

RAPPORT DE STAGE

Compression de maillage et problèmes d'évolution

Intégration temporelle et multirésolution adaptative pour les EDP en temps.

Étudiant : Alexandre EDELINE

École : ENSTA Paris - Institut Polytechnique de Paris

Période : du 14/04/2025 au 15/09/2025

Laboratoire : CMAP - École Polytechnique

Maîtres de stages : Marc MASSOT et Christian TENAUD

Tuteur académique : Patrick CIARLET

Remerciements

Je tiens à remercier...

Résumé

Résumé

Résumé du rapport de stage en français (150-300 mots). Présenter brièvement le contexte, les objectifs, la méthodologie, les principaux résultats et conclusions.

English abstract of the internship report (150-300 words). Briefly present the context, objectives, methodology, main results and conclusions.

Mots-clés : mot-clé 1, mot-clé 2, mot-clé 3, mot-clé 4, mot-clé 5

Keywords : keyword 1, keyword 2, keyword 3, keyword 4, keyword 5

Abstract

Table des matières

Remerciements	2
Résumé	3
Abstract	1
Liste des figures	4
Liste des tableaux	5
0.1 Introduction	6
0.1.1 Contexte du stage	6
0.1.2 Problématique et objectifs	6
0.1.3 Organisation du rapport	6
1 Présentation du laboratoire	7
1.0.1 Historique et activités	7
1.0.2 La recherche au CMAP	7
1.0.3 L'équipe HPC@Math et l'environnement de travail	8
2 Description du travail objectifs et état de l'art	9
2.1 Présentation du sujet et problématique générale	9
2.2 Quelques notions techniques	10
2.2.1 Intégrations des EDOs	10
2.2.2 Les équations d'advection-diffusion-réaction	12
2.2.3 Les trois opérateurs	13
Advection	13
Diffusion	13
Réaction	14
2.2.4 Difficultés mathématiques intrinsèques	14
2.2.5 Les stratégies de simulation	14
L'adaptation de maillage	14
Les techniques d'intégration	14
2.2.6 Simulation des EDPs d'évolution	14
2.2.7 Analyse de schéma numériques	15
2.2.8 La Multirésolution Adaptative	15
2.3 Objectifs	15
2.4 Méthode de travail et outils	15
3 Contribution	16
3.1 Conclusion	16

.1	Annexe A : Titre de l'annexe	18
.2	Annexe B : Titre de l'annexe	18

Table des figures

2.1	Exemple illustratif du comportement de l'erreur de l'approximation dans le cas d'un schéma d'ordre 2 avec une instabilité pour $\Delta t > 10^{-1}$	11
-----	---	----

Liste des tableaux

0.1 Introduction

0.1.1 Contexte du stage

Présentation de l'entreprise/laboratoire d'accueil, du contexte général du stage.

0.1.2 Problématique et objectifs

Description de la problématique abordée et des objectifs fixés pour le stage.

0.1.3 Organisation du rapport

Brève description de la structure du rapport.

Chapitre 1

Présentation du laboratoire

1.0.1 Historique et activités

Le Centre de Mathématiques Appliquées de l'École Polytechnique¹ (CMAP) a été créé en 1974 lors du déménagement de l'École Polytechnique vers Palaiseau. Cette création répond au besoin émergent de mathématiques appliquées face au développement des méthodes de conception et de simulation par calcul numérique dans de nombreuses applications industrielles de l'époque (nucléaire, aéronautique, recherche pétrolière, spatial, automobile). Le laboratoire fut fondé grâce à l'impulsion de trois professeurs : Laurent SCHWARTZ, Jacques-Louis LIONS et Jacques NEVEU. Jean-Claude NÉDÉLEC en fut le premier directeur, et la première équipe de chercheurs associés comprenait P.A. RAVIART, P. CIARLET, R. GLOWINSKI, R. TEMAM, J.M. THOMAS et J.L. LIONS. Les premières recherches se concentraient principalement sur l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles. Le CMAP s'est diversifié au fil des décennies, intégrant notamment les probabilités dès 1976, puis le traitement d'images dans les années 1990 et les mathématiques financières à partir de 1997. Le laboratoire a formé plus de 230 docteurs depuis sa création et a donné naissance à plusieurs startups spécialisées dans les applications industrielles des mathématiques appliquées.

1.0.2 La recherche au CMAP

Le CMAP comprend trois pôles de recherche : le pôle analyse, le pôle probabilités et le pôle décision et données. Chaque pôle accueille en son sein plusieurs équipes :

1. Analyse

- ◇ EDP pour la physique.
- ◇ Mécanique, Matériaux, Optimisation de Formes.
- ◇ HPC@Maths (calcul haute performance).
- ◇ PLATON (quantification des incertitudes en calcul scientifique), avec l'INRIA.

2. Probabilités

- ◇ Mathématiques financières.
- ◇ Population, système particules en interaction.
- ◇ ASCII (interactions stochastiques coopératives), avec l'INRIA.

1. <https://cmap.ip-paris.fr>

- ◇ MERGE (évolution, reproduction, croissance et émergence), avec l'INRIA.

3. Décision et données

- ◇ Statistiques, apprentissage, simulation, image.
- ◇ RandOpt (optimisation aléatoire).
- ◇ Tropical (algèbre $(\max, +)$), avec l'INRIA.

J'ai intégré l'équipe **HPC@Maths pole analyse**. De nombreuses équipes sont partagées entre le CMAP et l'INRIA ce qui démontre l'aspect appliqué du laboratoire.

1.0.3 L'équipe HPC@Math et l'environnement de travail

L'équipe HPC@Math L'équipe HPC@Math² travaille à l'interface des mathématiques de la physique (mécanique des fluides, thermodynamique) et de l'informatique pour développer des méthodes numériques complètes (schéma, analyse d'erreur, implémentation) pour la simulation des EDP. L'équipe se centre sur les problèmes multi-échelles; les EDPs cibles qui typiquement étudiées sont les équations d'advection-réaction-diffusion qui représente de manière générale le couplage entre la mécanique des fluides, la thermodynamique et la chimie (typiquement un problème de combustion). Tout cela se fait dans le contexte HPC (high performance computing). Le HPC désigne l'usage optimal des ressources informatiques disponibles cela peut être développer une simulation efficace sur une petite machine comme des schéma hautement parallélisable dans des paradigmes de calculs hybrides ou dans des contextes hexascale³. Ainsi l'application des méthodes développées est au cœur des réflexions de l'équipe.

Environnement de travail

2. <https://initiative-hpc-maths.gitlab.labos.polytechnique.fr/site/index.html>

3. Plateformes de calculs ayant une capacité de calcul théorique de 10^{16} opérations par seconde (hexaflops).

Chapitre 2

Description du travail objectifs et état de l'art

Cette partie décrit les objectifs de mon travail et les méthodes employées. Elle introduit également le lecteur au sujet et ses problématiques et fournis un état de l'art élémentaire des différents domaines convoqués.

2.1 Présentation du sujet et problématique générale

Mon travail participe à l'élaboration de méthodes numériques pour l'approximations des équations au dérivées partielles d'évolution. En particulier, j'ai travaillé sur les équations d'advections-diffusion-réaction. Elles représentent typiquement des systèmes physiques couplant mécanique des fluides, thermodynamique et réactions chimiques¹. Ces équations sont difficiles à simuler du fait de leur caractère multi-échelle². Pour gérer les différentes échelles spatiales, des méthodes de compression de maillage ont été mises en oeuvre. La méthode de compression utilisée ici est la multirésolution adaptative, Les différentes échelles temporelles³ sont usuellement gérées par force brute ou par séparation d'opérateurs. Ici nous allons également étudier des méthodes hybrides : les méthodes implicites-explicites (ImEx). Mon travail vise principalement à comprendre comment s'agence la multirésolution adaptative avec les différentes méthodes d'intégrations temporelles.

1. Typiquement des problèmes de combustion.

2. Une réaction chimique a des temps et distnaces typiques généralement plusieurs ordres de grandeurs plus faibles que les temps et distances typiques de la mécanique des fluides.

3. En terme technique, les différents termes des équations étudiées ont des raideurs très différentes.

2.2 Quelques notions techniques

2.2.1 Intégrations des EDOs

Bien des techniques d'approximation d'EDPs d'évolution font intervenir à un moment la résolution d'une équation différentielle ordinaire (EDO⁴), c'est à dire une équation différentielle ne faisant intervenir qu'une seule variable de différenciation (ici le temps). Nous commençons donc cette section par rappeler quelques notions d'analyse et de simulation des EDOs⁵.

Définition 2.2.1 (Équation différentielle ordinaire). Une équation différentielle ordinaire est une équation de la forme :

$$\begin{aligned} u' &= f(u, t) \quad u : t \in \mathbb{R}^+ \mapsto u(t) \in \mathbb{R}^d \\ u(0) &= u_0. \end{aligned} \tag{2.1}$$

Schémas explicites et implicites. L'approximation des EDO se fait grâce à des schémas numériques. Ceux-ci se divisent en deux catégories, les schémas explicites et les schémas implicites⁶. Dans ce qui suit on note u^n l'approximation de la solution d'une EDO au pas de temps n , c'est à dire que donné un pas de discrétisation temporel Δt l'objectif est d'avoir $u^n \approx u(t = n\Delta t)$.

Définition 2.2.2 (Schéma explicite). Un schéma numérique est dit explicite si le pas de temps $n + 1$ est obtenu grâce au pas de temps n , c'est à dire :

$$u^{n+1} = u^n + f(u^n, \Delta t). \tag{2.2}$$

Définition 2.2.3 (Schéma implicite). Un schéma numérique est dit implicite si le pas de temps $n + 1$ est obtenu grâce au pas de temps n et $n + 1$, c'est à dire :

$$u^{n+1} = u^n + f(u^{n+1}, \Delta t). \tag{2.3}$$

Ainsi, une itération d'un schéma implicite nécessite l'inversion d'un système linéaire ou non linéaire.

De fait une itération implicite est souvent plus coûteuse qu'une itération d'un schéma explicite⁷. Cependant pour des raisons de stabilité les méthodes explicites peuvent nécessiter des pas de temps bien plus fin, et donc bien plus d'itérations. Le choix entre méthode explicite et implicite dépend de bien des facteurs (du problème, du niveau de précision voulu, de la difficulté d'implémentation etc...) c'est un enjeu central de la simulation numérique.

Stabilité des schémas numériques Un schéma numérique d'ordre p converge vers la solution exacte de l'EDO avec une erreur qui décroît asymptotiquement en Δt^p lorsque le pas de

4. On utilisera aussi le terme *système dynamique*, même si en toute rigueur ce concept est un peu plus large.

5. Pour nos besoins nous nous restreignons au EDO du premier ordre.

6. Nous présentons ici seulement les schémas à un pas et non pas les schémas multi-pas. Ce choix est fait en raison de la barrière de Dhalquist.

7. En particulier si la dimension de la solution d est grande.

temps diminue. Cependant, cette convergence n'est garantie que si le schéma reste stable. L'instabilité se manifeste par une divergence de la solution numérique : au-delà d'un pas de temps critique Δt_0 , la norme de la solution discrète $\|u^n\|$ tend vers l'infini⁸. Cette instabilité peut s'interpréter de deux manières complémentaires : d'un point de vue mathématique, le schéma se comporte comme une suite géométrique de raison $|r| > 1$; d'un point de vue physique, le schéma introduit artificiellement de l'énergie dans le système à chaque itération. La contrainte de stabilité impose donc $\Delta t < \Delta t_0$. Lorsque ce seuil est très restrictif, la résolution de l'EDO nécessite un nombre important d'itérations, augmentant considérablement le coût calculatoire. Comme évoqué précédemment les méthodes explicites sont généralement plus bien sensibles à cette limitation que les méthodes implicites.

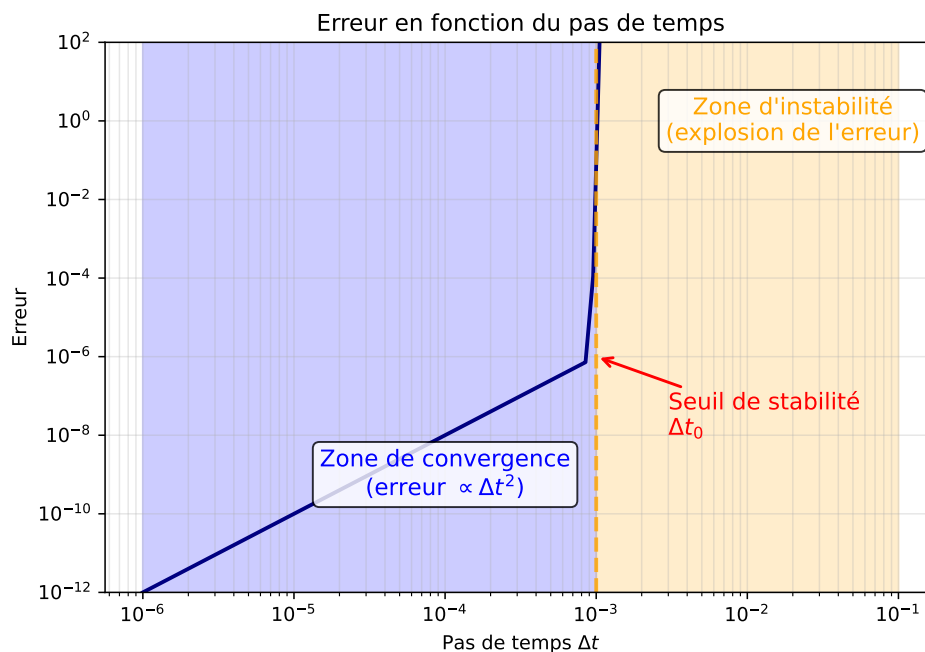


FIGURE 2.1 – Exemple illustratif du comportement de l'erreur de l'approximation dans le cas d'un schéma d'ordre 2 avec une instabilité pour $\Delta t > 10^{-1}$.

Définition 2.2.4 (Stabilité d'un schéma numérique). Un schéma numérique $n \mapsto u^n \in \mathbb{R}^d$ est stable si et seulement si :

$$\|u^{n+1}\| \leq \|u^n\|. \quad (2.4)$$

Pour un schéma d'intégration et une ODE fixée, cette condition peut être vérifiée ou non en fonction de la valeur du pas de discrétisation Δt .

La stabilité d'une méthode d'intégration d'EDO dépend entre autre de l'opérateur intervenant dans l'équation. Un opérateur prompt à poser des problèmes de stabilité.

Définition 2.2.5 (Problème raide). Un système dynamique, est dit raide si les méthodes ex-

8. Phénomène communément appelé "explosion" de la solution numérique.

plicités ne sont pas adaptées à sa résolution. En termes plus mathématiques le système

$$\frac{du}{dt} = f(u, t) \quad u(t) \in \mathbb{R}^d \forall t \geq 0. \quad (2.5)$$

est dit raide si la jacobienne de f , J_f possède de grandes valeurs propres négatives⁹.

En simplifiant, si un opérateur est raide, il impose une condition de stabilité très restrictive aux méthodes explicites et force à choisir des méthodes implicites¹⁰.

Exemple 2.2.6 (Équation de Dhalquist). Pour saisir de manière plus intuitive le concept de raideur, prenons le cas simple de l'équation de Dhalquist définissant le système suivant¹¹ :

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= -\lambda u, \quad \lambda > 0 \\ u(t=0) &= u_0 \end{aligned} \quad (2.6)$$

La solution analytique est : $u(t) = u_0 e^{-\lambda t}$. Ainsi passé quelque $1/\lambda$ la dynamique du système est au point mort. Grossièrement la dynamique digne d'intérêt du système se concentre entre $t=0$ et $t = \frac{10}{\lambda}$. Au delà, $u(t > \frac{10}{\lambda}) = o(u_0)$, la dynamique est terminée. Ainsi le lecteur comprend aisément que si l'on souhaite simuler le comportement d'un tel système, il faut prendre des pas de temps petits devant $|\lambda|^{-1}$. Si λ est de grande amplitude cela peut devenir très contraignant... Si l'on souhaite utiliser des méthodes explicites, c'est encore pire car la raideur du système n'est plus un simple contrainte de précision mais de stabilité. En effet si l'on cherche à approximer le système par un schéma d'Euler explicite, alors : $U^{n+1} = U^n(1 - \lambda\Delta t)$ alors la contrainte de stabilité est $\Delta t \lambda < 1/2$ ce qui est contraignant si λ est grand. Si $\lambda = 10^5$ alors il faut avoir $\Delta t \approx 10^{-5}$ donc pour simuler le système entre $t=0$ et $t=1$ il faut cent-milles points ! À l'inverse si l'on choisit un schéma d'Euler implicite : $u^{n+1} = u^n - \lambda\Delta t u^{n+1}$, alors la condition de stabilité devient : $\|(1 + \lambda\Delta t)^{-1}\| \leq 1$ ce qui est toujours vrai, quelque soit $-\lambda \in \mathbb{R}^-$, la raideur du système n'est pas un problème pour la méthode implicite. On comprend mieux la définition précédente *Un système dynamique, est dit raide si les méthodes explicites ne sont pas adaptées à sa résolution.*

Il existe plusieurs type de stabilité comme la A-stabilité (méthode stable indépendamment de la raideur du problème), la L-stabilité (schéma amortissant les hautes fréquences), par soucis de concision nous n'irons pas plus loin mais le lecteur intéressé se référera à [2].

2.2.2 Les équations d'advection-diffusion-réaction

Plaçons nous dans le contexte physique naturel des équations d'advection, diffusion, réaction : Des particules sont placées dans un milieu fluide où elles **diffusent**, ce milieu fluide est en mouvement, cet écoulement déplace les particules, il les **adecte**. Enfin les particules **réagissent** entre-elles et ces réactions modifient les grandeurs thermodynamiques (température, pression) et *in fine* les propriétés du milieu fluide. Les équations d'advection, diffusion, réaction modélisent donc ces trois phénomènes et leurs couplages respectifs.

9. Ici *grand* est à comprendre au sens de *grande amplitude devant d'autres valeurs propres*.

10. La réalité est plus nuancée, nous le verrons.

11. C'est le cas le plus simple d'une valeur propre négative

2.2.3 Les trois opérateurs

Advection

L'advection désigne le transport d'une quantité par un flot. L'opérateur d'advection le plus simple est l'opérateur de transport $c \frac{\partial}{\partial x}$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = c \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.7)$$

De manière générale un opérateur d'advection d'une quantité u par un flot \underline{a} s'écrit $\underline{a} \cdot \underline{\nabla} u$. Par exemple dans les équations de Navier-Stokes, l'opérateur $\underline{v} \cdot \underline{\nabla} \underline{v}$ représente la vitesse \underline{v} qui est transportée par elle même. Une version simplifiée de ce phénomène est l'équation bien connue de Burgers.

Les opérateurs d'advections sont généralement à valeurs propres imaginaires¹². Ainsi ils sont peu raides mais résonnants. Les méthodes explicites sont généralement les plus adaptées pour les traiter.

Diffusion

La diffusion désigne l'éparpillement de particules au sein d'un milieu fluide¹³. Ce phénomène est la limite macroscopique du déplacement microscopiques des particules à cause de l'agitation thermique. L'opérateur de diffusion le plus classique est celui de l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \Delta u. \quad (2.8)$$

Le spectre de cet opérateur est \mathbb{R}^- , il est donc infiniment raide. Lorsqu'il est discrétisé seul une partie de sa raideur est captée, en pratique la raideur de l'opérateur augmente quadratiquement avec la finesse de la discrétisation spatiale.

Cet opérateur est donc moyennement raide. Ainsi on pourrait penser qu'une méthode implicite est adéquate. Cependant ce n'est généralement pas le cas. En effet le coefficient de diffusion est généralement fonction de la température, et donc l'opérateur $D(T) \times \Delta(\cdot)$ varie généralement dans le temps et l'espace. Ainsi il faut inverser à chaque itération l'opérateur implicite, et comme c'est un opérateur non local¹⁴, il faut inverser une matrice de taille $d \gg 1$ dont la structure peut être très hétérogène. (car le coefficient de diffusion dépend de T et du milieu, donc *in fine* de \underline{x}). Aujourd'hui il est d'usage d'utiliser des méthodes explicites stabilisées qui parviennent à gérer la raideur moyenne¹⁵ comme les méthodes ROK2 et ROK4[1].

12. Par abus, s'il s'agit d'un opérateur non-linéaire on lui associera les valeurs propres de sa Jacobienne.

13. En théorie de l'information cela décrit la tendance de l'entropie augmenter et l'information à se moyennner, se flouter.

14. Si l'opérateur de diffusion était local on pourrait résoudre plusieurs petit systèmes, potentiellement en parallèle ce qui est bien moins coûteux qu'inverser un grand système. Pour se convaincre, inverser une matrice pleine de taille 10^6 coûte au moins 10^{18} opérations, alors qu'inverser 100 systèmes de taille 10^4 coûte $100 \times 10^{12} = 10^{14}$ soit dix mille fois moins, et si ces résolutions étaient parallélisées ce serait un million de fois moins.

15. Nous reviendrons sur ce qualificatif au prochain paragraphe.

Réaction

Les phénomènes sont en général bien adaptés aux méthodes implicites car extrêmement raides et locaux. En effet, les temps typiques d'une réaction chimique¹⁶ sont de l'ordre de la nano-seconde. De fait, ils sont très

2.2.4 Difficultés mathématiques intrinsèques

2.2.5 Les stratégies de simulation

L'adaptation de maillage

La multi-résolution adaptative

Autres méthodes

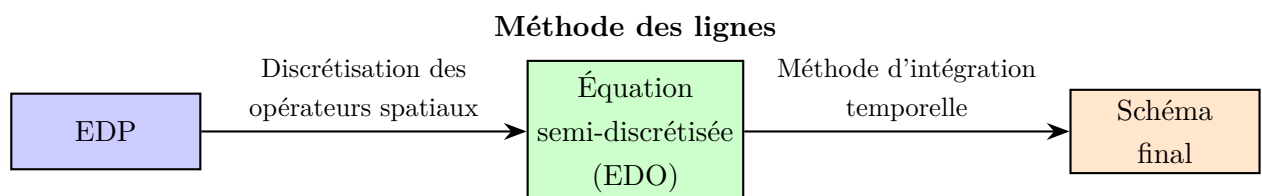
Les techniques d'intégration

Les méthodes ImEx

La séparation d'opérateurs

2.2.6 Simulation des EDPs d'évolution

Définition 2.2.7 (Méthode des lignes). Une méthode des lignes est une famille de méthodes numériques pour approximer les EDP d'évolutions. Elle consiste à discrétiser les opérateurs spatiaux de l'équation afin d'obtenir une équation semi-discrétisée en espace, puis à utiliser une technique d'intégration en temps, pour obtenir la discrétisation complète de l'équation.



Définition 2.2.8 (Méthodes d'intégration espace temps).

Dans la suite de notre étude nous allons utiliser le paradigme des volumes finis. Les volumes finis sont particulièrement adaptés aux lois de conservations. Les volumes finis discrétisent la valeur moyenne sur les mailles, alors que les différences finies discrétisent la valeur aux nœuds du maillage et les éléments finis discrétisent l'espace fonctionnel lui-même.

Définition 2.2.9 (Volumes finis). Donné un maillage $(C_j)_{j \in J}$ d'un domaine Ω , la discrétisation par volume fini approxime les quantités :

$$U_j = \frac{1}{|C_j|} \int_{C_j} u(x) d\Omega. \quad (2.9)$$

16. En réalité une réaction chimique simple (une combustion H_2/O_2 fait intervenir une dizaine de composés et réactions intermédiaires, dont les temps typiques sont très faibles.)

2.2.7 Analyse de schéma numériques

Stabilité... Convergence...

Définition 2.2.10 (Procédure de Cauchy-Kovaleskaya).

Définition 2.2.11 (Équation modifiée).

2.2.8 La Multirésolution Adaptative

...

2.3 Objectifs

2.4 Méthode de travail et outils

Chapitre 3

Contribution

...

3.1 Conclusion

Bibliographie

- [1] Assyf ABDULLE. “Fourth Order Chebyshev Methods with Recurrence Relation”. In : *SIAM Journal on Scientific Computing* 23.6 (2002), p. 2041-2054. DOI : [10.1137/S1064827500379549](https://doi.org/10.1137/S1064827500379549).
- [2] Ernst HAIRER, Syvert P. NØRSETT et Gerhard WANNER. *Solving Ordinary Differential Equations I : Nonstiff Problems*. 2^e éd. T. 8. Springer Series in Computational Mathematics. Springer Berlin, Heidelberg, 1993, p. XV, 528. ISBN : 978-3-540-56670-0. DOI : [10.1007/978-3-540-78862-1](https://doi.org/10.1007/978-3-540-78862-1). URL : <https://doi.org/10.1007/978-3-540-78862-1>.

.1 Annexe A : Titre de l'annexe

Contenu de la première annexe.

.2 Annexe B : Titre de l'annexe

Contenu de la deuxième annexe.