les figures qui suivent les résultats numériques d'un calcul du modèle poly-disperse sans et avec la coalescence.

Nous rappelons le modèle cinétique que nous considérons:

$$\partial_t f + \partial_v (\Phi f) + \partial_m (\Psi f) = \zeta Q(f), \quad (3.25)$$

où  $\Phi$  et  $\Psi$  sont donnés respectivement par (3.14) et (3.15). Nous complétons le modèle par des conditions aux bords de sortie libre et en considérant des données initiales déterminées par les mesures expérimentales et définies par un ensemble de Dirac sur plusieurs mailles  $(i, j)$  de la diagonale,  $i = j$ .

Nous avons multiplié l'opérateur de coalescence par un paramètre  $\zeta$  (noté *zeta* dans les figures). L'interprétation physique de  $\zeta$  est encore en voie d'étude, nous pensons qu'il peut être vu comme un coefficient d'efficacité, ou un temps de relaxation. Nous verrons plus tard et sur un exemple l'influence qu'il peut avoir sur les résultats. Nous présentons d'abord des résultats numériques permettant de valider le modèle sans coalescence, en particulier suite à l'approximation du flux définissant la variation de la masse voir (3.10).

En figure 3.14 nous comparons un rayon calculé en appliquant le modèle mono-disperse décrit en section 3.2 avec le modèle mono-disperse où nous avons remplacé l'équation d'advection-diffusion par (3.10) et avec un rayon moyen calculé en utilisant le modèle poly-disperse décrit en section 3.3 et sans coalescence. La solution du modèle poly-disperse (edp) démarre d'une valeur légèrement plus grande que la solution du modèle mono-disperse général (edo gen). Cette différence est due à la difficulté de traduire la donnée initiale pour le modèle poly-disperse et après une phase de légère sur-évaluation elle disparaît à la fin de la décompression. La solution du modèle mono-disperse simplifié (edo simpl) démarre du même point que la solution du modèle mono-disperse général et reste tout le temps sous-évaluée. Ceci étant les résultats sont tout à fait satisfaisants et le modèle poly-disperse reproduit fidèlement l'évolution d'un ensemble mono-disperse de bulles.

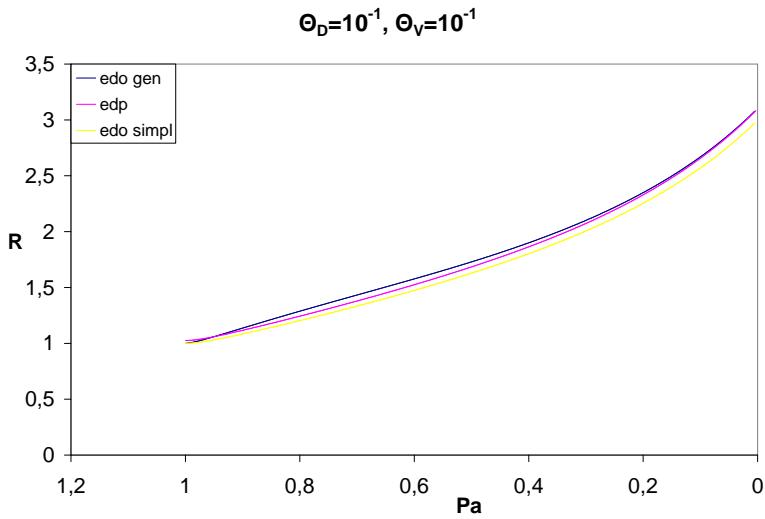


Figure 3.14: Comparaison modèle mono-disperse et poly-disperse.

En figure 3.15 (gauche), nous montrons une comparaison entre plusieurs solutions numériques du modèle poly-disperse avec coalescence et un jeu de données expérimentales pris dans [28]. En multipliant l'opérateur de coalescence  $Q$  par un paramètre  $\zeta$  nous voyons que plus  $\zeta$  est grand ( $\zeta = 10^{-5}$ ), plus la coalescence est importante et la croissance des rayons est trop rapide (courbe jaune perte des bulles du domaine du calcul), par contre plus  $\zeta$  est petit ( $\zeta = 10^{-15}$  ou  $10^{-10}$ ), plus la coalescence est petite et n'arrive pas à influencer la croissance des bulles. La valeur intermédiaire  $\zeta = 10^{-8}$ , donne un résultat approchant mieux les valeurs expérimentales. Concernant la porosité  $\alpha = \mathcal{M}_{1,0}/(\mathcal{M}_{1,0} + V_m)$ , où  $V_m$  est le volume du magma supposé constant, nous remarquons que pour le cas étudié, le paramètre  $\zeta$  n'a pas d'influence sur le résultat, et que la porosité a toujours le même comportement en temps, voir figure 3.15 (droite). Ce résultat était attendu puisque comme nous l'avons dit, la coalescence conserve les moments d'ordre 1, et que l'expérience est à l'équilibre. Lorsque la croissance est faite hors équilibre (par exemple avec une très forte décompression), la porosité sans ou avec coalescence n'aurait plus le même comportement.

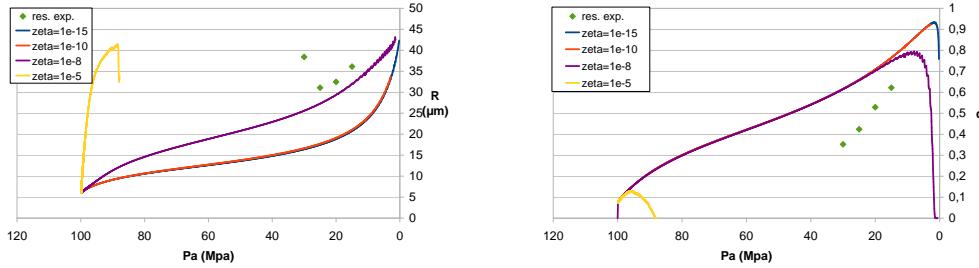


Figure 3.15: Modèle complet : rayon moyen  $R$  (gauche) et porosité  $\alpha$  (droite).

Ces premiers tests numériques sont encourageants et nous indiquent que le modèle proposé est réaliste et peut donner des résultats satisfaisants. Plus de validations sont en cours, pour caractériser le domaine de validité du modèle poly-disperse.

### 3.6 Perspectives

Les résultats présentés dans ce chapitre sont le fruit de plusieurs années de travail et discussions avec A. Burgisser (ISTO). Les codes numériques développés dans la thèse de L. Forestier-Coste (MonoDeBuG et PolyDeBuG) sont disponibles et celui pour le modèle mono-disperse est actuellement utilisé par un autre chercheur en géosciences de l'ISTO. Le modèle poly-disperse que nous avons développé néglige un certain nombre de phénomènes physiques, mais prend en compte la coalescence, et de taux de croissance en volume et masse hors équilibre. Un article détaillant le modèle poly-disperse est en préparation, ainsi qu'un autre concernant l'application du modèle mono-disperse à plusieurs résultats expérimentaux publiés dans les dernières 20 années. Le code pour le cas poly-disperse (PolyDeBuG) est prêt à être testé et validé sur les expériences et en prenant en compte des noyaux de coalescence différents, comme ceux proposés dans [M21]. Cependant sa résolution est assez coûteuse en terme de CPU. Pour pallier à ce problème nous envisageons plusieurs possibilités, par exemple :

- s'appuyer sur les modèles simplifiés introduits dans l'étude du modèle mono-disperse pour réduire les variables en jeu ;
- étudier l'asymptotique pour  $\Theta_D$  et/ou  $\Theta_V$  à zéro pour le modèle poly-disperse vers un modèle simplifié macroscopique ;
- le temps de calcul étant long à cause du terme de coalescence, considérer d'autres approches numériques, comme les méthodes spectrales.

L'analyse et les simulations numériques relatives au modèle mono-disperse, montrent qu'il est possible d'utiliser dans certains cas limites des modèles moins coûteux

en terme de temps de calcul. De plus, il apparaît que la majorité d'expériences appartient au cas limite  $\Theta_D$  et  $\Theta_V$  petits, pour lequel nous avons une expression analytique liant masse et rayon de la bulle. Il est donc possible de dériver d'autres modèles poly-disperses à partir des cas limites déterminés lors de l'étude du modèle mono-disperse.

Il reste des aspects plus théoriques que nous n'avons pas approfondi pour le moment pour faute de temps (la priorité en volcanologie étant plutôt d'avoir des codes permettant des comparaisons numériques que des résultats théoriques) : montrer l'existence et unicité des solutions pour le modèle mono-disperse ; donner une caractérisation plus rigoureuse de l'équation (3.10) simplifiant le couplage système d'équations différentielles et équation d'advection-diffusion ; caractérisation physique et/ou mathématique des paramètres  $A$  dans (3.10) et  $\zeta$  dans (3.25).

Egalement, il y a plusieurs pistes ouvertes au niveau de la modélisation : par exemple nous pouvons prendre en compte de modèles plus complexes pour la coalescence des bulles. En effet, il apparaît dans les images de tomographie 3D que les bulles ne reviennent pas forcément à une forme sphérique, mais qu'elles forment des chaînes de bulles et le gaz peut s'échapper plus facilement par ces chaînes. Une façon de prendre en compte cette déformation pourrait être de considérer les bulles de gaz comme des ellipses, et une façon d'évaluer la capacité du gaz à s'échapper pourrait être de définir un coefficient de "tortuosité".

Un des buts du projet ERC-DEMONS étant le couplage du modèle pour la croissance des bulles avec le code MFIX simulant l'évolution du magma, modélisé par les équations de Navier-Stokes incompressible, il faudrait prendre aussi en compte la position des bulles et leur vitesse. Dans un premier temps, nous avons considéré que la vitesse des bulles et celle du magma étaient les mêmes (celle du magma). Cependant, lorsque la porosité devient assez grande l'évolution des bulles pourrait rétro-agir sur le magma. Cette perspective rejoint la modélisation des aérosols, voir la section 2.2, où un couplage fluide-cinétique est envisagé, néanmoins la physique de deux problèmes est très différente.

## Chapitre 4

# Neurosciences computationnelles

Depuis le travail de Hodgkin et Huxley (récompensés par le Nobel pour la médecine en 1963, voir [67]), la modélisation mathématique en neurosciences a pris de plus en plus d'ampleur ; plusieurs systèmes d'équations sont aujourd'hui proposés et étudiés pour une meilleure compréhension de l'influence des paramètres sur le fonctionnement des neurones. Avant de détailler l'axe de recherche auquel j'ai travaillé, je présente brièvement la structure et le fonctionnement d'un neurone, ainsi qu'un succinct historique de sa modélisation mathématique.

On estime que dans le cerveau humain il y a environs  $10^{11}$  neurones. Le neurone est la seule cellule capable de coder et de transmettre des informations (stimuli) dans le système nerveux. Il est constitué principalement de quatre éléments : le soma ou corps cellulaire, les dendrites, l'axone et les terminaisons neuronales ou synapses, voir figure 4.1.

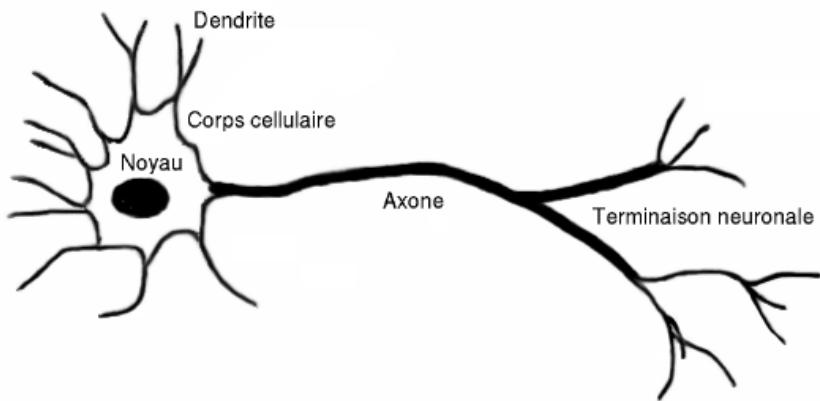


Figure 4.1: Schématisation d'un neurone.

Le soma est le centre métabolique qui permet au neurone de fonctionner, il peut varier de 5 à  $120\mu m$ . Les dendrites et l'axone sont deux prolongements qui par-

tent du soma. D'une part, les dendrites sont fines et très ramifiées et composent la surface réceptrice transmettant les signaux provenant d'autres neurones. D'autre part, il existe un seul axone par neurone qui transmet les influx électrochimiques, ou potentiels d'action, du soma aux synapses. Sa longueur peut varier de  $1mm$  à  $1m$ . Enfin, les synapses composent l'endroit responsable de la communication entre neurones. Le tout est recouvert par une membrane.

Au repos, un neurone a un potentiel de membrane autour de  $-60mV$ . Selon le signal reçu par le neurone, ce potentiel peut dépolariser ou hyperpolariser. Si le potentiel dépasse un certain seuil (autour de  $-50mV$ ), le neurone émet un potentiel d'action (ou spike), qui est d'amplitude constante le long de l'axone jusqu'aux synapses. L'information est alors codée par la variation en fréquence des potentiels d'action. À l'émission du potentiel d'action suit une période réfractaire au cours de laquelle le neurone revient à l'état dit de repos et ne répond pas aux stimuli reçus. Enfin, le signal pénètre la membrane cellulaire à travers les canaux ioniques, qui peuvent être ouverts ou fermés selon leur voltage. La capacité d'un neurone à produire un potentiel d'action est donc liée aux voltages des canaux ioniques, notamment ceux du potassium ( $K$ ) et sodium ( $Na$ ).

Le modèle proposé par Hodgkin-Huxley, [67], basé sur l'analogie entre un circuit électronique et l'activité neuronale de l'axone géant d'un calamar, décrit la propagation d'un potentiel d'action  $V$  par le biais d'un système de 4 équations différentielles non-linéaires. Une analyse de bifurcation permet d'identifier différents modes oscillatoires et une classification des types de réponses neuronales. Les dynamiques oscillatoires prédites par le modèle Hodgkin-Huxley sont en accord avec les résultats empiriques. La complexité de ce modèle a donné lieu à l'écriture d'autres modèles (simplifiés) dont les solutions ont les mêmes propriétés analytiques que celles du modèle Hodgkin-Huxley. Nous rappelons en particulier, celui de FitzHugh-Nagumo, [55]-[87], qui comporte le couplage de deux équations différentielles, celle du potentiel  $V$ , et celle de la fonction de reprise  $W$ :

$$\begin{cases} \dot{V} = V - V^3 + W + I_{ext}, \\ \dot{W} = V - bW - a, \end{cases}$$

où  $I_{ext}$  représente le stimuli appliqué. La propagation du potentiel  $V$  dépend d'un polynôme de troisième degré en  $V$ , comme pour l'oscillateur de Van der Pol représentant un potentiel à double puits. Avec N. Berglund, j'ai co-encadré de 2008 à 2012 la thèse de D. Landon sur l'étude mathématique d'un modèle de type FitzHugh-Nagumo stochastique. Plus précisément, nous considérons un système lent-rapide d'équations différentielles stochastiques, caractérisées par un potentiel à double puits de type Van der Pool. Nous étudions le comportement de la solution en fonction de l'intensité du bruit et du petit paramètre responsable du comportement lent-rapide. Dans un premier temps nous avons considéré le bruit blanc seulement pour l'équation en  $V$  et calculé une approximation au premier ordre de la formule de Kramer pour les temps

de sortie valable pour de petits bruits ainsi que une estimation de la première valeur propre du système. Ensuite, considérant un bruit blanc aussi sur l'équation en  $W$ , il est proposé une analyse fine des temps de sortie et de l'inter-temps entre deux spikes, cette partie à été publiée, voir [15].

Tous ces modèles concernent l'activité d'un seul neurone isolé. Cependant, les neurones fonctionnent en groupes qui communiquent entre eux, pouvant ainsi affecter la longueur de trains de spikes (*i.e.* l'émission très rapprochée de potentiels d'action). Il est donc aussi important d'étudier les propriétés des réseaux de neurones. Selon les propriétés de connexion, comme par exemple la force du couplage entre neurones ou le type de couplage (excitatoire ou inhibitoire), les trains de spike de neurones peuvent se synchroniser. De plus, l'activité générée par deux populations de neurones interconnectées peut exhiber des oscillations spontanées comme décrit par le modèle de Wilson-Cowan, [113]. Dans leur étude ils supposent que l'activité d'une population de neurones est proportionnelle à la proportion de neurones pas réfractaires et à ceux qui reçoivent une excitation moyenne plus grande qu'un seuil  $\theta$  :

$$\begin{cases} \tau_e \dot{E} = -E + (1 - r_e E) S_e(w_{e,e}E - w_{e,i}I + \lambda_e(t)), \\ \tau_i \dot{I} = -I + (1 - r_i I) S_i(w_{i,e}E - w_{i,i}I + \lambda_i(t)), \end{cases} \quad (4.1)$$

où  $\tau_{e/i}$  sont de temps de relaxation,  $r_{e/i}$  les périodes réfractaires,  $w_{e/i,e/i}$  les forces de couplage ou coefficients de connexion et  $\lambda_{e/i}$  les stimuli appliquées. Enfin,  $S_{e/i}(x)$  sont les fonction de réponse à une excitation moyenne  $x > \theta$ , usuellement décrites par des fonctions sigmoïdes. L'analyse mathématique de ce système faite dans [113], montre que les solutions peuvent admettre de l'hysteresis et des cycles limites et ceci indépendamment du choix de la fonction de réponse  $S(x)$ .

Mon travail de recherche en neurosciences computationnelles concerne un modèle de type Wilson-Cowan stochastique, introduit dans [37] et destiné à mieux comprendre la réponse neuronale au niveau du cortex visuel pour des problèmes de bi-stabilité visuelle. Deux exemples classiques de ce phénomène sont le cube de Necker ou le vase de Rubin, voir figure 4.2. Dans ces deux exemples la vue focalise sur deux possibles réponses : pour le cube de Necker (à gauche) nous pouvons voir un cube sortant en haut à droite de la page ou en bas à gauche, pour le vase de Rubin (à droite) nous pouvons distinguer un vase ou deux visages de profil. Dans les deux exemples il n'y a pas de "bonne" réponse et notre vue peut osciller entre les deux réponses infiniment.

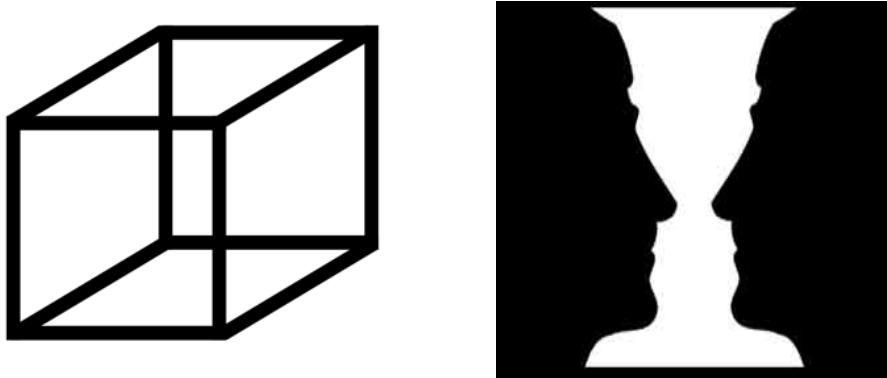


Figure 4.2: Gauche : cube de Necker. Droite : Vase de Rubin.

Du point de vue expérimentale, il est demandé aux individus de regarder une image et de choisir entre deux réponses. Les temps de réaction et les performances sont ensuite enregistrés et calculés. Le temps de réaction correspond au temps nécessaire pour prendre une décision (bonne ou mauvaise), la performance compte au contraire le nombre de bonnes réponses, indépendamment du temps. Logiquement, plus le temps de réaction sera bref, plus l'exactitude de la réponse sera mauvaise, et vice versa. Ce type de modèle peut être aussi vu comme un modèle de prise de décision, ou comme le problème d'une particule confiné dans un potentiel à double puits : le temps de réaction est alors le temps nécessaire à sortir (une première fois) d'un des puits et la performance correspond à la densité des particules qui sont à un certain temps dans un des puits (celui correspondant à la bonne réponse).

J'ai commencé à m'intéresser aux neurosciences en 2007, en collaboration avec J.A. Carrillo (UAB Barcelone, Imperial College of London). Ce thème de recherche m'a porté à travailler avec N. Berglund (MAPMO) à propos de systèmes d'équations différentielles stochastiques lent-rapides, ainsi qu'au co-encadrement d'un stage de Master 2, et de la thèse de D. Landon (2008-2012). Concernant la même thématique, je fais partie de deux projets ANR : MANDy (Mathematical Analysis of Neuronal Dynamics, 2009-2012, porteur M. Thieullen) et CBDif (Collective Behaviour and Diffusion, 2009-2012, porteur J. Dolbeault). Cette recherche a été aussi l'occasion de plusieurs discussions avec des neuro-physiologues (entre autre G. Deco, UPF Barcelone), ainsi que de l'organisation d'un colloque (Stochastic Models in Neuroscience) qui a eu lieu au CIRM en Janvier 2010 et qui a mis en contact la communauté mathématique et celle de neurophysiciens. Enfin, elle a donné lieu à plusieurs travaux [M18], [M22], [M23].

Dans la suite, je vais détailler en section 4.1 le système d'équations différentielles stochastiques décrivant le nombre moyen de spikes par unité de temps (firing rate) de deux populations de neurones en interaction. Section 4.2 est dédiée aux résultats concernants le modèle mésoscopique (équation de Fokker-Planck) déduit du modèle

microscopique précédent. La réduction 1D du problème et son étude numérique est présentée en section 4.3, ainsi que des résultats préliminaires sur un deuxième modèle similaire. Enfin, les conclusions et perspectives de ce thème de recherche sont détaillées en section 4.4.

## 4.1 Le modèle de Wilson-Cowan stochastique

Le modèle mathématique décrivant l'évolution temporelle de deux populations de neurones (excitatrice et inhibitrice) en interaction et soumises à deux stimuli a été introduit dans [113] et consiste en deux équations différentielles ordinaires couplées (4.1). Nous schématisons le problème comme dans [37] :

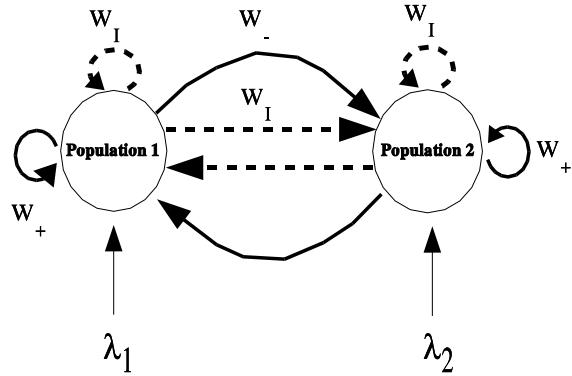


Figure 4.3: Schéma deux populations de neurones qui interagissent et avec stimuli. ©Deco-Martí

En figure 4.3, les coefficients  $w_+$ ,  $w_-$  et  $w_I$  sont les coefficients d'excitation et d'inhibition et définissent la force des contacts synaptiques entre la population  $i$  et  $j$  comme suit :

$$w_{ii} = w_+ - w_I, \quad w_{ij} = w_- - w_I.$$

Les coefficients  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sont les stimuli appliqués : dans le problème dit impartial leurs intensités sont identiques  $\lambda_2 = \lambda_1$ , alors que dans le problème dit partial un des deux stimuli aura intensité plus grande,  $\lambda_2 = \lambda_1 + \Delta\lambda$ , avec  $\Delta\lambda > 0$  intensité du biais.

Nous considérons le système d'équations stochastiques introduit dans [37], et qui est basé sur le modèle dit de Wilson-Cowan, [113] :

$$\dot{\nu}_i(t) = -\nu_i(t) + \phi \left( \lambda_i + \sum_{j=1,2} w_{ij} \nu_j(t) \right) + \beta_i \xi_i(t), \quad i = 1, 2, \quad (4.2)$$

où  $\nu_i$  est le potentiel d'action moyen (nombre moyen de spikes par unité de temps) de chaque population,  $\xi_i(t)$  représente un bruit blanc d'écart type  $\beta_i^2$  et la fonction

de réponse  $\phi(z)$  est définie par la sigmoïde:

$$\phi(z) = \frac{\nu_c}{1 + \exp(-\alpha(z/\nu_c - 1))},$$

avec  $\alpha$  et  $\nu_c$  coefficients calibrés par les expériences.

Nous posons dans la suite le flux  $F = (F_1, F_2)$  avec  $F_i$  respectivement données par :

$$F_i = -\nu_i(t) + \phi \left( \lambda_i + \sum_{j=1,2} w_{ij} \nu_j(t) \right) \quad i = 1, 2. \quad (4.3)$$

Les termes stochastiques justifient des fluctuations dûes au nombre fini de neurones dans l'approximation de champ moyen faite. Comme montre la figure 4.4, pour les deux cas (partial/impartial), selon les valeurs du paramètre  $w_+$ , le système dynamique associé admet trois points d'équilibre : un instable (dit état spontané) et deux stables (dits états de décision), ou un seul point stable. En particulier, la valeur "critique" de  $w_+$ , pour laquelle le système passe de 1 à 2 points stables, pour le cas partial est plus grande ( $w_+ = 2.34$ ) que celle du cas impartial ( $w_+ = 2.31$ ).

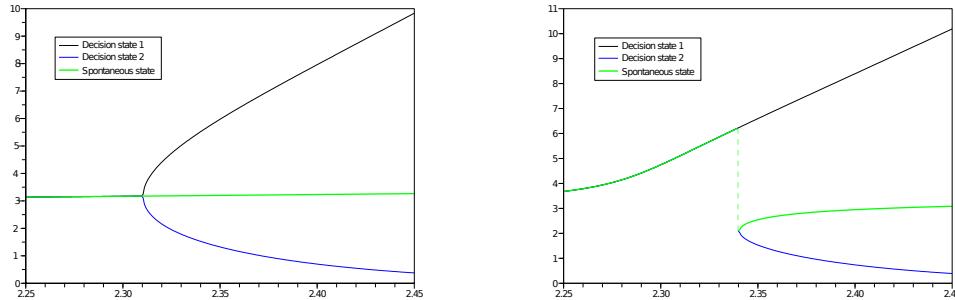


Figure 4.4: Diagramme de bifurcation : composante  $\nu_1$  des états d'équilibre en fonction de  $w_+$ . Cas impartial (gauche), cas partial (droite)  $\Delta\lambda = 0.1$ .

Dans le cas impartial, les potentiels d'action moyens pour  $w_+ < 2.31$ , seront toutes synchronisées autour du point stable qui est donc un point de décision, alors que pour  $w_+ > 2.31$  elles se partageront symétriquement autour de deux points de décision. Dans le cas partial, la situation est analogue, mais nous remarquons que le seuil entre les deux régimes s'est déplacé vers la droite et atteint une valeur près de 2.34. De plus, à cause du biais les potentiels d'action moyens seront synchronisées majoritairement autour d'un des deux points de décision. Dans les résultats numériques qui suivent nous avons utilisé les mêmes valeurs des paramètres que dans [37]. Le coefficient d'excitation est donné par  $w_+ = 2.35$  et ceux inhibtoires par  $w_I = 1.9$  et  $w_- = 1 - r(w_+ - 1)/(1 - r)$  avec  $r = 0.3$ . Les stimuli sont  $\lambda_1 = 15 \text{ Hz}$  et  $\lambda_2 = \lambda_1 + \Delta\lambda$  avec  $\Delta\lambda = 0$  (impartial),  $0.1$  (partial). Dans la définition de la sigmoid  $\alpha = 4$  et  $\nu_c = 20 \text{ Hz}$ . Le bruit  $\beta$  vaut 0.1 et la donnée initiale est une

gaussienne centrée en  $(3, 3)$  et avec écart type 0.3. Nous avons discrétisé les segments  $\nu_1 = \nu_2 = [0, 10]$  avec 200 points de discrétisation et nous arretons les calculs de que le temps atteint  $T = 4$  sec.

Nous remarquons aussi, voir figure 4.5, que le modèle déterministe est caractérisé par une évolution lente-rapide. Nous soulignons l'existence d'une courbe, dite variété lente, le long de laquelle a lieu la transition lente vers un des points de décision : ce temps de convergence est exponentiellement long et on parle de métastabilité du système. Par ailleurs, une convergence rapide de n'importe quel point du domaine vers cette variété lente est aussi montrée. Ainsi, en temps long, les potentiels d'action moyens des deux populations de neurones se concentrent dans les deux états de décision. Ce comportement lent-rapide persiste aussi en présence du bruit.

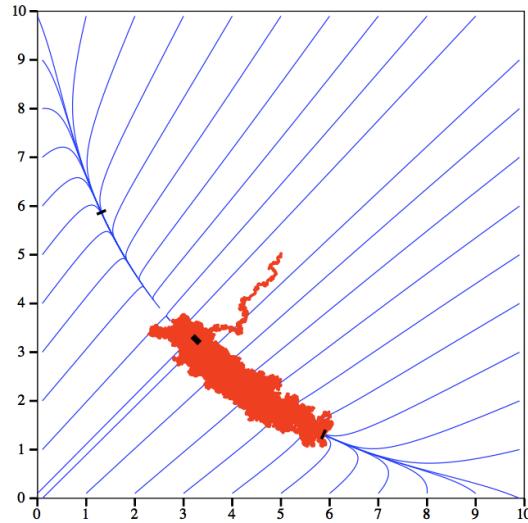


Figure 4.5: Trajectoires du système (4.2) avec les trois points d'équilibre. Bleue : déterministe. Rouge : stochastique.

Bien évidemment, en changeant les paramètres, il est possible de changer la nature et le nombre des points d'équilibre. Enfin, nous remarquons que à cause de la non-linéarité de la fonction de réponse  $\phi$ , il n'est pas possible de trouver une solution explicite au système d'équations différentielles. Le système stochastique (4.2) a été étudié numériquement, voir [37], en utilisant une méthode des moments, ce qui permet de décrire la solution par une somme de gaussienne. Cependant, le système d'équations pour le moments proposé dans [37] est fermé de façon arbitraire.

## 4.2 Le modèle de Fokker-Planck

Nous nous sommes intéressés à une description statistique du problème. Le lien entre système d'équations stochastique et équations aux dérivées partielles étant

connu, voir [56], dans un premier travail, [M18], nous avons proposé un modèle de type cinétique en considérant l'équation de Fokker-Planck (ou Kolomogorov directe) associée au système stochastique (4.2). L'inconnue  $f = f(t, \nu_1, \nu_2)$ , fonction de  $\mathbb{R}^+ \times \Omega^2$ , avec  $\Omega = [0, \nu_{max}]$ , à valeurs dans  $\mathbb{R}$ , doit satisfaire l'équation aux dérivées partielles :

$$\partial_t f + \nabla \cdot \left( F f - \frac{\beta^2}{2} \nabla f \right) = 0, \quad (4.4)$$

complétée par des conditions aux bords de type Robin (flux nul):

$$F f - \frac{\beta^2}{2} \nabla f \Big|_{\partial\Omega} = 0. \quad (4.5)$$

Dans ce modèle la fonction  $f = f(t, \nu_1, \nu_2)$  représente la fonction distribution qui décrit la probabilité que les deux potentiels d'action moyens soient  $\nu_1$  et  $\nu_2$  au temps  $t$ .

Le terme de dérive,  $F$ , déduit du système dynamique, est défini par (4.3). Il est facile de voir que la condition de Schwartz n'est pas satisfaite,  $\partial_1 F_2 \neq \partial_2 F_1$ , par conséquence  $F$  n'est pas le gradient d'un potentiel, et il n'existe pas de fonction  $U(\nu_1, \nu_2)$  telle que  $F = \nabla U$ . Il n'est donc pas possible d'exprimer explicitement la solution stationnaire (à l'équilibre) associée à (4.4)-(4.5). À notre connaissance, la résolution de l'équation de Fokker-Planck avec terme de dérive non-gradient, n'a pas été traité auparavant. Dans [M18] nous montrons, à l'aide du théorème de Krein-Rutman l'existence, unicité et positivité de la solution stationnaire, ensuite grâce à la théorie de l'entropie relative généralisée (voir [85], [86]), nous obtenons l'existence, positivité et unicité de la solution du problème (4.4)-(4.5), ainsi que sa convergence vers la solution stationnaire, mais nous avons aucune information concernant le taux de cette convergence.

Enfin, dans [M18], nous observons numériquement le comportement lent-rapide de la solution de (4.4)-(4.5), et validons nos résultats par des comparaisons avec les résultats de [37], montrant un bon accord. Cette approche numérique nous permet d'étudier l'évolution temporelle de la solution, et d'aborder le problème du calcul du temps de réaction et de la performance. Nous reportons dans la suite quelques simulations numériques pour mieux montrer nos résultats. Remarquons que pour avoir des résultats numériques satisfaisant en terme de représentation de deux pics de population, nous avons besoin d'un maillage assez fin en  $\nu_1$  et  $\nu_2$ . De plus, à cause de la meta-stabilité du problème, il est quasi-impossible d'atteindre l'équilibre avec de temps de calcul raisonnables : par exemple, pour un temps relativement long (4 secondes), le calcul durent plusieurs jours sur un portable (nous remarquons que le tout est codé en  $C$ ).

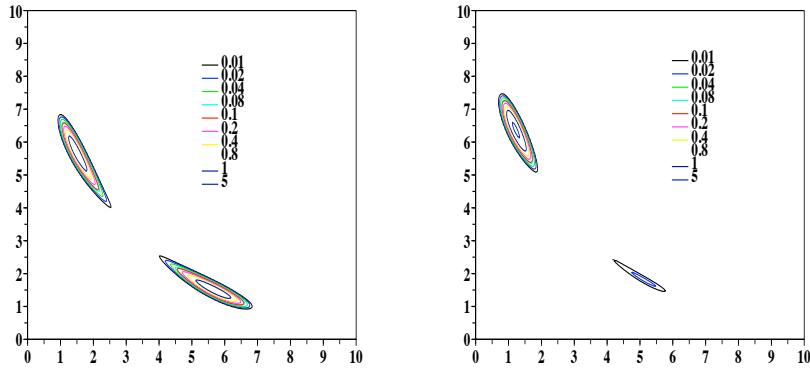


Figure 4.6: Lignes de niveau de la solution en temps grand. Cas impartial (gauche), cas partial (droite),  $\Delta\lambda = 0.1$ , et  $\beta = 0.1$ .

La figure 4.6 montre les lignes de niveau de la fonction distribution  $f$ , pour un temps final de calcul  $T = 4$  secondes. À gauche nous traçons le résultat pour le cas impartial, *i.e.* les stimuli extérieurs appliqués aux deux populations sont les mêmes. Nous remarquons la concentration symétrique des deux populations autour de deux points de décision et alignée le long de la variété lente. À droite nous traçons le résultat pour le cas partial, *i.e.* les stimuli extérieurs appliqués aux deux populations sont différents, en l'occurrence la différence est assez significative pour que le système ait quasiment un seul puits de potentiel, *i.e.* un seul point de décision. Le fait de continuer à voir de la masse dans le deuxième point de décision, est dû au bruit blanc et aussi à la métastabilité du système.

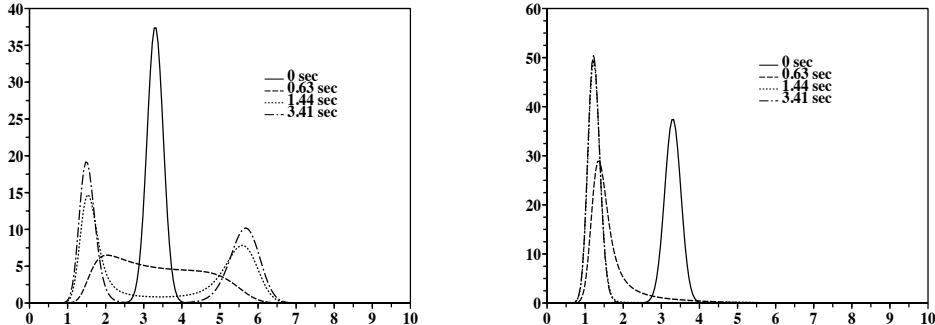


Figure 4.7: Evolution en temps d'une marginale. Cas impartial (gauche), cas partial (droite),  $\Delta\lambda = 0.1$ .

La figure 4.7 montre l'évolution à différents temps d'une marginale, pour le cas impartial (à gauche) et pour le cas partial (à droite). En particulier, cette fig-

ure souligne le comportement lent-rapide : une diffusion très rapide à partir de la gaussienne initiale centrée près du point spontané, et une croissance très lente des pics autour des points de décision. La même configuration à deux pics (solution bi-modale), pour le cas impartial, était montrée dans [37]. Pour le cas partial, le deuxième pic visible en figure 4.6 (droite), existe aussi en figure 4.7, mais il n'est pas visible parce que trop petit par rapport à l'échelle du graphe.

Faute d'avoir un résultat théorique sur la convergence exponentielle de la solution  $f$  vers la solution stationnaire  $f_\infty$ , nous l'avons étudié numériquement, voir figure 4.8 où la convergence  $L^2$  est tracée en échelle logarithmique. Une régression linéaire sur la deuxième moitié de la courbe détermine une pente de -0.19 et un écart type de 0.031 ; par contre une régression linéaire sur le dernier quart de la courbe détermine une pente de -0.08 et un écart type de 0.004. Ceci montre qu'après une brève période, la convergence vers la solution stationnaire est de fait exponentielle.

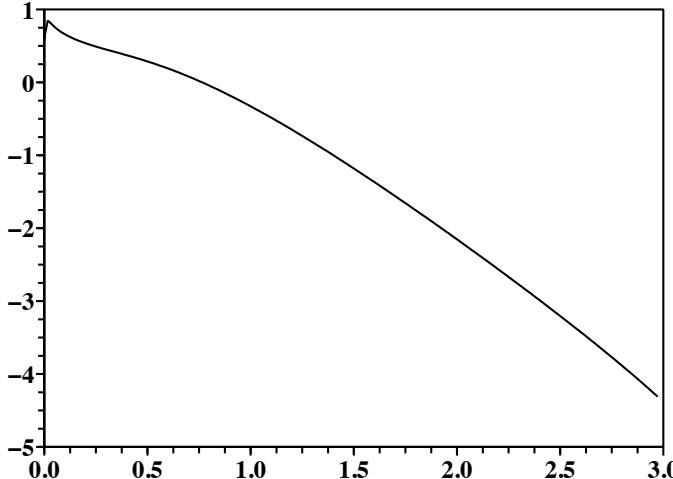


Figure 4.8: Convergence en norme  $L^2$  vers la solution stationnaire.

Comme dit en introduction, les performances sont liées aux densités  $\rho_i$  dans les sous-domaines  $\Omega_i$ , *i.e.* à la probabilité que une particule soit dans une région  $\Omega_i$  de l'espace de phases, voir [99]. En figure 4.9, nous traçons, par exemple, l'évolution des trois densités  $\rho_i$  pour  $i = 1, 2, 3$  correspondant à trois domaines contenant respectivement chaque point d'équilibre du système différentiel. En particulier,  $\Omega_1$  et  $\Omega_3$  sont les deux domaines centrés autour des points de décision, et  $\Omega_2$  est celui du point spontané. Nous montrons pour le cas impartial (gauche), que les deux densités  $\rho_1$  et  $\rho_3$  coïncident et convergent vers  $1/2$  (ce qui est naturel vu la symétrie du problème). Dans les cas partial (droite), les densités se comportent comme prévu : la densité  $\rho_1$  s'approche de la valeur  $1$ , alors que  $\rho_3$  reste près de zéro et n'est pas visible sauf

pour un temps  $t$  compris entre 1.0 et 1.5 ; la décroissance de  $\rho_2$  est plus rapide que dans le cas impartial.

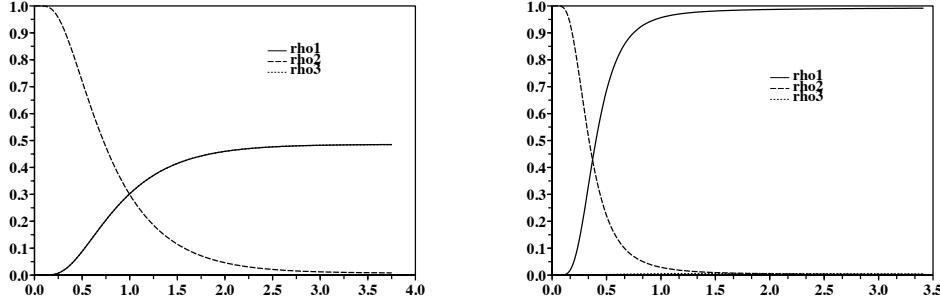


Figure 4.9: Densités  $\rho_i(t)$ , pour  $i = 1, 2, 3$ . Cas impartial (gauche), cas partial (droite),  $\Delta\lambda = 0.1$ .

Les temps de réaction, eux, sont liés aux temps de sortie d'un puits de potentiel, eux mêmes liés à la différence de potentiel que la particule doit franchir pour sortir du puits et à l'intensité du bruit  $\beta$ . Il est admis, voir [56], que l'espérance du temps de sortie est donné, pour un problème unidimensionnel par la formule de Kramers :

$$\mathbb{E}(t) \sim \exp(H/\beta^2), \quad (4.6)$$

où  $H$  représente le saut de potentiel et  $\beta$  le coefficient de diffusion. Cependant, une formule générale pour le cas multi-dimensionnel n'est pas connue. Sachant que, dans le cas impartial, les densités autour des deux états de décision sont égales et que le système décrit par (4.2) est analogue à un potentiel à double puits, nous avons fait un premier test dans lequel nous calculons en fonction du bruit  $\beta$  le temps pour que la moitié de la densité de population initialement contenue dans le domaine  $\Omega_1$  arrive dans le domaine  $\Omega_3$ . Nous avons appelé ce temps, temps de sortie  $T$  et présentons les résultats (exprimés en secondes) dans le tableau 4.1 :

Table 4.1: Temps de sortie

$\beta$	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1
T	12.91	3.33	1.70	1.12	0.80	0.60	0.49	0.37	0.30

Grâce à cette approche, nous pouvons donner une estimation du saut de potentiel  $H$  existant implicitement dans notre modèle. En figure 4.10 nous traçons la quantité  $H = \beta^2 \log(T)$  en fonction de  $\beta$ .

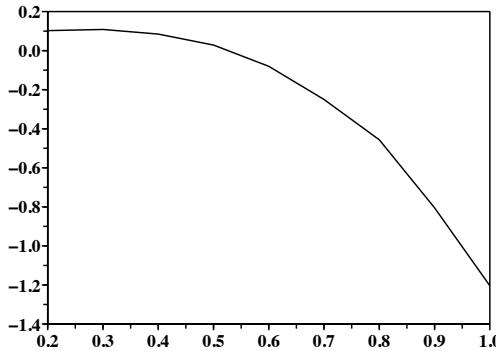


Figure 4.10: La valeur du saut de potentiel  $H = \beta^2 \log(T)$  par rapport au bruit  $\beta$  en échelle logarithmique.

### 4.3 La réduction 1D

Le comportement lent-rapide ainsi que les temps de calcul très longs, voir aussi [M18], nous ont convaincu de la nécessité de réduire la complexité du modèle pour pouvoir donner une solution explicite au problème et réduire les temps de calcul. La réduction unidimensionnelle ou la linéarisation de problèmes similaires a déjà été le sujet de plusieurs articles déduisant des modèles simplifiés valables que localement (*i.e.* dans un voisinage du point spontané) : voir par exemple [17], [25], [107] et [114] ou encore [99] où les auteurs obtiennent des comparaisons avec les données expérimentales très satisfaisantes. La réduction que nous proposons est valable globalement : elle est exacte dans des voisinages des tous les points d'équilibre, et l'erreur commise ailleurs est de l'ordre du paramètre  $\varepsilon$  mesurant la différence d'échelle temporelle entre les deux variables, *i.e.* le paramètre caractérisant le comportement lent-rapide, voir [14].

Etant donné un système différentiel stochastique lent-rapide, il est possible d'en réduire le nombre d'inconnues en résolvant les équations correspondantes aux variables rapides du système, en considérant que la solution atteint son état d'équilibre instantanément, et en remplaçant cette solution dans l'équation de la variable lente. Dans un deuxième travail en collaboration avec J.A. Carrillo et S. Cordier, voir [M22], nous avons utilisé cette approche pour réduire le système (4.2) à une seule équation différentielle stochastique dont la solution vit sur la variété lente. L'approximation unidimensionnelle donnée est valable sur tout le domaine et nous pouvons reconstruire le potentiel de l'équation de Fokker-Planck uni-dimensionnelle associée sur tout le domaine de définition, ainsi que évidemment écrire explicitement la solution stationnaire. Nous détaillons dans la suite les résultats de l'article [M18].

Nous considérons dans un premier temps, la partie déterministe du système (4.2) :

$$\dot{\nu} = F(\nu),$$

où  $\nu = (\nu_1, \nu_2)$ . La diagonalisation du Jacobien de  $F$  au point spontané  $\nu_{eq}$ , montre qu'il existe deux valeurs propres  $\mu_1$  et  $\mu_2$  du même signe avant ce point et de signe opposé après ce point. La bifurcation étant caractérisée par le point tel que la valeur absolue du valeur propre le plus petit devient zéro. À l'aide des ces valeurs propres, nous pouvons définir le paramètre  $\varepsilon \ll 1$  caractérisant le comportement lent-rapide comme :  $\varepsilon = |\mu_2/\mu_1|$ , où  $\mu_1 \ll 0 < \mu_2$ . Dans [M22], nous avons considéré  $\varepsilon$  comme fonction de  $w_+$  pour un  $\Delta\lambda$  fixé, mais puisque il est défini à l'aide des valeur propres du système d'équations différentielles ordinaires, la même analyse aurait pu être faite en fixant  $w_+$  et en faisant varier  $\Delta\lambda$ . Enfin, soit  $P$  la matrice de vecteurs propres associés aux valeurs propres  $\mu_1$  et  $\mu_2$ , nous définissons une nouvelle variable  $X = (x, y) = P^{-1}(\nu - \nu_{eq})$  et le problème :

$$\dot{X} = H(X), \quad H(X) = P^{-1}F(\nu_{eq} + PX) = (f(X), g(X)). \quad (4.7)$$

Nous remarquons que, dans le nouveau système, la variable lente est  $y$  et celle rapide est  $x$ . En définissant un nouveau temps  $\tau = \varepsilon t$  nous pouvons expliciter le caractère lent-rapide du système (4.7) en écrivant :

$$\begin{cases} \varepsilon \dot{x} = f(x, y) \\ \dot{y} = g(x, y) \end{cases} \quad (4.8)$$

Du point de vue théorique, le théorème des fonctions implicites assure l'existence d'une solution de l'équation sur la variable rapide, ainsi définissant une courbe  $x^*(y)$  telle que  $f(x^*(y), y) = 0$  correspondant à la variété lente. En remplaçant  $x$  par  $x^*(y)$  dans l'équation de la variable lente  $y$  dans (4.7), nous complétons la réduction du système déterministe :

$$\dot{y} = g(x^*(y), y).$$

Concernant la partie stochastique et négligeant la partie déterministe, puisque  $y$  est une combinaison linéaire de  $\nu_1$  et  $\nu_2$ , satisfaisant pour  $i = 1, 2$  :  $\dot{\nu}_i = \beta \xi_i$ , avec  $\xi_i$ , deux bruits blancs indépendants,  $y$  doit satisfaire à l'équation stochastique  $\dot{y} = \beta_y \xi$ , avec  $\xi$  bruit blanc et  $\beta_y$  donné par :

$$\beta_y = \beta \sqrt{((P^{-1})_{21})^2 + ((P^{-1})_{22})^2}.$$

Enfin, le modèle différentiel stochastique uni-dimensionnel, satisfait par la variable lente  $y$ , s'écrit :

$$\dot{y} = g(x^*(y), y) + \beta_y d\xi. \quad (4.9)$$

Comme pour le cas bi-dimensionnel, nous considérons l'équation de Fokker-Planck associée à (4.9) :

$$\partial_t p + \partial_y \left( g(x^*(y), y) p - \frac{\beta_y^2}{2} \partial_y p \right) = 0, \quad (4.10)$$

munie des conditions aux bords

$$g(x^*(y), y) p - \frac{\beta_y^2}{2} \partial_y p = 0.$$

La méta-stabilité du système persiste, comme nous le remarquons aussi numériquement en figure 4.11. Ceci n'est pas étonnant puisque nous avons simplifié l'évolution le long de la variable rapide  $x$  et gardé celle le long de la variable lente  $y$ . Cependant, nous discrétisons maintenant l'équation par un schéma implicite, évitant ainsi la condition de stabilité sur le pas de temps, et gagnant énormément en terme de temps de calcul (le code est maintenant en scilab et tourne en quelques dizaines de secondes sur un portable).

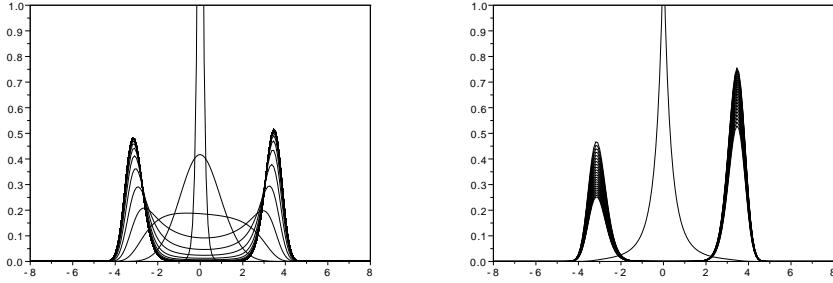


Figure 4.11: Évolution en temps pour la fonction distribution  $p(t, y)$  avec la différence entre les stimuli  $\Delta\lambda = 0.1$  et tracé tous les 0.2 sec (gauche) et tous les 200 sec (droite).

De plus, étant (4.10) uni-dimensionnelle, nous pouvons déterminer explicitement sa solution stationnaire (à l'équilibre) :

$$p_s(y) = \exp(-2G(y)/\beta_y^2). \quad (4.11)$$

où  $G(y)$  est le potentiel défini par :

$$G(y) = \int g(x^*(z), z) dz.$$

Nous rappelons aussi que pour toutes fonctions test  $\Psi = \Psi(\nu_1, \nu_2)$ , le moment  $M_\Psi$  de la solution stationnaire  $p_s(\nu_1, \nu_2)$ , quand  $\varepsilon$  converge à zéro, est approché par :

$$M_\Psi := \int \Psi(\nu_{eq} + P(x^*(y), y)) p_s(y) dy \quad (4.12)$$

Cette formule peut être utilisée pour calculer les moments de  $p_s$  ainsi que les marginales en choisissant par exemple  $\Psi = \delta_{\{\nu_1=\mu\}}$ .

Nous avons validé ce modèle réduit uni-dimensionnel par différents tests numériques qui montrent un très bon accord entre la solution stationnaire (4.11), la solution du problème bi-dimensionnel calculée pour un temps  $T = 4$  secondes et la solution du problème uni-dimensionnel au même temps, voir figures 4.12 pour la comparaison des marginales par rapport  $\nu_1$  :

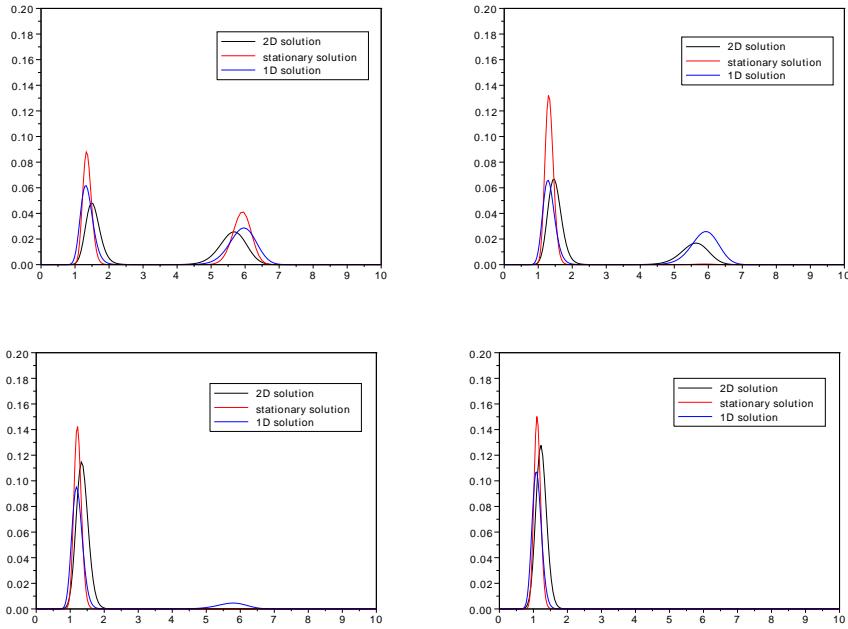


Figure 4.12: Comparaison des marginales par rapport à  $\nu_1$  pour plusieurs valeurs du biais  $\Delta\lambda = 0$  (haut à gauche), 0.01 (haut à droite), 0.05 (bas à gauche), 0.1 (bas à droite).

Comme expliqué précédemment, nous sommes intéressés par le calcul des performances, *i.e.* des densités  $\rho_i$  sur un domaine donné  $\Omega_i$ . Puisque maintenant nous connaissons l'expression exacte de la solution à l'équilibre, pour le modèle réduit uni-dimensionnel, et que le point spontané est centré en 0 pour l'axe des  $y$ , nous calculons  $\rho_+$  qui est la densité de probabilité d'être dans la partie positive de l'axe  $y$  et nous comparons ce résultat avec la densité  $\rho_\infty$ , calculée à partir du modèle bi-dimensionnel, voir figure 4.13. Nous rappelons que nous n'avons pas la solution à l'équilibre pour le modèle 4.4, mais nous pouvons obtenir une valeur approchée de  $\rho_\infty$  grâce à une extrapolation exponentielle. En effet, nous savons que pour des modèles plus simples, en passant par une analyse de Fourier, le comportement des densités en temps est exponentiel. Nous supposons donc que ça soit vrai aussi pour la densité  $\rho_p$  :

$$\rho_p(t) = \rho_\infty + a \exp(-t/\tau).$$

Nous vérifions cette hypothèse numériquement, et nous l'utilisons pour en déduire la valeur limite approchée  $\rho_\infty$ . Les détails de cette extrapolation sont donnés dans [M22] où il apparaît que nous pouvons calculer  $\rho_\infty$  à l'aide de seulement trois valeurs de  $\rho_p$  à des temps relativement petits, mais toutefois suffisamment grands pour que l'évolution rapide soit terminée.

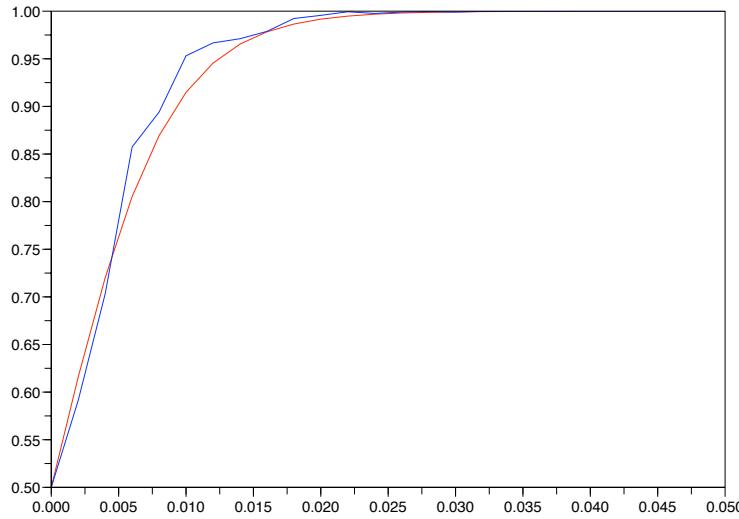


Figure 4.13: Comparaison de  $\rho_+$  et  $\rho_\infty$  par rapport au paramètre de biais  $\Delta\lambda \in [0, 0.05]$ . Rouge : 1D. Bleue : 2D.

La réduction 1D que nous avons présenté ici, a été aussi testé sur un modèle légèrement différent issu toujours de la modélisation en neurosciences. Ce travail est en cours de rédaction [M23], et les résultats que nous présentons sont actuellement en étude. La fonction de réponse  $\phi(z)$  considérée et définie par :

$$\phi(z) = \frac{\nu_c}{1 + \exp(-bz + \alpha)}, \quad (4.13)$$

est telle que le système d'équations admet entre un et cinq points d'équilibre selon la valeur du coefficient de connexion  $w_+$ , voir la figure 4.14 :

La variété lente n'est plus dans ce cas test strictement monotone, ce qui peut provoquer des problèmes pour la détermination de la solution le long de la variété lente ou des marginales, voir figure 4.15.

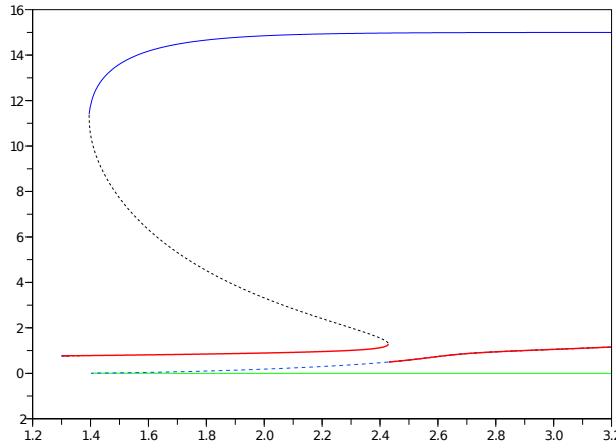


Figure 4.14: Diagramme de bifurcation potentiel à trois puits

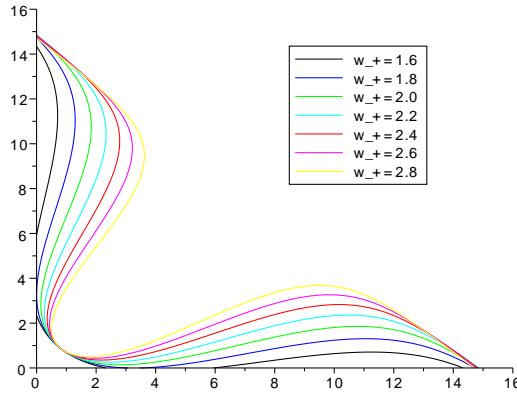


Figure 4.15: Variété lente dans l'espace de phase  $(\nu_1, \nu_2)$

Nous pouvons néanmoins tracer le potentiel associé pour différents valeurs du biais. En figure 4.16 nous traçons les potentiel pour le cas impartial (gauche) et pour le cas partial avec  $\Delta\lambda = 0.1$  (droite), ainsi que des zooms autour du point spontané (point d'équilibre du milieu).

Enfin, il est possible d'évaluer les temps de sortie du puits de milieu, par une formule de Kramer. Si l'intensité du bruit est petite nous pouvons calculer le temps moyen pour sortir du puits en évaluant la différence de potentiel entre le point du milieu (état spontané et le plus petit de deux maxima à droite ou à gauche de ce

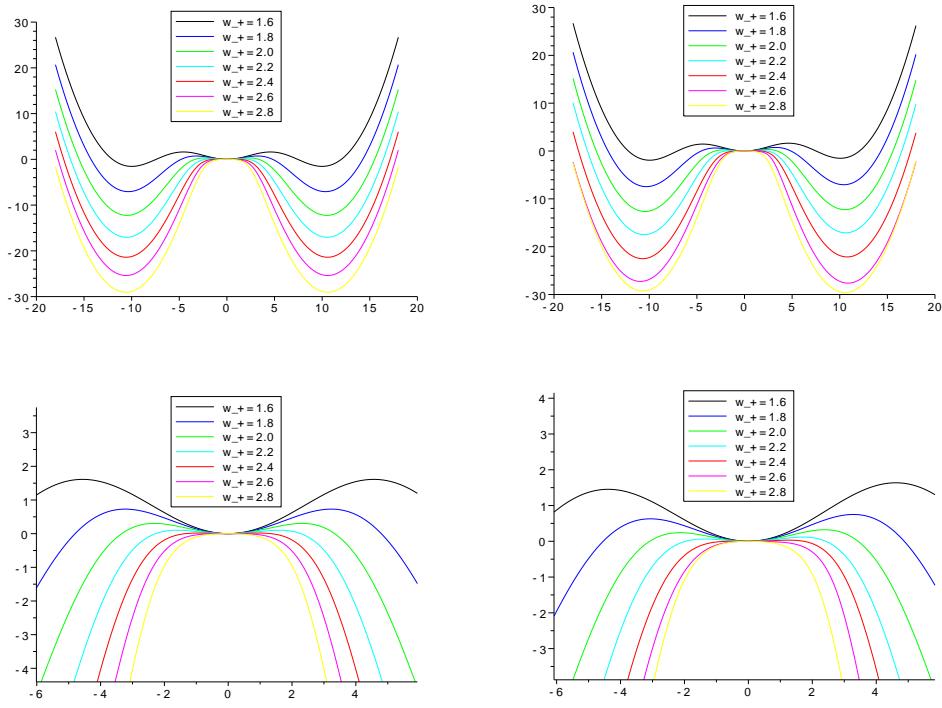


Figure 4.16: Potentiels le long de la variable lente  $y$ .

point :

$$T = \frac{2\pi}{\sqrt{-G''(y_{min})G''(y_{max})}} \exp\left(\frac{2 * G(y_{min})G(y_{max})}{\beta_y^2}\right) \quad (4.14)$$

où  $y_{min} = \nu_{eq}$  et  $y_{max}$  correspond au point du plus petit maximum. La dérivée deuxième de  $G$  est calculée grâce au théorème de fonctions implicites. La figure 4.17, présente des résultats préliminaires concernant les temps de réaction en fonction de  $w_+$  et pour différents valeurs du biais  $\Delta\lambda$ .

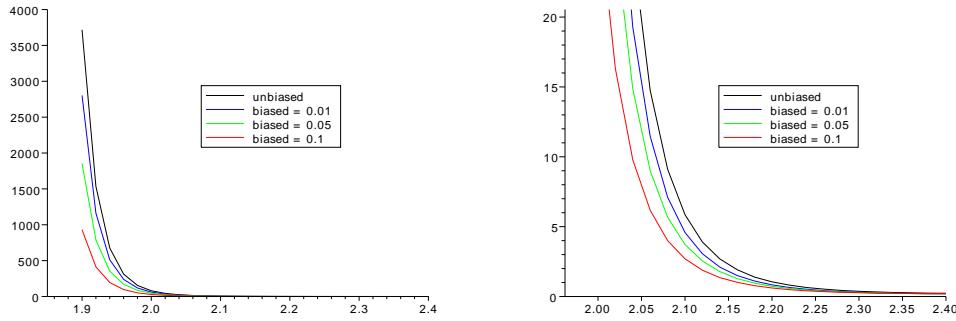


Figure 4.17: Potentiels le long de la variable lente  $y$ .

## 4.4 Conclusions et perspectives

Partant de l'étude des potentiels moyens émis par deux populations de neurones, modélisés par un système dynamique déterministe dans [113], et par un système dynamique stochastique dans [37], nous avons étudié analytiquement et numériquement l'équation bi-dimensionnelle de Fokker-Planck associée (voir [M18]). Cette équation étant caractérisée par un terme de dérive qui n'est pas le gradient d'une fonction potentielle, la détermination de l'existence, unicité et positivité de la solution stationnaire associée au problème, a été prouvée à l'aide du théorème de Krein-Rutmann. De plus, en utilisant la théorie de l'entropie relative généralisée, nous pouvons la convergence de la solution vers la solution à l'équilibre. La méta-stabilité du système, montrée numériquement par une convergence exponentielle vers la solution stationnaire, ainsi que le comportement lent-rapide des solutions impliquent de temps de calcul très longs. Ceci nous a conduit à considérer une réduction du système dynamique, en écrivant un modèle uni-dimensionnel vivant sur la variété lente définie par le système déterministe initial (voir [M22]). La résolution numérique et la comparaison des résultats des modèles bi-dimensionnel et uni-dimensionnel sont tout à fait satisfaisants. L'application de cette modélisation à d'autres modèles (voir [M23]) est en cours.

Ce thème de recherche a demandé un important investissement pour intégrer les résultats et théories utilisés en systèmes complexes et en probabilité, ainsi que les techniques déjà utilisées par la communauté de neurosciences. Les champs d'application pour des systèmes d'équations multi-échelles sont multiples, et j'envisage de continuer à travailler sur certaines pistes de recherche liées à ces systèmes.

En particulier, je m'intéresse dernièrement à l'analyse asymptotique des équations aux dérivées partielles déduite des systèmes d'équations différentielles stochastiques

de type lent-rapide. Nous considérons le système lent-rapide :

$$\begin{cases} \varepsilon \dot{x} = f(x, y) + \xi_1, \\ \dot{y} = g(x, y) + \xi_2, \end{cases}$$

avec  $\xi_1$  et  $\xi_2$  deux bruits blancs d'écart type respectivement  $\beta_1(\varepsilon)$  et  $\beta_2(\varepsilon)$ . Si nous supposons  $\beta_1 = \beta_1\sqrt{\varepsilon}$  et  $\beta_2$  constant indépendant de  $\varepsilon$ , nous obtenons l'équation de Fokker-Planck:

$$\partial_t p + \frac{1}{\varepsilon} \partial_x (f(x, y) p) + \partial_y (g(x, y) p) = \frac{\beta_1^2}{2\varepsilon} \partial_{xx} p + \frac{\beta_2^2}{2} \partial_{yy} p,$$

où  $p = p(t, x, y)$  est la fonction distribution. Il paraît raisonnable que la solution à l'ordre zéro  $p^0$  soit une maxwellienne en  $x$  et que à l'ordre d'après la solution vive sur une bande de largeur  $\varepsilon$  autour de la variété lente. Cette approche pourrait donner des informations encore plus générales, puisque nous n'avons plus besoin de connaître le point spontanée pour l'appliquer, comme dans [M22]. Notamment, nous pensons pouvoir récupérer une équation pour la marginale en  $y$ ,  $\hat{p} = \int_0^{x_{max}} p(t, x, y) dx$ . Par ailleurs, si  $\beta_1$  et  $\beta_2$  dépendent différemment de  $\varepsilon$  l'étude peut être bien plus complexe.

Ce thème m'a portée à m'intéresser à l'étude de l'apprentissage chez les sportifs. Il s'agit de modéliser l'évolution entre comportement débutant et professionnel. Il apparaît que le passage de débutant à expert/professionnel ne se fait pas de manière instantanée, mais progressive et non linéaire, avec des seuils. Nous envisageons de décrire cette évolution par une équation stochastique avec un potentiel à double puits, dont les coefficients varient en temps et selon le nombre de passages du puits "débutant" au puits "professionnel", pour enfin basculer vers un comportement professionnel stable. Ce type de modèle est appliqué dans tout ce qui concerne le "learning", comme pour les automates.

Plus récemment, j'ai commencé à m'intéresser à la modélisation (en biologie) de la croissance de cadhérines (projet PEPS math-bio-info, MAC, dont je suis porteuse et en collaboration avec R.M. Mège (INSERM) ainsi que une co-direction de thèse avec A. Batakis à partir de septembre 2012, sur le même sujet). Il s'agit de décrire la croissance par adhésion des cadhérines via un système d'équations de réaction-diffusion dégénérées. Enfin, depuis Mars 2012 je co-organise un groupe de travail commun entre les laboratoires Jacques-Louis Lions et MAPMO, concernant la modélisation en sciences humaines et sociales.

# Mes Publications

- [M23] J. A. Carrillo, S. Cordier, G. Deco, S. M., *General One-Dimensional Fokker-Planck Reduction of Rate-equations models for two-choice decision making*, (en préparation)
- [M22] J. A. Carrillo, S. Cordier, S. M., *One dimensional Fokker-Planck reduced dynamics of decision making models in Computational Neuroscience*, (à paraître dans Comm. Math. Sci.)
- [M21] J. Castro, A. Burgisser, I. Schipper, S. M., *Mechanisms of bubble coalescence in silicic magmas*, (à paraître dans Bull. Volcan.)
- [M20] L. Forestier-Coste, S. M., *A finite volume preserving scheme on nonuniform meshes and for multidimensional coalescence*, (soumis)
- [M19] L. Forestier-Coste, S. M., A. Burgisser, F. James, *Numerical resolution of a mono-disperse model of bubble growth in magmas*, Appl. Math. Model., **36**, pp. 5936-5951, (2012).
- [M18] J. A. Carrillo, S. Cordier, S. M., *A decision-making Fokker-Planck model in computational neuroscience*, J. Math. Biol. **63**, pp. 801-830, (2011).
- [M17] C. Feita, S. M, D. Perchet, F. Prêteux, M. Thiriet, L. Vial, *An image-based computational model of oscillatory flow in the proximal part of tracheobronchial trees*, Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering, **8**(4), pp.279-293, (2005).
- [M16] C. Baranger, L. Boudin, P.-E. Jabin, S. M., *A model of biospray for the upper airways*, ESAIM Proceedings, CEMRACS 2004, **14**, pp. 41-47, (2005).
- [M15] F. Bouchut, F. James, S. M., *Multidimensional transport equations with discontinuous coefficients*, Ann. Scuola. Norm. Sup. Pisa, CI. Sci.(5), Vol. IV, (2005).
- [M14] S. Cordier, B. Lucquin-Desreux, S. M., *Focalization: A numerical test for smoothing effects of collision operators*, J. Sci. Comp., **24**(1), (2005).
- [M13] B. Lucquin-Desreux, S. M., *A finite element approximation for grazing collisions*, Transp. Theor. Stat. Phys., **32**(3&4), pp. 293-319, (2003).

- [M12] S. Cordier, S. M., *A brief review on numerical methods for the collisions operators*, ENUMATH Proceedings 2001, Springer, pp. 447-457, (2003).
- [M11] C. Buet, S. Cordier, B. Lucquin-Desreux, S. M., *Diffusion limit of the Lorentz model: asymptotic preserving schemes*, Meth. Math. Anal. Num., **36**(4), pp. 631-655, (2002).
- [M10] P. Degond, V. Latocha, S. M., A. Mellet, *Diffusion dynamics of an electron gas confined between two plates*, Meth. Appl. Anal., **9**(1), pp. 127-150, (2002).
- [M9] S. M., S. Totaro, *Study of a transport operator with unbounded coefficients*, Adv. Math. Sci. Appl., **12**(1), pp. 377-391, (2002).
- [M8] P. Degond, S. M., *Diffusion driven by collisions with the boundary*, Asympt. Anal. **27**, pp. 47-73, (2001).
- [M7] S. M., *Generalized multiplying boundary conditions and B-bounded semigroups*, ESAIM Proceedings, CEMRACS 99, **10**, pp. 141-149, (2001).
- [M6] S. M., S. Totaro, *Vlasov equation with nonhomogeneous boundary conditions*, Math. Meth. Appl. Sci., **23**, pp. 601-614, (2000).
- [M5] S. M., *Modelli matematici per la diffusione e il trasporto di particelle cariche*, Bollettino U.M.I., La matematica nella società e nella cultura, Serie 8, Vol.III-A, pp. 371-374, (2000).
- [M4] S. M., S. Totaro, *Solutions of the Vlasov equation in a slab with source terms on the boundaries*, Riv. Mat. Univ. Parma (6), **2**, pp. 33-47, (1999).
- [M3] S. M., S. Totaro, *Transport problems with nonhomogeneous boundary conditions*, Transp. Theor. Stat. Phys., **27**(3&4), pp. 371-382, (1998).
- [M2] S. M., S. Totaro, *Particle transport problems with general multiplying boundary conditions*, Transp. Theor. Stat. Phys., **27**(2), pp. 159-176, (1998).
- [M1] S. M., S. Totaro, *A three dimensional transport problem with nonhomogeneous boundary conditions*, Rapporto Matematico **314**, Dipartimento Roberto Magari, Université de Sienne, (1996).

# Références

- [1] D.J. Aldous. Deterministic and stochastic models for coalescence (aggregation, coagulation): a review of the mean-field theory for probabilists. *Bernoulli*, 5:3–48, 1999.
- [2] L. Ambrosio. Transport equation and cauchy problem for bv vector fields. *Inv. Math.*, 158(2):227–260, 2004.
- [3] L. Ambrosio. Transport equation and cauchy problem for non-smooth vector fields. In *Calculus of Variations and Nonlinear Partial Differential Equations*, Lecture Notes in Mathematics, pages 1–41. Springer Berlin / Heidelberg, 2008.
- [4] L. Ambrosio and G. Crippa. Existence, uniqueness, stability and differentiability properties of the flow associated to weakly differentiable vector fields. In *Transport Equations and Multi-D Hyperbolic Conservation Laws*, Lecture Notes, pages 3–60. Unione Matematica Italiana, 2008.
- [5] A. Ambroso. *Modélisation et Simulation d’écoulements de fluides complexes*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie., 2009.
- [6] J. A. Carrillo and L. Desvillettes and K. Fellner. Exponential decay towards equilibrium for the inhomogeneous aizenman-bak model. *Comm. Math. Phys.*, 278(2):433–451, 2008.
- [7] A. Arefmanesh and S.G. Advani. Diffusion-induced growth of a gas bubble in a viscoelastic fluid. *Rheol. Acta*, 30:274–283, 1991.
- [8] H. Babovsky. On a monte carlo scheme for smoluchowski’s coagulation equation. *Monte Carlo Meth. Appl.*, 5:1–18, 1999.
- [9] L. Baffico, C. Grandmont, and B. Maury. Multiscale modelling of the respiratory tract. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 20(1):59–93, 2010.
- [10] C. Bardos. Problèmes aux limites pour les équations aux dérivées partielles du premier ordre à coefficients réels; théorèmes d’approximation; application à l’équation de transport. *Ann. Scient. Ec. Norm. Sup.*, 4:185–233, 1970.
- [11] C. Bardos, F. Golse, and C. D. Levermore. Fluid dynamical limits of kinetic equations i. formal derivations. *J. Statist. Phys.*, 63:323–344, 1991.

- [12] C. Bardos, R. Santos, and R. Sentis. Diffusion approximation and computation of the critical size. *Trans. A. M. S.*, 284:617–649, 1984.
- [13] T. Beechem, K. Lafdi, and A. Elgafyl. Bubble growth mechanism in carbon foam. *Carbon*, 43:1055–1064, 2005.
- [14] N. Berglund and B. Gentz. *Noise-Induced Phenomena in Slow-Fast Dynamical Systems. A Sample-Paths Approach*. Springer, Probability and its Applications, 2005.
- [15] N. Berglund and D. Landon. Mixed-mode oscillations and interspike interval statistics in the stochastic fitzhugh-nagumo model. *a paraître*, 2012.
- [16] J.D. Blower, H.M. Mader, and S.D.R. Wilson. Coupling of viscous and diffusive controls on bubble growth during explosive volcanic eruptions. *Ear. Plan. Sci. Lett.*, 193:47–56, 2001.
- [17] R. Bogacz, E. Brown, J. Moehlis, P. Hu, P. Holmes, and J.D. Cohen. The physics of optimal decision making: A formal analysis of models of performance in two alternative forced choice tasks. *Physic. Rev.*, 113:700–765, 2006.
- [18] F. Bouchut and G. Crippa. Equations de transport à coefficient dont le gradient est donné par une intégrale singulière. *Sém. Éq. dér. part. (Polytechnique)*, 2007-2008:1–13, 2009.
- [19] F. Bouchut, F. Golse, and M. Pulvirenti. *Kinetic equations and asymptotic theory*. L.Desvillettes & B. Perthame ed. Editions Scientifiques et médicales, Paris, 2000.
- [20] F. Bouchut and F. James. One-dimensional transport equations with discontinuous coefficients. *Nonlin. Anal.*, 32(7):891–933, 1998.
- [21] F. Bouchut and F. James. Duality solutions for pressureless gases, monotone scalar conservation laws, and uniqueness. *Comm. Partial Diff. Eq.*, 24:2173–2189, 1999.
- [22] L. Boudin and L. Desvillettes. On the singularities of the global small solutions of the full boltzmann equation. *Monatsh. Math.*, 131(2):91–108, 2000.
- [23] L. Boudin, L. Desvillettes, C. Grandmont, and A. Moussa. Global existence of solutions for the coupled vlasov and navier-stokes equations. *Diff. Integ. Eq.*, 22(11-12):1247–1271, 2009.
- [24] L. Boudin, C. Grandmont, B. Grec, and D. Yakoubi. Influence of the spray retroaction on the airflow. *ESAIM: Proc. CEMRACS 2009*, 30:153–165, 2010.
- [25] E. Brown and P. Holmes. Modeling a simple choice task: stochastic dynamics of mutually inhibitory neural groups. *Stoc. Dyn.*, 1(2):159–191, 2001.

- [26] C. Buet, S. Cordier, and B. Lucquin-Desreux. The grazing collision limit for the boltzmann-lorentz model. *Asymp. Anal.*, 25(2):93–107, 2001.
- [27] C. Buet, B. Després, and E. Franck. Design of asymptotic preserving schemes for the hyperbolic heat equation on unstructured meshes. *Num. Math.*, 2012.
- [28] A. Burgisser and J.E. Gardner. Experimental constraints on degassing and permeability in volcanic conduit flow. *Bull. Volc.*, 67:42–56, 2005.
- [29] R. E. Calfisch. The fluid dynamic limit of the nonlinear boltzmann equation. *Comm. on Pure and Appl. Math.*, 33:652–666, 1980.
- [30] J. A. Carrillo, T. Goudon, and P. Lafitte. Simulation of fluid and particles flows: asymptotic preserving schemes for bubbling and flowing regimes. *J. Comput. Phys.*, 227(16):7929–7951, 2008.
- [31] J. A. Carrillo, T. Goudon, P. Lafitte, and F. Vecil. Numerical schemes of diffusion asymptotics and moment closures for kinetic equation. *J. Sci. Comput.*, 36(1):113–149, 2008.
- [32] N. Champagnat and P.-E. Jabin. The dynamic of one particle in any dimension with non *bv* force terms. *Comm. Partial Diff. Eq.*, 35(5):786–816, 2010.
- [33] B. Chouet, P. Dawson, and M. Nakano. Dynamics of diffusive bubble growth and pressure recovery in a bubbly rhyolitic melt embedded in an elastic solid. *J. Geophys. Res.*, 111, 2006.
- [34] S. Cordier, B. Lucquin-Desreux, and A. Sabry. Numerical method for vlasov-lorentz models. *ESAIM Proc. CEMRACS 1999.*, 10, 2000.
- [35] A. Costa, G. Macedonio, and A. Folch. A three-dimensional eulerian model for transport and deposition of volcanic ashes. *Ear. Planat. Sci. Let.*, 241:634–647, 2006.
- [36] M. Deaconu, N. Fournier, and E. Tanré. Study of a stochastic particle system associated with the smoluchowski coagulation equation. *Methodol. Comput. Appl. Probab.*, 5:131–158, 2003.
- [37] G. Deco and D. Martí. Deterministic analysis of stochastic bifurcations in multi-stable neurodynamical systems. *Biol. Cybern.*, 96(5):487–496, 2007.
- [38] P. Degond, G. Dimarco, and L. Mieussens. A moving interface method for dynamic kinetic-fluid coupling. *J. Comput. Phys.*, 227(10):1176–1208, 2007.
- [39] P. Degond, T. Goudon, and F. Poupaud. Diffusion limit for nonhomogeneous and non reversible process. *Ind. Univ. Math. J.*, 49:1175–1198, 2000.
- [40] P. Degond and S. Jin. A smooth transition model between kinetic and diffusion equations. *SIAM J. Num. Anal.*, 42(6):2671–2687, 2005.

- [41] P. Degond and B. Lucquin-Desreux. The fokker-planck asymptotics of the boltzmann collision operator in the coulomb case. *Math. Mod. Meth. Appl. Sci.*, 2(2):167–182, 1992.
- [42] P. Degond and B. Lucquin-Desreux. The asymptotics of collision operators for two species of particles of disparate masses. *Math. Mod. Meth. Appl. Sci.*, 6(3):405–436, 1996.
- [43] L. Desvillettes. On asymptotics of the boltzmann equation when collisions become grazing. *Transp. Theor. Stat. Phys.*, 21(3):259–276, 1992.
- [44] R.J. DiPerna and P.-L. Lions. Ordinary differential equations, transport theory and sobolev spaces. *Inv. Math.*, 98:511–547, 1989.
- [45] R.L. Drake. A general mathematical survey of the coagulation equation. *Topics in Curr. Aeros. Res. (Part 2)*, Int. Rev. in Aero. Phys. and Chem., Pergamon Press, Oxford, pages 203–376, 1972.
- [46] A. Eibeck and W. Wagner. An efficient stochastic algorithm for studying coagulation dynamics and gelation phenomena. *SIAM J. Sci. Comput.*, 22:802–821, 2000.
- [47] A. Eibeck and W. Wagner. Stochastic particle approximations for smoluchowski’s coagulation equation. *Ann. Appl. Probab.*, 11:1137–1165, 2001.
- [48] L. D. Erasmus, D. Eyre, and R. C. Everson. Numerical treatment of the population balance equation using a spline-galerkin method. *Comp. Chem. Eng.*, 8:775–783, 1994.
- [49] M. H. Ernst, R. M. Ziff, and E. M. Hendriks. Coagulation processes with a phase transition. *J. Colloid Interf. Sci.*, 97:266–277, 1984.
- [50] M. Escobedo, S. Mischler, and B. Perthame. Gelation in coagulation and fragmentation models. *Comm. Math. Phys.*, 231(1):157–188, 2002.
- [51] F. Filbet and S. Jin. A class of asymptotic-preserving schemes for kinetic equations and related problems with stiff sources. *J. Comp. Phys.*, 229(20):7625–7648, 2010.
- [52] F. Filbet and P. Laurençot. Numerical simulation of the smoluchowski equation. *SIAM J. Sci. Comput.*, 25:2004–2028, 2004.
- [53] F. Filbet, L. Pareschi, and G. Toscani. Accurate numerical methods for the collisional motion of (heated) granular flows. *J. Comp. Phys.*, 202(1):216–235, 2005.
- [54] A. F. Filippov. Differential equations with discontinuous right-hand side. *A.M.S. Transl.*, 42:199–231, 1964.

- [55] R. FitzHugh. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane. *Biophys. J.*, 1:445–466, 1961.
- [56] C.W. Gardiner. *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*. Springer, 1985.
- [57] J.E. Gardiner. Bubble coalescence in rhyolitic melts during decompression from high pressure. *J. Volc. Geoth. Res.*, 166:161–176, 2007.
- [58] F. Golse, S. Jin, and C.D. Levermore. The convergence of numerical transfer schemes in diffusive regimes i: discrete-ordinate method. *SIAM J. Numer. Anal.*, 36(5):1333–1369, 1999.
- [59] F. Golse and L. Saint-Raymond. The navier-stokes limit of the boltzmann equation for bounded collision kernels. *Inv. Math.*, 155(1):81–161, 2004.
- [60] L. Gosse and F. James. Numerical approximations of one-dimensional linear conservation equations with discontinuous coefficients. *Math. Comp.*, 69:987–1015, 2000.
- [61] L. Gosse and G. Toscani. An asymptotic-preserving well-balanced scheme for the hyperbolic heat equations. *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I*, 334:337–342, 2002.
- [62] L. Gosse and G. Toscani. Space localization and well-balanced schemes for discrete kinetic models in diffusive regimes. *SIAM J. Num. Anal.*, 41(2):641–658, 2003.
- [63] T. Goudon. On boltzmann equations and fokker-planck asymptotics: influence of grazing collisions. *J. Stat. Phys.*, 89(3-4):751–776, 1997.
- [64] T. Goudon and F. Poupaud. Approximation by homogenization and diffusion of kinetic equations. *Comm. Part. Diff. Eq.*, 26:537–569, 2001.
- [65] W. Greengberg, C. Van der Mee, and V. Protopopescu. *Boundary value problems in abstract kinetic theory*. Birkhäuser Verlag., 1987.
- [66] H. Guérin and S. Méléard. Convergence from boltzmann to landau process with soft potential and particle approximations. *J. Stat. Phys.*, 111(3-4):931–966, 2003.
- [67] A. Hodgkin and A. Huxley. A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve. *J. Physiol.*, 117:500–544, 1952.
- [68] F. James and N. Vauchelet. Chemotaxis: from kinetic equations to aggregate dynamics. *Nonlinear Differ. Equ. Appl.*, in press.

- [69] S. Jin and C.D. Levermore. Numerical schemes for hyperbolic conservation laws with stiff relaxation terms. *J. Comput. Phys.*, 126:449–467, 1996.
- [70] S. Jin and C.D. Levermore. Fully-discrete numerical transfer in diffusive regimes. *Transp. Theor. Stat. Phys.*, 22(6):739–791, 1993.
- [71] A. Jungel, A. Arnold, J.A. Carrillo, L. Desvillettes, J. Dolbeault, C. Villani, G. Toscani, C. Lederman, and P.A. Markowich. Entropies and equilibria of many-particle systems: An essay on recent research. *Monat. Mat.*, 142:35–43, 2004.
- [72] B. L. Keyfitz and H. C. Krantzer. A strictly hyperbolic system of conservation laws admitting singular shocks. *Nonlinear Evolution Equations that Change Type*, 89:107–125, 1990.
- [73] D. S. Krivitsky. Numerical solution of the smoluchowski kinetic equation and asymptotics of the distribution function. *J. Phys. A*, 28:2025–2039, 1995.
- [74] J. Kumar, M. Peglow, G. Warneke, and S. Heinrich. An efficient numerical technique for solving population balance equation involving aggregation, breakage, growth and nucleation. *Pow. Techn.*, 182:81–104, 2008.
- [75] V. Latocha. *Deux problèmes en transport des particules chargées intervenant dans la modélisation d'un propulseur ionique*. PhD thesis, INSA- Toulouse., 2001.
- [76] M. H. Lee. On the validity of the coagulation equation and the nature of runaway growth. *Icarus*, 143:74–86, 2000.
- [77] P. LeFloch. An existence and uniqueness result for two nonstrictly hyperbolic system. *Nonlinear Evolution Equations that Change Type*, 27:126–138, 1990.
- [78] M. Lemou and L. Mieussens. A new asymptotic preserving scheme based on micro-macro formulation for linear kinetic equations in the diffusion limit. *SIAM J. Sci. Comp.*, 31(1):334–368, 2008.
- [79] N.G. Lensky, O. Navon, and V. Lyakhovsky. Bubble growth during decompression of magma : experimental and theoretical investigation. *J. Volc. Geoth. Res.*, 129:7–22, 2004.
- [80] P.-L. Lions and G. Toscani. Diffuse limit for finite velocity boltzmann kinetic models. *Rev. Mat. Ib.*, 13:473–513, 1997.
- [81] S. Lovejoy, H. Gaonac'h, and D. Schertzer. Bubble distributions and dynamics : The expansion-coalescence equation. *J. Geophys. Res.*, 109, 2004.
- [82] A. A. Lushnikov. Evolution of coagulating systems iii. coagulating mixtures. *J. Coll. Int. Sci.*, 54(1):94–101, 1976.

- [83] M. Mangan and T. Sisson. Delayed, disequilibrium degassing in rhyolite magma: decompression experiments and implications for explosive volcanism. *Ear. Plant. Sci. Lett.*, 183:441–455, 2000.
- [84] A. Mangeney-Castelnau, F. Bouchut, J. P. Vilotte, E. Lajeunesse, A. Aubertin, and M. Pirulli. On the use of saint venant equations to simulate the spreading of a granular mass. *J. Geophys. Res.*, 110, 2005.
- [85] P. Michel, S. Mischler, and B. Perthame. General entropy equations for structured population models and scattering. *C.R. Acad. Sc. Paris Serie I*, 338(9):697–702, 2004.
- [86] P. Michel, S. Mischler, and B. Perthame. General relative entropy inequality: an illustration on growth models. *J. Math. Pures Appl.*, 84(9):1235–1260, 2005.
- [87] J. Nagumo, S. Arimoto, and S. Yoshizawa. An active pulse transmission line simulating nerve axon. *Proc. IRE.*, 50:2061– 2070, 1962.
- [88] G. Naldi, L. Pareschi, and G. Toscani. Spectral methods for one-dimensional kinetic models of granular flows and numerical quasi elastic limit. *Math. Mod. Num. Anal.*, 37(1):73–90, 2003.
- [89] L. Pareschi, G. Toscani, and C. Villani. Spectral methods for the non cut-off boltzmann equation and numerical grazing collision limit. *Num. Mat.*, 2002.
- [90] B. Popov and G. Petrova. Linear transport equations with discontinuous coefficients. *Comm. Partial Diff. Equ.*, 24:1849–1873, 1999.
- [91] B. Popov and G. Petrova. Linear transport equations with  $\mu$ -monotone coefficients. *J. Math. Anal. Appl.*, 260:307–324, 2001.
- [92] F. Poupaud and M. Rascle. Measure solutions to the linear multidimensional transport equation with discontinuous coefficients. *Comm. Partial Diff. Equ.*, 22:337–358, 1997.
- [93] A.A. Proussevitch and D.L. Sahagian. Dynamics and energetics of bubble growth in magmas: Analytical formulation and numerical modeling. *J. Geophys. Res.*, 103:18223–18251, 1998.
- [94] A.A. Proussevitch, D.L. Sahagian, and A.T. Anderson. Dynamics of diffusive bubble growth in magma: isothermal case. *J. Geophys. Res.*, 98:22283–22307, 1993.
- [95] A.A. Proussevitch, D.L. Sahagian, and A.T. Anderson. Stability of foams in silicate melts. *J. Volcanol. Geotherm. Res.*, 59:161–178, 1993.
- [96] S. Qamar and G. Warnake. Solving population balance equations for two-component aggregation by a finite-volume scheme. *Chem. Eng. Sci.*, 62:679–693, 2007.

- [97] D. Ramkrishna. Statistical models of cell populations. *Adv. Bioch. Eng.*, 11:1–47, 1979.
- [98] G. Rosebrock, A. Elgafy, T. Beechem, and K. Lafdi. Study of the growth and motion of graphitic foam bubbles. *Carbon*, 43:3075–3087, 2005.
- [99] A. Roxin and A. Ledberg. A neurobiological models of two-choice decision making can be reduced to a one-dimensional nonlinear diffusion equation. *Plos Comput. Biol.*, 4:43–100, 2008.
- [100] L. Saint-Raymond. Du modèle bgk de l'équation de boltzmann aux équations d'euler des fluides incompressibles. *Bull. Sci. Math.*, 126:493–506, 2002.
- [101] L. Saint-Raymond. Convergence of solutions to the boltzmann equation in the incompressible euler limit. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 166:47–8, 2003.
- [102] L. Saint-Raymond. From the bgk model to the navier-stokes equations. *Ann. Sci. Ecole Norm. Sup.*, 36(4):271–317, 2003.
- [103] L.E. Scriven. On the dynamics of phase growth. *Chem. Eng. Sci.*, 10:1–13, 1959.
- [104] T. Shea, L. Gurioli, J. F. Larsen, B. F. Houghton, J. E. Hammer, and K. V. Cashman. Linking experimental and natural vesicle texture in vesuvius 79 a.d. white pumice. *J. Volcanol. Geotherm. Res.*, 192:69–84, 2010.
- [105] M. Smoluchowski. Drei vorträge über diffusion, brownsche molekularbewegung und koagulation von kolloidteilchen. *Physik. Zeitschr.*, 17:557–599, 1916.
- [106] A. Toramaru. Numerical study of nucleation and growth of bubbles in viscous magmas. *J. Geophys. Res.*, 100:1913–1931, 1995.
- [107] M. Usher and J. L. McClelland. On the time course of perceptual choice: The leaky competing accumulator model. *Psych. Rev.*, 108:550–592, 2001.
- [108] C. Villani. Regularity estimates via the entropy dissipation for the spatially homogeneous boltzmann equation without cut-off. *Rev. Mat. Iberoam.*, 15(2):335–352, 1999.
- [109] C. Villani. *A review of mathematical topics in collisional kinetic theory*. S. Friedlander and D. Serre, Elsevier Science, 2002.
- [110] J.S. Vrentas and C.M. Vrentas. Slow bubble growth and dissolution in a viscoelastic fluid. *J. Appl. Polymer Sc.*, 67:2093–2103, 1998.
- [111] S.W.J. Welch. Direct simulation of vapor bubble growth. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 41:1655–1666, 1998.
- [112] A. Wiles. Modular elliptic curves and fermat's last theorem. *Ann. Math.*, 141:443–551, 1995.

- [113] H. R. Wilson and J. D. Cowan. Excitatory and inhibitory interactions in localized populations of model neurons. *Biophys. J.*, 12(1):1–24, 1972.
- [114] K. F. Wong and X. J. Wang. A recurrent network mechanism of time integration in perceptual decisions. *J. Neurosci.*, 26:1314–1328, 2006.
- [115] Y. Zheng and A. Majda. Existence of global weak solutions to one-component vlasov-poisson and fokker-planck-poisson systems in one space dimension with measures as initial data. *Comm. Pure and Appl. Math.*, 47:1365–1401, 1994.