# RAPPORT DE STAGE

Étude des interactions entre adaptation spatiale par multirésolution et schémas numériques pour les équations d'advection-diffusion-réaction


**Étudiant :** Alexandre EDELINE
**École :** ENSTA Paris - Institut Polytechnique de Paris
**Période :** du 14/04/2025 au 17/10/2025

**Laboratoire :** CMAP - École Polytechnique
**Maîtres de stages :** Marc MASSOT et Christian TENAUD
**Tuteur académique :** Patrick CIARLET


7 octobre 2025

## Remerciements

Je remercie chaleureusement Marc Massot pour sa bienveillance, sa disponibilité et plus généralement pour m'avoir accompagné au cours de ce stage. Je tiens à faire particulièrement l'éloge de ses capacités de superviseur : guider la compréhension, encourager l'initiative, orienter la recherche et les expériences, aiguiller la rédaction ; un authentique mentor.

J'exprime également toute ma gratitude à Christian Tenaud avec qui les échanges ont beaucoup oeuvré à la rigueur et la clarification de mes travaux.

Merci à toute l'équipe du HPC@Math qui m'a beaucoup soutenu et dont le travail a beaucoup facilité mes recherches. Je suis sincèrement reconnaissant à Pierre, Laurent et Loïc pour la *"hotline samurai"* et plus généralement pour leur aide efficace, patiente et bienveillante qui m'a permis de surpasser des problèmes informatiques parfois idiots, parfois insidieux et souvent obscurs... Je souligne au passage l'effort de l'équipe Samurai pour intégrer les fonctionnalités demandées en un temps record !

Je remercie Richard et Ward pour leur aimable relecture et leurs conseils. Je remercie Antoine pour m'avoir aidé sur un *bug* qui me semblait insurmontable. Je salue tous les doctorant du CMAP, les remerciant pour les débats passionnants (parfois absurdes) et je remercie tous les chercheurs, toujours disponible pour expliquer et vulgariser leurs recherches.

Je remercie Théophane, pour son soutiens et nos échanges. Je remercie enfin mes parents dont le soutient m'a toujours permis de me concentrer exclusivement et sans inquiétude sur mes études.

# Abstracts


## Résumé en Français

**Mots-clés :** Schémas Numériques, Simulation des EDP d'Évolution, Multirésolution Adaptative, Méthodes ImEx, Advection-Diffusion-Réaction, Analyse d'erreur numérique, Analyse de stabilité.

---

Les systèmes couplant mécanique des fluides et chimie complexe se modélisent par les équations d'advection-diffusion-réaction (ADR), une classe d'équations aux dérivées partielles dont la résolution numérique requiert à la fois des stratégies d'adaptation de maillage (par exemple la multirésolution adaptative, MRA) et des méthodes d'intégration temporelle spécifiques (splitting, schémas ImEx). Ce travail étudie les interactions entre ces deux composantes (adaptation spatiale et intégration temporelle). Il apporte (i) une comparaison empirique de l'effet de la MRA sur les schémas de splitting et les schémas ImEx, ainsi qu'une une analyse (ii) théorique et (iii) numérique des couplage émergeant entre une méthode de Runge-Kutta classique et la MRA sur un problème de diffusion traité par méthode des lignes.

## English abstract

**Keywords :** Numerical Schemes, Evolution PDE Simulation, Adaptive Multiresolution, ImEx Methods, Advection-Diffusion-Reaction, Numerical Error Analysis, Stability Analysis.

---

Systems coupling fluid mechanics and complex chemistry are modeled by advection-diffusion-reaction (ADR) equations, a class of partial differential equations whose numerical resolution requires both spatial mesh adaptation strategies (such as adaptive multiresolution, MRA) and dedicated time integration methods (splitting, ImEx schemes). This work investigates the interactions between these two components (spatial adaptation and temporal integration). It provides (i) an empirical comparison of the effect of MRA on splitting and ImEx schemes, and (ii) a theoretical and (iii) numerical analysis of the coupling that emerges between a classical RungeKutta method and MRA on a diffusion problem solved with the method of lines.

# Table des matières

# Table des figures

# Chapitre 1

# Introduction

## 1.1 Présentation du laboratoire

### 1.1.1 Le laboratoire.

Le Centre de Mathématiques Appliquées de l'École Polytechnique [1] (CMAP) a été créé en 1974. 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. 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. Le CMAP comprend trois pôles de recherche : le pôle analyse, le pôle probabilités et le pôle décision et données. J'ai intégré l'équipe **HPC@Maths** du **pole analyse**.

### 1.1.2 L'équipe HPC@Math

L'équipe HPC@Math [2] travaille à l'interface des mathématiques, de l'informatique et de la physique pour développer des méthodes numériques efficaces pour la simulation des EDP. L'équipe s'intéresse entre-autre aux problèmes multi-échelles, au travers des équations d'advection-réaction-diffusion inscrivant toujours leurs travaux dans un contexte HPC (*high performance computing*). Ce terme désigne l'usage optimal des ressources informatiques disponibles et de leur architectures. Chaque méthode est développée en se demandant si elle pourra être facilement parallélisé, si elle pourra être déployée sur GPU ou sur un cluster de calcul de manière efficace.

1. https ://cmap.ip-paris.fr
2. https ://initiative-hpc-maths.gitlab.labos.polytechnique.fr/site/index.html

## 1.2 Présentation du sujet

Des moteurs aux batteries, des enjeux de défenses au nucléaire civil en passant par les problématiques de sécurité, de nombreux problèmes industriels font intervenir des systèmes physico-chimiques modélisés par un couplage entre la mécanique des fluides et des dynamiques chimiques complexes. Ces modèles décrivent par exemple les problèmes de combustion [24, 14], d'électrochimie [27], de corrosion [4] de propagation d'effluents [16]. Ces modèles font souvent intervenir d'équations d'advection-diffusion-réaction (ADR), une gamme d'équations au dérivées partielles (EDP) dont les trois opérateurs traduisent le couplage sus-mentionné. Elles comportent un opérateur d'*advection* (transport par un flux), un opérateur de *diffusion* (éparpillement de la matière par l'agitation thermique) et un opérateur de *réaction* (modélisant une ou plusieurs réactions chimiques).

Comme détaillé plus tard, ces équations sont difficile à simuler avec précision. L'objet du stage est donc de contribuer à l'élaboration de méthodes de résolution haute-résolution de ces EDPs.

Cette introduction présente d'abord les difficulté liées aux équations d'ADR (1.2.1), puis réalise un état de l'art des stratégies pour surmonter ces difficultés (1.2.2), vient enfin la problématique à laquelle les contributions du stage répondent (1.3).

### 1.2.1 Les difficultés des équations d'advection-diffusion-réaction

Les équations d'ADR posent deux difficultés majeures aux numériciens :

A. des opérateurs aux propriétés mathématiques antagonistes

B. des solutions multi-échelles

#### A Des opérateurs aux propritétés antagonistes

Le terme antagoniste signifie leurs propriétés sont très différentes et qu'alors, les méthodes numériques efficaces pour un opérateur sont inadaptées aux autres. Plus de détails sont donnés en 2.3 mais rapidement :

- les *méthodes explicites*[3] sont adaptés à l'opérateur d'advection, mais présentent des problèmes de *stabilité*[4] pour les opérateurs de réaction et de diffusion.
- le caractère local et très *raide*[5] de l'opérateur de réaction[6] pousse à utiliser des *méthodes implicites*[7], cependant le caractère non-local de la diffusion rend les coûts calculatoires prohibitifs.
- les méthodes explicites stabilisées comme [3] sont très adaptées à la résolution de l'opérateur de diffusion, mais ne sont assez stables pour l'opérateur de réaction.

Ainsi, une approche monolithique (qui traiterait tous les opérateurs d'un bloc) échouera systématiquement à simuler le système de manière satisfaisante.

3. Définition en 2.1
4. Définition de stabilité en 2.1
5. Définition d'opérateur raide en 2.1
6. Cette raideur viens des temps de relaxations très cours (quelques nanosecondes) des modèles de chimie complexe [34]
7. Définition en 2.1

#### B Des solutions multi-échelles

Les solutions des équations d'ADR sont souvent multi-échelles en temps et en espace [13] : pour obtenir une précision donnée, chaque zone spatio-temporelle requiert des niveau de résolution différents. Par exemple pour un problème de combustion, tant que l'allumage n'est pas initié, un pas de temps et une résolution spatiale grossiers représentent fidèlement le systèmes. En revanche après l'allumage, le pas de temps doit être réduit drastiquement pour rendre compte de la complexité des réactions de combustion déclenchées et, proche de la flamme, une résolution spatiale élevées est nécessaire pour rendre compte de sa structure complexe, alors que loin de la flamme une résolution grossière reste suffisante. Ainsi soit la résolution reste faible mais la précision médiocre ; soit elle est élevée partout mais une grande partie du coût en calcul est en mémoire est injustifié, car une part significative de la simulation ne requiert pas une telle résolution.

### 1.2.2 Les stratégies de simulation des équations d'advection-diffusion-réaction

Pour parer ces difficultés trois familles de stratégies existent :

A. Le découplage dopérateurs, permet de développer des schéma non-monolithique ou chaque opérateur est traité indépendamment des autres selon ses propriétés.

B. L'adaptation en espace, permet d'adapter localement la finesse du maillage, une résolution spatiale où la structure de la solution le demande (forts gradients, discontinuités...) et une résolution plus faible où la solution est lisse, simple, régulière.

C. L'adaptation du pas de temps (non-abordé ici mais traité par exemple en [13]).

Voici un bref état de l'art des stratégies de découplage d'opérateur et d'adaption en espace qui sont au coeur du stage.

#### A Les stratégies de découplage d'opérateurs

Deux approches de découplage d'opérateurs existent : la séparation (ou *splitting*) d'opérateurs et les méthodes implicites-explicites (ImEx). La frontière est poreuse entre ces deux concepts puisque certains schéma de *splitting* peuvent être vu comme des ImEx. Des détails mathématiques complémentaires sur les méthode ImEx sont présentés en 3.1.2.

**Le *splitting*** repose sur un développement de Taylor de l'exponentielle de matrice. Il s'agit en pratique de simuler les opérateurs les un après les autres de sorte que le résultat soit ne défèrent d'un schéma monolithique qu'à une erreur de *splitting* maîtrisée. Concrètement, la solution de l'EDP :

$$\begin{aligned} &\text{Trouver } u \in \mathscr{F}(\mathbb{R}^+, U) \text{ tel que :} \\ &\partial_t u = Au + Bu, \\ &u(t=0,\cdot) = u_0(\cdot). \end{aligned} \tag{1.1}$$

s'écrit comme :

$$u(t,\cdot) = e^{t(A+B)} u_0(\cdot). \tag{1.2}$$

où $e^{\cdot(A+B)} : \mathbb{R}^+ \to U$ est le semi-groupe correspondant à l'EDP (si $A$ et $B$ sont des matrices, c'est simplement lexponentielle de matrice). Le schéma de *splitting* de Lie, précis à l'ordre un repose sur le développement suivant :

$$e^{\Delta t(A+B)} u_0 = e^{\Delta t B} \underbrace{\circ e^{\Delta t A} u_0}_{\tilde{u_0}} + \underbrace{\mathcal{O}(\Delta t^2)}_{\text{Erreur de } splitting} . \tag{1.3}$$

En acceptant cette erreur de splitting local $\mathcal{O}(\Delta t^2)$, pour passer d'un état $u_0$ au temps $t$ à un état $u_1$ au $t + \Delta t$, il suffit de simuler l'opérateur $A$ à partir de $u_0$ pendant $\Delta t$ pour obtenir un état intermédiaire $\tilde{u}_0$, puis de simuler l'opérateur $B$ à partir de $\tilde{u}_0$ pendant $\Delta t$ pour obtenir $u_1$. À aucun moment ne sont précisés les schémas utilisés pour simuler $A$ et $B$, chacun peut être choisit spécifiquement pour l'opérateur simulé. Le *splitting* vient au prix d'une erreur entachée d'un terme supplémentaire : l'erreur de *splitting*. L'avantage est la liberté totale concernant le choix des schémas simulant chaque opérateur. Un des schémas de *splitting* les plus utilisés est le schéma de Strang [32], il permet de découpler deux opérateurs avec une précision d'ordre deux en temps.

**Les méthodes ImEx** se distinguent du *splitting* classique en imposant des conditions entre les schémas utilisés pour chaque opérateur, espérant tirer de cette contrainte une erreur de découplage plus faible et potentiellement monter en ordre plus facilement. Les premières méthodes ImEx (hors *splitting*) virent le jour à la fin des années 1990 avec les méthodes Runge et Kutta additives (ARK) par Ascher *et al* [5], complétés dans les année 2000 par [22] puis par [28]. Ces méthode reposent sur une combinaison de plusieurs méthodes Runge et Kutta (une par opérateur) préservant un ordre de convergence global. Cela a pavé la voie à des méthodes ImEx plus complexes intégrant par exemples des méthodes stabilisées [1] ou encore à des méthodes ImEx couplées espace-temps, faites sur mesures pour une équation spécifique [30].

### B Les stratégies d'adaptation en espace

L'objectif est ici d'utiliser le maillage avec le moins de points possibles tout en préservant une précision choisie.

**B.i Les stratégies *features-based* et *goal-based*** Plusieurs stratégies d'adaptation en espace existent et se déclinent en deux grandes catégories[33] :

1. Les approches *features-based* utilisent une quantité locale de la solution (par exemple la vitesse de l'écoulement) et ses gradients pour inférer localement le besoin de résolution spatial et adapter en conséquence.
2. Les approches *goal-based* utilisent une fonction de coût reflétant la qualité globale de la solution selon l'adaptation choisie. Généralement la fonction de coût est issue d'un problème adjoint sur une quantité d'intérêt.

**B.ii La multi-résolution adaptative (MRA)** Le stage se centre sur la *multi-résolution adaptative* [19] qui ne tombe dans aucune des deux catégories précédente. Puisqu'elle est fondée avant tout sur des arguments issus de la théorie de l'information. L'origine de la multirésolution adaptative remonte aux travaux d'Ami Harten [19] dans les années 1990 qui adapte une méthode de compression de donnée par analyse multi-échelle aux algorithmes de simulation. Ces travaux furent par la suite

prolongés entre autre dans [20, 9]. Cette technique permettant de réduire drastiquement les temps de simulation a été largement appliquée et est une approche très compétitive [12] pouvant tirer parti des infrastructures de calcul moderne (multi-coeur, GPU) [31].

Une présentation mathématique est proposée dans le préambule mathématique en 2.4. Succinctement, avec un schéma MRA, la solution est représentée sur plusieurs grilles de finesses différentes. L'adaptation (compression) consiste à ignorer l'information superflue contenue sur les grilles les plus fines, là où la solution est assez régulière. À une erreur de compression et de reconstruction près, un niveau de résolution maximal (grille fine) peut être retrouvé grâce à une reconstruction par interpolation polynomiale (décompression).

## 1.3 Problématique

Adapter spatialement un schéma numérique est clé sur les problèmes advection-diffusion-réaction qui sont souvent multi-échelles. Cependant, cela introduit des perturbations susceptibles d'altérer les propriétés du schéma. Concernant l'adaptation par multirésolution adaptative, le travail [6] a récemment révélé et étudié ces perturbations sur des problèmes d'advection. Toutefois, ces interactions demeurent mal comprises d'un point de vu général. Cela dépend *a priori* de nombreux de facteurs comme l'EDP, le schéma ou encore la façon dont la MRA est mise en place. En effet il existe plusieurs stratégies d'adaptation par multirésolution adaptative :

— *L'approche standard* est de faire évoluer la solution sur le maillage adapté (compressé) à partir des valeurs du maillage adapté - approche dite *sans reconstruction des flux*.

— *Une approche non-standard* est de faire évoluer la solution sur le maillage adapté, mais à partir de valeurs reconstruites, décompressées, plus précises - approche dite *avec reconstruction des flux*.

Les différences subtiles entre ces deux approches de la MRA suffisent à modifier les interactions avec le schéma ; l'analyse devient dautant plus difficile que les schémas dADR sont généralement complexes (ImEx, splitting, méthodes stabilisées, etc.). **Révéler et comprendre les interactions entre l'adaptation spatiale par multirésolution adaptative et les schémas numériques utilisés pour simuler les équations d'advection-diffusion-réaction.** Pour aborder cette vaste problématique, mon travail se concentre sur les interactions de la MRA avec les schémas de diffusion et de diffusion-réaction [8]. Il se décompose en trois contributions se focalisant sur différents points du problèmes :

- ◇ Quelles sont les propriétés des approches ImEx par rapport au splitting et surtout, quelle approche est la plus impactée par l'adaptation spatiale ?
- ◇ D'où viennent les interactions entre l'adaptation spatiale et l'intégration en temps et comment limiter ce couplage néfaste ?

8. Ce choix est fait car les problèmes d'advections ont déjà été étudiés en [6] et que l'objectif à terme est de proposer une analyse sur les trois opérateurs combinés : advection, diffusion, réaction.

## 1.4 Organisation du rapport

Le rapport est structuré comme suit.

- Ce chapitre pose le contexte, la problématique et les objectifs.
- Le Chapitre 2 sert de préambule mathématique et algorithmique : il rappelle les méthodes de discrétisation pour EDO et EDP, les équations d'advection-diffusion-réaction, quelques outils d'analyse de schémas numériques (stabilité, équations équivalentes), ainsi que les principes de la multirésolution adaptative ; le lecteur expérimenté peut le parcourir rapidement et s'y référer au besoin.
- Le Chapitre 3 rassemble trois contributions :
  - (3.1) : Une étude de la stabilité de deux méthodes ImEx ARK; suivie d'une comparaison avec un schéma de splitting de leur stabilité et convergence pour l'équation-test de Nagumo (réaction-diffusion).
  - (3.2) : Une étude théorique, via le calcul d'équations équivalentes, du comportement de l'erreur d'une schéma méthode des lignes pour un problème de diffusion. Cela dans trois contextes : `(I)` sans multirésolution adaptative, `(II)` avec une multirésolution adaptative MRA *standard*, `(III)` avec approche multirésolution adaptative *non-standard*, (reconstruction des flux).
  - (3.3) : Une étude expérimentale des différences entre les trois schéma de MRA mentionné précédemment permettant de mettre en relation les résultats théoriques de la contributions 3.2 avec les observations expérimentales.
- Le dernier chapitre (chapitre 4) conclut en trois volets : scientifique, technique et personnel.

# Chapitre 2

# Préambule mathématique

Ce préambule mathématique présente divers concepts innervant dans les travaux du stage. Le lecteur habitué peut ignorer ce chapitre et le consulter ponctuellement au besoin. Les sujets suivants y sont introduits :

- 2.1 Les méthodes de simulations des équations différentielles ordinaires (EDOs).
- 2.2 Les méthodes de simulations des équations aux dérivées partielles d'évolutions.
- 2.3 Les équations d'advection-réaction-diffusion et les difficultés numériques qu'elles posent.
- 2.4 La multi-résolution adaptative (MRA) comme méthode d'adaptation spatiale.

## 2.1 Intégrations des EDOs

Les techniques d'approximation d'EDPs d'évolution comportent souvent une étape nécessitant la résolution d'une équation différentielle ordinaire [1] (EDO), c'est à dire une équation différentielle ne faisant intervenir qu'une seule variable différenciée, généralement le temps. Cette section rappelle quelques notions d'analyse et de simulation des EDOs du premier ordre.

**Définition 2.1.1** (Équation différentielle ordinaire)**.** Une équation différentielle ordinaire (du premier ordre) est une équation de la forme :

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

### 2.1.1 Schémas explicites et implcites.

L'approximation des EDO se fait grâce à des schémas numériques, c'est à dire une suite d'élément $(u^n)$ de $\mathbb{R}^d$. Donnés une EDO et un pas de discrétisation temporel $\Delta t$, $u^n\mathbb{R}^d$ est approxime la solution de l'EDO au temps $t^n = n\Delta t$. C'est à dire que la suite $(u^n)_{n\in\mathbb{N}} \in (\mathbb{R}^d)^{\mathbb{N}}$ définie par un schéma numérique cherche à avoir à avoir $u^n \approx u(t = n\Delta t)$. Deux catégories de schémas numériques existent : les schémas explicites et les schémas implicites

**Définition 2.1.2** (Schéma explicite)**.** Un schéma numérique est dit explicite si la solution au pas de temps $n+1$ est obtenu seulement grâce à la solution pas de temps $n$. Cela se formule usuellement sous la forme :

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

**Définition 2.1.3** (Schéma implicite)**.** Un schéma numérique est dit implicite si la solution au pas de temps $n+1$ est obtenue au moins en partie grâce à la solution pas de temps $n+1$. Cela peut s'écrire écrit comme :

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

**Comparaison entre ces deux classes de schémas :** Une itération d'un schéma implicite nécessite donc l'inversion d'un système linéaire ou non linéaire sur $\mathbb{R}^d$. De fait, une itération implicite est généralement plus coûteuse qu'une itération d'un schéma explicite [2]. Cependant pour des raisons de stabilités (voir 2.1.3) 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.

### 2.1.2 Ordre de convergence d'un schéma

L'ordre de convergence permet de lier l'erreur des solutions numérique au pas de temps, c'est-à-dire de quantifier l'efficacité d'un schéma numérique. Pour définir la notion d'ordre de convergence

1. On utilisera aussi le terme *système dynamique,* même si en toute rigueur ce concept est un peu plus large.
2. En particulier si la dimension de la solution $d$ est grande.

d'un schéma numérique, il faut d'abord définir son erreur.

**Définition 2.1.4** (Erreur locale d'un schéma)**.** L'erreur locale d'un schéma numérique de résolution d'une EDO est l'erreur que commet le schéma sur un pas de temps. Autrement dit si l'on note $u$ la solution de l'EDO à partir d'un état initial $u_0 = u(t = 0)$ et $u_1$ l'approximation numérique proposée par la schéma pour un pas de temps $\Delta t$ à partir de l'était $u_0$, l'erreur locale est :

$$e(\Delta t) = \| u(\Delta t) - u_1 \|_{\mathbb{R}^d}. \tag{2.4}$$

**Définition 2.1.5** (Erreur globale d'un schméa)**.** L'erreur globale d'un schéma est l'erreur que commet le schéma sur plusieurs pas de temps. Si l'on note $u^n$ la solution numérique au temps $t^n = n\Delta t$, alors l'erreur globale du schéma jusqu'au temps final $T = N\Delta t$ peut être définie comme :

$$E(\Delta t) = \sum_{n=0}^{N} \| u^n - u(n^t) \|_{\mathbb{R}^d} \tag{2.5}$$

ou plus simplement encore :

$$E(\Delta t) = \| u^n - u(T) \|_{\mathbb{R}^d}. \tag{2.6}$$

**Définition 2.1.6** (Ordre de convergence)**.** Un schéma numérique de résolution d'une EDO est dit d'ordre $p$ si de manière équivalente :

- ◇ L'erreur locale vérifie : $e(\Delta t) = O(\Delta t^{p+1})$
- ◇ L'erreur globale vérifie : $E(\Delta t) = O(\Delta t^p)$

### 2.1.3 Stabilité et raideur

Un schéma numérique d'ordre $p$ converge asymptotiquement en $O(\Delta t^p)$ vers la solution exacte d'une EDO lorsque $\Delta t$ est assez petit. Cependant, cette convergence n'est effective que si le schéma est **stable**. Un schéma instable conduit à une divergence de la solution numérique : en pratique, au-delà d'un pas de temps critique $\Delta t_0$, la norme $\| u^n \|$ croît sans borne[3], comme illustré figure 2.1. Ainsi, pour entrer dans le régime asymptotique de convergence, il faut respecter une contrainte de stabilité de type $\Delta t \leq \Delta t_0$. Lorsque ce seuil est très faible, la simulation devient coûteuse car elle nécessite un grand nombre ditérations $T_{\text{final}}/\Delta t$. De manière générale, les schémas explicites sont plus sensibles à ces contraintes que les schémas implicites.

**Définition 2.1.7** (Stabilité d'un schéma numérique)**.** Un schéma numérique $\left(u^n\right)_{n\in\mathbb{N}} \in (\mathbb{R}^d)^{\mathbb{N}}$ est dit stable si la norme de la solution ne croît pas dun pas de temps à lautre :

$$\| u^{n+1} \| \leq \| u^n \|. \tag{2.7}$$

En pratique, cette condition est satisfaite lorsque $\Delta t$ reste inférieur à un seuil $\Delta t_0$ dépendant du problème et du schéma.

La stabilité dun schéma dépend directement du spectre de lopérateur $A$ dans léquation différentielle (cf. (2.1)). Lorsque $A$ possède des valeurs propres à grande partie réelle négative, les méthodes

3. Phénomène souvent appelé « explosion numérique ».

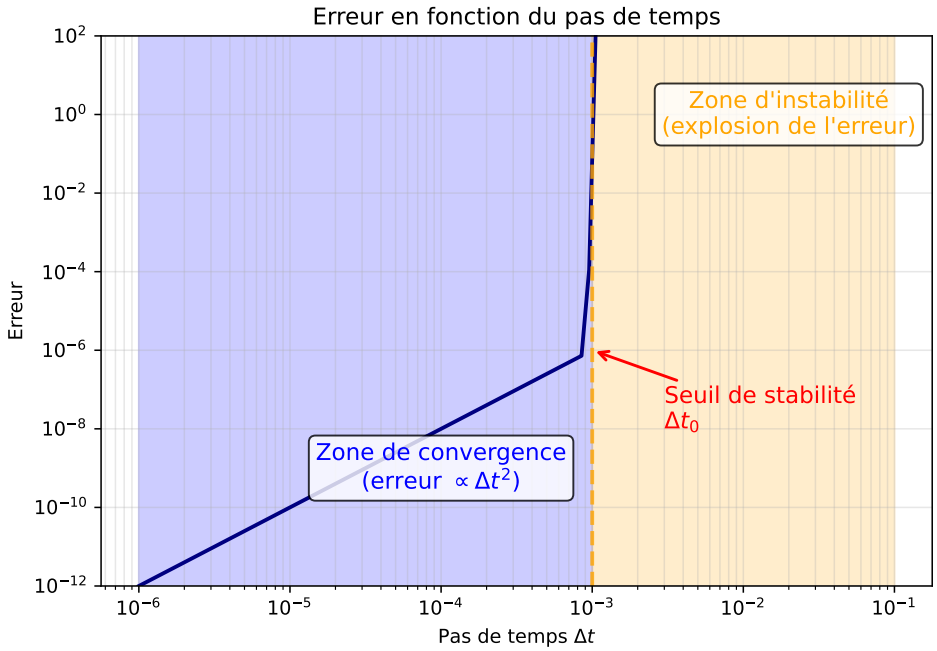



FIGURE 2.1 – Illustration du comportement attendu de l'erreur d'un schéma d'ordre deux dont le seuil d'instabilité est $\Delta t > 10^{-1}$.

explicites imposent des pas $\Delta t$ extrêmement petits pour rester stables. Dans ce cas, le problème est qualifié de *raide*.

**Définition 2.1.8** (Problème raide)**.** Un système dynamique

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = A(u,t), \qquad u(t) \in \mathbb{R}^d \tag{2.8}$$

est dit *raide* si la jacobienne $J_A$ admet des valeurs propres très négatives en valeur absolue, entraînant une condition de stabilité tellement restrictive que les méthodes explicites deviennent inutilisables en pratique.

Pour analyser la stabilité dun schéma, on utilise la notion de *fonction de stabilité*, introduite à partir de léquation test linéaire $u' = \lambda u$.

**Définition 2.1.9** (Fonction de stabilité)**.** Pour un schéma numérique appliqué à léquation $u' = \lambda u$, on définit lindice spectral $z = \lambda \Delta t$ et une fonction $S(z)$ telle que

$$U^{n+1} = S(z)\, U^n.$$

Le schéma est stable pour un pas $\Delta t$ donné si et seulement si

$$|S(z)| \leq 1. \tag{2.9}$$

**Exemple 2.1.10** (Équation de Dahlquist)**.** Considérons

$$u'(t) = -\lambda u(t), \quad \lambda > 0, \tag{2.10}$$

$$u(0) = u_0, \tag{2.11}$$

dont la solution exacte est $u(t) = u_0 e^{-\lambda t}$.

**Raideur.** Lorsque $\lambda$ est grand, la décroissance est très rapide. Un schéma explicite impose alors un pas $\Delta t$ extrêmement petit pour rester stable : le problème est dit raide car les explicites échouent par instabilité.

**Fonction de stabilité.** On pose $z = \lambda \Delta t$ et on calcule $S(z)$ :

— *Euler explicite :* $U^{n+1} = (1-z)U^n \Rightarrow S(z) = 1 - z$. Stabilité $\iff 0 \leq z \leq 2$, soit $\Delta t \leq 2/\lambda$. Pour $\lambda \gg 1$, la contrainte est prohibitive.

— *Euler implicite :* $U^{n+1} = \frac{1}{1+z} U^n \Rightarrow S(z) = \frac{1}{1+z}$. Ici $|S(z)| \leq 1$ pour tout $z \geq 0$ : aucune restriction sévère, même pour $\lambda$ très grand.

Cet exemple illustre la notion de raideur : un problème est dit raide lorsque les méthodes explicites deviennent inutilisables à cause de la contrainte de stabilité, alors quun implicite reste stable.

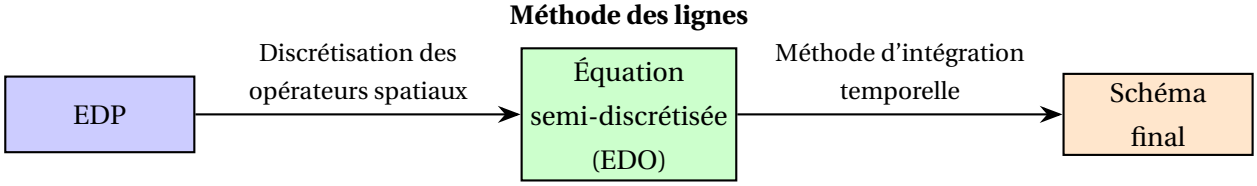
Pour aller plus loin, on peut introduire des notions plus fines (A-stabilité, L-stabilité), développées par exemple dans [18].

## 2.2 Simulation des EDPs d'évolution

Les équations aux dérivées partielles d'évolutions sont des EDPs dont une des variables différenciée est le temps. Cette section introduit divers éléments d'analyse et simulation pour ces équations. Elle introduit d'abord la notion de méthode des lignes, une approche classique d'élaboration de schéma numériques pour les EDPs d'évolutions. Puis elle présente la notion de volume fini qui est le paradigme de discrétisation spatiale utilisé dans ce stage. Enfin elle détaille quelques outils d'analyse des schémas numériques pour les EDPs dévolution (convergence, stabilité, analyse d'erreur).

### 2.2.1 Les méthodes des lignes.

**Définition 2.2.1** (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.




Il existe également des approches plus sophistiquées, comme les méthodes couplées espace-temps [11], mais ce stage se concentre sur les méthodes des lignes.

### 2.2.2 Les volumes finis

La technique de discrétisation spatiale utilisée dans ce travaille est celle des *volumes finis*[26]. Cette approche discrétise la valeur moyenne sur les cellules du maillage, là où les approches par *différences finies* [25] discrétisent la valeur au noeuds du maillage et celles par *éléments finis* [8] discrétisent l'espace fonctionnel lui même.

**Définition 2.2.2** (Volumes finis)**.** Donné une discrétisation d'un domaine $\Omega$ par un. maillage en cellules $(C_j)_{j\in J}$ dont le volume de l'ordre $\Delta x^d$ (ou $d$ est la dimension), la discrétisation par volume fini approxime les quantités :

$$U_j = \frac{1}{|C_j|}\int_{C_j} u(x)d\Omega. \tag{2.12}$$

Les volumes finis brillent lors de la simulation les lois de conservations, c'est à dire les EDPs de la forme :

$$\partial_t u = div(f(u)). \tag{2.13}$$

En effet lorsque cette relation est moyennée sur une cellule $C_j$ du maillage, cela donne :

$$\int_{C_j} \partial_t u = \int_{C_j} div(f(u)), \tag{2.14}$$

$$\partial_t U_j = \int_{\partial C_j} f(u). \tag{2.15}$$

La notions de flux est centrale dans l'approche par volume finie et très importante pour comprendre le travail réalisée en 3.2.

**Définition 2.2.3** (Flux physique)**.** Dans l'équation 2.15, le terme $\int_{\partial C_j} f(u)$ est appelé $\Phi_j$ le terme de *flux* de la cellule $j$ ; physiquement il quantifie "l'entrée de $f(u)$" au sein de la cellule $C_j$. En une dimension $\Phi_j = f(u_j^+) - f(u_j^-)$ ; le flux dépend simplement des valeurs à l'interface de la cellule.

La définition précédente est une intégrale de bord faisant intervenir les valeurs exactes de $u$ le long de l'interface. Malheureusement, paradigme des volumes n'offre qu'un accès au valeurs moyennes de $u$ sur chaque cellule. Ainsi, il faut approximer $\Phi_j$ à partir des valeurs moyennes.

**Définition 2.2.4** (Flux numérique)**.** Un *flux numérique* $\Psi$ est fonction permettant dapproximer $\Phi_j$ à partir des valeurs moyennes sur la cellule $j$ et les cellules voisines : $\Psi(U_{j-s},\dots,U_j,\dots,U_{j+s})$. Le nombre de cellules intervenant dans le calcul $s$ est appelé le *stencil*.

**Définition 2.2.5** (Flux numérique d'ordre $p$)**.** Pour être exploitable, un flux numérique doit être *consistant* à un ordre $p \geq 1$ avec la loi de conservation étudiée. Donné une solution $u$ de régularité $C^{p+1}$ un flux numérique est dit consistant à l'ordre $p$ si, $\forall\, j$ :

$$|\Psi\big(\tilde{U}_{j-s}(t),\dots,\tilde{U}_j(t),\dots,\tilde{U}_{j+s}(t)\big) - \Phi_j| = O(\Delta x^p). \tag{2.16}$$

Où $\tilde{U}_j$ désigne la moyenne exacte (et non une approximation) de $u$ sur la cellule $C_j$.

D'un point de vue méthode des lignes, le paradigme des volumes finis donne l'équation semi-discrétisée en espace suivante :

$$\partial_t U_j(t) = \Psi\big(U_{j-s}(t), \dots, U_j(t), \dots, U_{j+s}(t)\big), \tag{2.17}$$

il ne reste qu'à l'intégrer grâce à une méthode d'intégration des EDOs.

### 2.2.3 Analyse de schéma numériques

Pour qualifier une schéma numérique, sur différents sujets comme la faisabilité de sa mise en oeuvre, la qualité de la solution qu'il fourni ou encore la dynamique de l'erreur qu'il introduit, divers concepts ont étés développés. Ce qui suit introduit les notions pertinentes pour comprendre les travaux du stage :

- ◇ A L'analyse de stabilité.
- ◇ B.i La quantification de l'erreur grâce à l'étude de la convergence.
- ◇ B.ii La qualification de la dynamique de l'erreur grâce à la notion d'équation équivalente.

#### A Stabilité d'un schéma numérique

Les schémas simulant les équations au dérivées partielles ont les mêmes nécessités de stabilité, que ceux simulant les EDOs. D'ailleurs les méthodes des lignes transforment précisément une EDP en EDO. Pour éviter les redondances, le lecteur se référera à la partie 2.1. La seule différence entre la stabilité des schémas pour EDP et pour EDO est que, lorsque q'une EDP est résolue numériquement, la raideur de l'opérateur spatial discret dépend généralement explicitement du pas d'espace $\Delta x$. De fait condition de stabilité ne pas réellement EDP mais plutôt de l'EDO résultant de la discrétisation en espace. Cela mène à des conditions du type : $\Delta t \leq \lambda(\Delta x)$. La constante $\lambda$ est appelée la constante de stabilité, ou de manière parfois incorrecte la constante de Courant-Friedrich-Levy (CFL).

#### B Analyse de l'erreure

L'analyse de l'ordre de convergence d'un schéma permet de quantifier l'erreur asymptotique (c'est à dire lorsque les pas de temps et d'espace sont "assez petits") que commet le schéma.

**B.i Ordre de convergence d'un schéma** Les schémas numériques sont désignés par $\left(U_j^n\right)_{n,j}$ où $n$ représente le pas de temps et $j$ la cellule. Ainsi, si la grille contient $c$ cellules, pour tout $n$, $U^n$ est un élément de l'espace vectoriel $\mathbb{R}^c$. Le vecteur $\left(u(x_j, t^n)\right)_{j\in\{1,\dots,c\}}$ est noté $u(\cdot, t^n)$.

**Définition 2.2.6** (Erreur globale)**.** L'erreur globale $E_G$ d'un schéma $\left(U_j^n\right)_{n,j}$ sur un temps $T_f = N_f \Delta t$ peut être définie comme l'erreur au temps final :

$$E_G = \Delta x^d \| U^{N_f} - u(\cdot, T_f) \| \tag{2.18}$$

où $\|\cdot\|$ désigne une norme sur $\mathbb{R}^c$. Ou bien comme l'intégrale de l'erreur sur tous les pas de temps :

$$E_G = \sum_{k=0}^{N_f} \Delta x^d \| U^k - u(\cdot, t^k) \| \tag{2.19}$$

**Définition 2.2.7** (Ordre de convergence d'un schéma)**.** Un schéma $\left(U_j^n\right)_{n,j}$ est dit convergent à l'ordre $p$ en temps et $q$ en espace si son erreur de globale s'écrit : $E_G = O(\Delta t^p + \Delta x^q)$.

### B.ii Equation équivalente

**Définition 2.2.8** (Équation équivalente)**.** L'équation équivalente d'un schéma est l'EDP dont la solution satisfait le schéma. Elle est calculée par des développements de Taylor en temps et en espace. Comparer l'équation équivalente et l'équation cible fait alors naturellement apparaître les termes d'erreur et leur dynamique.

Ce qui suit décrit une méthode générique pour obtenir l'équation équivalente d'un schéma, la notion d'équation équivalente est clé dans la contribution en **??**.

**Première étape : développement de Taylor** L'existence d'une fonction assez régulière vérifiant le schéma est supposée. Dans le schéma numérique les termes $u_{k+\delta_x}^{n+\delta_t}$ sont remplacés par leur pendant continu : $u(x+\delta_x\Delta x, t+\delta_t\Delta t)$. Le développement de Taylor suivant est alors réalisé :

$$\begin{aligned} u(x+\delta_x\Delta x, t+\delta_t\Delta t) = u(x,t) &+ \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(\delta_x\Delta x)^i}{i!}\frac{\partial^i u}{\partial x^i}(x,t) \\ &+ \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(\delta_t\Delta t)^j}{j!}\frac{\partial^j u}{\partial t^j}(x,t) \\ &+ \sum_{i,j\geq 1} \frac{(\delta_x\Delta x)^i(\delta_t\Delta t)^j}{i!\cdot j!}\frac{\partial^{i+j} u}{\partial x^i \partial t^j}(x,t) \end{aligned} \tag{2.20}$$

L'équation aux dérivées partielles qui apparaît est l'équation équivalente. Elle peut être tronquée à l'ordre voulu.

**Deuxième étape : procédure de Cauchy-Kovaleskaya (optionnelle)** Afin d'enrichir l'analyse, et permettre le développement de schémas couplés espace-temps, l'étape précédente peut être suivie d'une procédure de Cauchy-Kovaleskaya. La procédure de Cauchy-Kovaleskaya consiste à utiliser la relation entre les dérivées en espace et en temps données par l'équation cible et remplacer les dérivées en temps par des dérivées en espace dans l'équation équivalente. Par exemple, pour un schéma ayant pour équation cible la diffusion $\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, cela consiste à écrire de manière itérée :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= D^2\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \\ \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} &= D^3\frac{\partial^6 u}{\partial x^6} \\ &\vdots \\ \frac{\partial^n u}{\partial t^n} &= D^n\frac{\partial^{2n} u}{\partial x^{2n}} \end{aligned} \tag{2.21}$$

**Dernière étape : relation entre le pas de temps et d'espace (optionnelle)** Lorsque le schéma est utilisé en pratique, il est courant d'imposer une relation entre les pas d'espace et de temps, par exemple une condition de stabilité du type $\Delta t \propto \Delta x$ ou $\Delta t \propto \Delta x^2$. Il est donc utile d'injecter cette

relation dans l'équation équivalente pour comprendre le comportement du schéma en conditions réelles.

Ces outils d'analyse numérique constituent les fondements nécessaires pour aborder la simulation numérique des EDPs. La section suivante présente la multi-résolution adaptative qui permet de réduire le coût en calcul et en mémoire de ces méthodes.

## 2.3 Les équations d'advection-diffusion-réaction

Le contexte physique naturel des équations d'advection, diffusion, réaction est le suivant : des particules sont placées dans un milieu fluide où elles **diffusent**. Ce milieu fluide est en mouvement, il déplace les particules, les **advecte**. 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 le couplage trois phénomènes.

Cette partie présente les propriétés trois opérateurs des équations d'ADR (2.3.1) et les difficultés liées à leur résolution numérique (2.3.2).

### 2.3.1 Trois opérateurs au propriétés mathématiques très différentes

#### A Advection

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

$$\frac{\partial u}{\partial t} = c\frac{\partial u}{\partial x} \tag{2.22}$$

De manière générale l'opérateur dadvection 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, le terme $\underline{v}\cdot\underline{\underline{\nabla}}\underline{v}$ modélise la vitesse $\underline{v}$ transportée par elle même. Une version simplifiée de ce phénomène est l'équation bien connue de Bürgers.

Le spectre des opérateurs d'advections sont généralement à valeurs propres imaginaires [25, Chap. 10]. Ainsi ils sont peu raides mais résonnants. Les méthodes explicites sont souvent les plus adaptées pour les traiter [25, Chap. 10].

#### B Diffusion

La diffusion désigne l'*éparpillement* de particules au sein d'un milieu fluide [4]. Ce phénomène est la limite macroscopique du déplacement microscopique des particules dû à l'agitation thermique. L'opérateur de diffusion le plus classique est celui de l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u. \tag{2.23}$$

Le spectre de cet opérateur est $\mathbb{R}^-$ [25, Chap. 9], il est donc infiniment raide. L'opérateur discret correspondant ne capte qu'une partie de ce spectre. En pratique la raideur de l'opérateur discret augmente de manière quadratique avec la finesse de la discrétisation spatiale [25, Chap. 9].

Cet opérateur moyennement raide (comparé aux opérateurs de réaction). Ainsi on pourrait penser qu'une méthode implicite est adéquate. Cependant ce n'est généralement pas le cas. En effet le coefficient de diffusion n'est souvent pas uniforme ni isotrope. La structure de la matrice de l'opérateur discrétisé évolue donc et à chaque itération il faut inverser un nouvel opérateur implicite. Cette tâche est rendue plus ardue encore car l'opérateur de diffusion couple tout l'espace, c'est-à-dire qu'il

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

est non local. [5], il faut inverser une matrice de taille $d >> 1$ dont la structure peut être très hétérogène (car le coefficient de diffusion varie dans l'espace). Aujourd'hui il semble plus pertinent d'utiliser des méthodes explicites stabilisées qui peuvent gérer sa raideur relative comme les méthodes ROK2 et ROK4[2]. Sans entrer dans les détails, la clé de ces méthodes consiste à prendre une méthode numérique explicite standard et lui ajouter des étages de sorte à ce que la fonction d'amplification résultante soit la fonction d'amplification de la méthode standard multipliée par un polynôme minimal sur $\mathbb{R}^-$ comme un polynôme de Tchebichev.

#### C Réaction

Les phénomènes de réaction sont en général bien adaptés aux méthodes implicites car ils sont locaux et extrêmement raides. En effet, les temps typiques d'une réaction chimique [6] sont de l'ordre de la nano-seconde [34]. De fait, les réactions chimiques sont très difficiles à simuler par des méthodes explicites. En revanche les méthodes implicites sont très efficaces dans ce contexte. En effet l'inversion de l'opérateur implicite peut être décomposé en plusieurs résolutions de petits systèmes ce qui est moins coûteux et parallélisable. Cela est permis grâce à la localité des réactions chimiques (à chaque pas de temps les particules au sein d'une cellule ne réagissent qu'avec les autres particules de la même cellule). En pratique cela signifie qu'il est possible de mettre en oeuvre une petite méthode implicite par cellule plutôt qu'une gargantuesque méthode globale ; ce qui revient à inverser un opérateur de petite dimension en chaque cellule et non inverser un énorme système.

### 2.3.2 Difficultés mathématiques intrinsèques

La simulations des équations d'advection-réaction-diffusion se heurte à deux difficultés majeures, **le couplage des trois opérateurs** mentionnés précédemment et **le caractère multi-échelles des solutions**.

#### A Première difficulté : le couplage des opérateurs

Le développement précédent montre que résoudre chaque phénomène individuellement, n'est pas insurmontable. Toutefois, les résoudre tous en même temps, c'est-à-dire les coupler, est en pratique très difficile. En effet, lorsque ces trois opérateurs sont couplés, il en résulte un unique opérateur qui doit être traité par une méthode numérique. C'est là que surgissent les difficultés : si la méthode est explicite (éventuellement stabilisée), la raideur de la réaction impose des pas de temps extrêmement restrictifs, à l'inverse si la méthode est implicite, la non-localité de la diffusion demande l'inversion d'un système de taille déraisonnable. Cette approche naïve, monolithique, n'est donc pas adaptée. Il faut par conséquent, trouver d'autres stratégies.

5. Si l'opérateur de diffusion eût été local il aurait pu être inversé en résolvant plusieurs petits systèmes et ce, potentiellement en parallèle. Cela serait bien moins coûteux qu'inverser un grand système. À titre d'exemple, inverser une matrice pleine de taille $10^6$ demande environ $10^{18}$ opérations, alors qu'inverser 100 systèmes de taille $10^4$ n'en demande $100\times10^{12} = 10^{14}$ soit dix mille fois moins. Si ces résolutions sont parfaitement parallélisés, alors l'accélération théorique serait d'un million. Malheureusement comme l'opérateur de diffusion couple tout l'espace ce n'est pas possible en dimension deux et trois.

6. En réalité une réaction chimique aussi simple en apparence qu'une combustion $H_2/O_2$ fait intervenir une dizaine de composés et réactions intermédiaires [10], dont les temps typiques sont très faibles.

**B Seconde difficulté : le caractère multi-échelles des solutions**

Les solutions étudiées sont souvent multi-échelles, en temps et en espace. Cela signifie que certaines zones spatio-temporelles requièrent une finesse d'approximation élevée pour pouvoir reproduire fidèlement le comportement physique, tandis qu'en d'autres zones une approximation grossière est suffisante. Prenons l'exemple d'un incendie. Au début le foyer est très restreint et seule cette zone doit être maillée finement, car partout ailleurs *il ne se passe rien*. Petit à petit l'incendie se propage et la zone à mailler finement augmente. Un autre exemple de phénomène multi-échelle est la détonation, il faut mailler finement, au foyer de l'explosion et le front de l'onde de choc. Mais la zone non atteinte par l'explosion, qui n'a pas encore reçu le choc, pourrait être maillée très grossièrement. Dans ces conditions, il est imaginable qu'un maillage naïf mène à ce qu'en certains instants, 90% du domaine soit maillé avec un pas d'espace 100 fois plus fin que nécessaire, or en trois dimension mailler 100 fois trop finement multiplie par un million le nombre de cellules. Il y a alors une grande inefficacité computationnelle.

### 2.3.3 Conclusion sur les équations d'ADR

Les solutions multi-échelles ainsi que le couplage des trois opérateurs rendent les équations d'advection-diffusion-réaction difficiles à résoudre numériquement. D'une part les trois ne peuvent être traitées efficacement par une approche monolithique classique. D'autre part, le caractère multi-échelle tend au gaspillage de ressources de calculs. Cette dernière difficulté pousse les numériciens vers des stratégies d'adaptation en espace, celle étudiée dans ce stage est la multi-résolution adaptative (MRA) dont les détails techniques sont donnés à la section suivante.

## 2.4 La Multirésolution Adaptative

La multi-résolution adaptative (MRA) est une méthode d'adaptation en espace, très efficace pour les problèmes multi-échelles. L'objectif est de concentrer les efforts computationnels là où ils sont nécessaires. Cette méthode est très étudiée par l'équipe du CMAP qui a développé le code Samurai [7] centré sur cette méthode. Concrètement cela consiste à augmenter la résolution de la grille de cal-

FIGURE 2.2 – Exemple de maillage adapté par multirésolution adaptative grâce au logiciel Samurai.

cul où la solution est complexe et la diminuer où la solution est simple à décrire. La MRA est donc une méthode de HPC (*high performance computing*) puisqu'elle vise à optimiser l'allocation des ressources de calcul.

Cette partie introduit le lecteur à cette méthode en présentant d'abord le concept mathématique de transformée multi-échelle (ou transformée en ondelette) qui est à la base de la MRA. Puis il est expliqué comment la transformée multi-échelle permet d'adapter le maillage pour optimiser la charge computationnelle. Une fois ces prérequis établis, l'algorithme typique de mise en oeuvre de la multirésolution adaptative est décrit. Vient enfin une présentation des différentes implémentations de la MRA.

### 2.4.1 La transformée multi-échelle

Cette partie présente la transformée multi-échelle discrète. La transformée multi-échelle continue en simulation numérique, c'est bien sûr la version discrète qui est utile. Elle se veut avant tout introductive et omets ou simplifie certaines notions; plus de détails sont donnés en [29].

#### A Définition mathématique

Les explications sont développées en dimensions un à des fins pédagogiques, la plupart des concepts s'entendent naturellement aux dimensions supérieures. De plus, la discrétisation de l'espace se fait

7. https://github.com/hpc-maths/samurai

selon une grille dyadique, d'autre choix pourraient être fait mais c'est un choix simple, naturel et standard. Il faut détailler cette notion.

**Définition 2.4.1** (Grille dyadique)**.** Une grille dyadique ou discrétisation dyadique d'un intervalle $I \subset \mathbb{R}$ est une série de partitions de $I$ indexées par des entiers $j \in J \subset \mathbb{N}^*$. La discrétisation de niveau $j$ correspond à une partitions de $I$ en $2^j$ intervalles (voir fig. 2.3). Ainsi à chaque changement de niveau, du niveau $j$ vers le niveau $j+1$, la résolution de la discrétisation est doublée. Les cases de cette partition dyadique sont indexées par deux entiers : $j$ le niveau de résolution de la grille et $k$ l'index de la case au sein de ce niveau. En particulier les cases $2k$ et $2k+1$ du niveau $j+1$ correspondent à la case $k$ du niveau $j$.

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Niveau $j-1$ | $k=0$ | | | | $k=1$ | | | |
| Niveau $j$ | $k=0$ | | $k=1$ | | $k=2$ | | $k=3$ | |
| Niveau $j+1$ | $k=0$ | $k=1$ | $k=2$ | $k=3$ | $k=4$ | $k=5$ | $k=6$ | $k=7$ |

FIGURE 2.3 – Exemple de grille dyadique

Dans ce qui suit il est supposé sans perte de généralité que la discrétisation se fait sur l'intervalle $[0,1]$, ainsi le niveau $j$ correspond à des cellules de tailles $1/2^j$ et la cellule $k$ du niveau $j$ est centrée en $x_k^j = \frac{k+(k+1)}{2}\frac{1}{2^j} = \frac{2k+1}{2^j}$. La notion d'ondelette se définit de la manière suivante :

**Définition 2.4.2** (Ondelette)**.** Une ondelette est une fonction $\Phi \in L^2(\mathbb{R})$ à support compact de moyenne nulle. Pour qu'une ondelette soit pertinente dans le cas de la transformée en multi-échelle il est requis que la famille $\left(x \mapsto \Phi(2^j k - x)\right)_{(j,k)\in\mathbb{Z}\times\mathbb{Z}}$ forme une base de $L^2(\mathbb{R})$. En effet la transformée en ondelette sera une projection sur cette base, un peu comme la transformée de Fourrier est une projection sur les fonctions trigonométriques.

Alors la transformée en ondelette discrète peut être définie :

**Définition 2.4.3** (Transformée en ondelette discrète - *Discrete Wavelet Transform, DWT*)**.** Donnée une fonction $f$, le coefficient $\gamma_k^j$ de sa DWT sur la cellule $k$ au niveau de résolution $j$ est :

$$\gamma_k^j = \frac{1}{N_j}\int_{\mathbb{R}} \Phi(2^j \cdot k - t) f(t) \mathrm{d}t, \tag{2.24}$$

Où $N_j$ est un coefficient normalisation dépendant du niveau $j$.

Contrairement à une transformée de Fourier, les coefficients ne dépendent pas d'une mais de deux variables. En effet, la transformée en ondelette est plus riche d'informations. Là où la transformée de Fourier ne donne qu'une information sur le contenu fréquentiel d'un signal, la transformée en ondelette donne une information sur le contenu en fréquence et sur la localisation de ce contenu fréquentiel.

### B La notion de détails

La multi-résolution adaptative se sert de la transformée multi-échelle pour adapter le maillage, c'est à dire compresser l'information (voir 2.4.2). Cela requiert l'introduction de la notion de détail. Ce concept permet de ne pas utiliser la transformée en ondelette pour quantifier le contenu absolu

porté par une échelle particulière, mais plutôt à comprendre en quoi ce contenu s'éloigne de ce que les échelles supérieures pourraient laisser supposer, en quoi il est *inattendu*. Pour résumer à partir d'un niveau de résolution $j$, on définit un **prédicteur** polynomial, qui tente d'inférer l'allure de la fonction au niveau $j+1$. Puis le **détail** ne cherche pas naïvement à quantifier et localiser l'information contenue aux échelles du niveau $j+1$ mais plutôt, à quantifier l'écart à la prédiction polynomiale.

**B.i Le prédicteur** Donné un point central $(x_0, y_0)$, et $2s$ voisins $(x_{-s}, y_{-s}), (x_{-s+1}, y_{-s+1}) \dots (x_{s-1}, y_{s-1}), (x_s, y_s)$, un prédicteur polynomial ponctuel cherche le polynôme $P$ de degré $2s$ passant par ces $2s+1$ points. Cela permet d'inférer des valeurs pour $y$ en tout point $x$. Pour trouver $P(X) = \sum_{k=0}^{2s} a_k X^k$ revient à résoudre le système linéaire :

$$\forall j \in \{-s, \dots 0, \dots, s\} : y_j = \sum_{k=0}^{2s} a_k x_j^k \tag{2.25}$$

Ce stage se focalise sur les volumes finis, donc ce n'est pas un prédicteur ponctuel, adapté au différences finies (voir **??**), qui est utilisé mais un prédicteur sur la valeur moyenne. Il ne cherche à imposer les valeurs en chaque point mais à fixer la valeurs moyenne sur chaque cellule, cela ajoute peu de complexité puisqu'il suffit d'ajouter une intégration lors de l'établissement du système linéaire pour travailler sur les valeurs moyennes. Pour l'usage que souhaité ici, il s'agit en d'évaluer la solution sur la cellule $k$ du niveau de résolution $j$ (ce qui correspond à la cellule de centre $x_k^j = (k+1/2)2^{-j}$) au niveau de résolution supérieure $j+1$, il faut donc appliquer le correcteur linéaire centré sur $x_k^j$ en $x_\pm = \pm 2^{-(j+1)}$. En pratique cela revient à faire une combinaison linéaire des $2s$ voisins qui vient corriger la valeur en $x_k^j$. Le prédicteur dépend donc du nombre de voisins pris de part et d'autre, ce nombre noté $s$ et appelé le *stencil* du prédicteur. Plus $s$ est grand plus l'opération de prédiction est précise (mais peut éventuellement devenir bruitée [8]) et plus elle est coûteuse. Le coût exact n'est pas évident à estimer puisque qu'une combinaison linéaire quelques termes se fait en $O(1)$ sur les machines modernes, toutefois quelques subtilités détaillé en 2.4.2 interviennent. Ainsi les valeurs usuelles tu stencil sont généralement $s = 1$ ou $s = 2$

**B.ii Les détails** À présent que le prédicteur à été décrit le concept de détail peut enfin être abordé. On suppose que l'on dispose d'une fonction $\tilde{u}^j$ qui soit une approximation de la fonction $u$, au niveau de résolution $j$. Comme vu précédemment, le prédicteur permet d'obtenir une approximation de $u$ au niveau $j+1$ grâce à $\tilde{u}^j$. Cette prédiction est noté $\hat{u}^{j+1}$. Les détails à la résolution $j+1$ sont alors définis comme les coefficient de la transformée multi-échelle de la différence entre cette prédiction et la vraie fonction : $u - \hat{u}^{j+1}$. Alors les coefficients de détails n'encode que ce qui n'était pas prédictible par l'interpolateur polynomial. Ce concept de détail est essentiel. En pratique on ne réalise pas l'opération comme expliqué plus haut puisque à prédicteur et ondelette fixés $\Phi$, il existe une *ondelette duale* $\Psi$ qui permet directement d'obtenir les détails pour la DWT sur $\Phi$ en réalisant une DWT sur $\Psi$ ce qui accélère considérablement les calculs.

Une autre façon de voir la notion de détail est la suivante : pour un niveau de résolution $j$ on note $V_j = \text{Vect}\left((\Phi_k^j)_k\right)$, c'est à dire l'ensemble de fonction représentables par les ondelettes de niveau $j$. Pour les ondelettes classiques [9] la relation suivante est vérifiée $V_0 \subset V_1 \subset V_2 \subset \dots \subset V_N$. Et bien alors

8. Ce n'est pas détaillé ici mais le lecteur se réfèrera à la théorie de l'interpollation...
9. C'est en tout cas vrai pour les ondelettes de Haar[29].

l'espace des détails, celui accessible par l'ondelette duale est $Q_{j+1}$ le supplémentaire de $V_j$ dans $V_{j+1}$, en d'autre terme, il représente toutes les informations, les *détails* contenues dans le niveau d'approximation $V_{j+1}$ qui n'étaient pas prise en compte par $V_j$ (à l'échelle $j$ ce n'était que des détails). Les coefficients de la décomposition par l'ondelette duale sont Ainsi grâce à l'ondelette duale, il est possible de calculer les coefficients de détails $d_k^j$ qui à chaque montée en résolution n'encode que l'information qui n'était pas contenue dans la décomposition en ondelette au niveau précédent.

Les deux visions ne sont pas rigoureusement les mêmes, la première représente ce qui est réalisé en pratique lors de la MRA, la seconde est la vision standard de la théorie des ondelettes. Toutefois les deux approches ont la même motivation, ne calculer et ne mettre en valeur à chaque niveau que ce qui est nouveau, ce qui n'était pas contenu dans les niveaux précédents.

**B.iii Intuition sur les détails** Lorsque l'on s'intéresse aux coefficients de détails $d_k^j$, l'indice $j$ de *dilatation* fixe l'échelle analysée, c'est à dire la longueur d'onde analysée. Par exemple si $j = 5$, les coefficients $d_k^5$ donne une information sur l'information portée par les longueurs d'onde de l'ordre de $2^{-5} = 1/32$. La variable $k$ précise l'indice de la cellule analysée. Par exemple $\|d_1^5 0\| > \|d_5^5\|$ signifie que l'information portée par l'échelle $1/32$ est plus importante au voisinage de la case 10 qu'au voisinage de la case 5. De même si $\|d_7^j\| > \|d_{14}^{j+1}\|$ cela signifie qu'au voisinage de $x = \frac{7}{2^j}$ les longueurs d'ondes $\frac{1}{2^j}$ sont plus présentes que les longueurs d'ondes $\frac{1}{2^{j+1}}$. Pour se fixer les idées, c'est comme si la transformée de Fourrier n'avait qu'une vision globale du contenu en fréquence, quelle ne voyait que la moyenne sur le domaine de la transformée en ondelette pour chaque longueur d'onde.

$$\|TF[f](\omega = 2^j)\|^2 \sim \|\sum_k d_k^j\|^2. \tag{2.26}$$

Grâce à cette notion de détaille la décomposition multi-échelle permet une description de la solution physique où l'apport à la solution de chaque échelle, de chaque distance typique est quantifié, les coefficients $d_k^j$ décrivant l'information contenue dans les échelles de l'ordre de $2^{-j}$.

### 2.4.2 L'adaptation

#### A La compression par décomposition multi-échelle

Pour compresser une fonction (ou une image comme dans le processus `jpg`), le processus est très simple, il suffit de fixer un seuil de compression $\varepsilon > 0$, de calculer les coefficients de détails de la fonction, puis d'omettre (en pratique de retirer de la mémoire) les coefficient dont la norme est inférieure à $\varepsilon$. En pratique le coefficient de compression dépend du niveau étudié puisque le volume des cellules mise en jeu chute avec le niveau $j$ (un détail de $10^{-2}$ à moins d'importance s'il porte sur des cellules de taille 10 que sur des cellules de taille $10^{-5}$). En pratique l'algorithme serait le suivant :

1. Calculer les coefficients $d_k^j$.
2. Pour chaque niveau $j$ et chaque coefficient $d_k^j$ : Si $|d_k^j| < \varepsilon_j = 2^{-j}\varepsilon$, alors $d_k^j \leftarrow 0$, les coefficients sont seuillés.

   Pour reconstruire au niveau de résolution souhaité : utiliser les détails jusqu'au niveau $j$ le plus fin conservé puis utiliser le prédicteur pour interpoler jusqu'au niveau désiré. Le vocabulaire est heureusement choisit, pour compresser on omet les détails négligeables l'on conserve les détails importants.

#### B L'adaptation de maillage et l'heuristique d'Harten

L'adaptation de maillage, est une variation de la compression par décomposition multi-échelles précédemment décrite. C'est est une opération de compression de solutions physiques *prudente*. Les coefficients y sont seuillés de manière moins impitoyable : certains coefficients qui devraient être écartés par la compression sont malgré tout préservés. Ce choix se fait sur la base d'intuitions physiques, la plus connue étant *l'heuristique d'Harten*, introduite par Ami Harten [19], le père de la MRA. Elle stipule que même si un coefficient de détail $d_k^j$ devrait être supprimé, si le niveau de détail du niveau supérieur (c'est à dire $d_{\lfloor k/2 \rfloor}^{j-1}$) est particulièrement élevé, par exemple qu'il est par deux fois supérieur au seuil $\varepsilon_{j-1}$, alors le coefficient doit être conservé. En d'autre terme, même si la compression considère l'information à l'échelle $j$ négligeable, l'intuition physique pose son véto puisque les échelles supérieurs sont de grandes magnitudes et que cela présage que dans les pas de temps a venir les échelles seront nécessaires à la fidèle capture des phénomènes physiques simulés. Par exemple cela peut signifier qu'un front d'onde est en train d'arriver dans les zone étudiée, il faut donc que la simulation puisse en capter toute la richesse.

### 2.4.3 Algorithmes d'adaptation spatiale par MRA

#### A Algorithme général

L'intégration de la MRA s'effectue ainsi : à intervalles réguliers, on adapte la grille en appliquant la transformée multi-échelle et en supprimant les coefficients de détail superflus, guidé par l'heuristique de Harten. Lorsqu'une zone compressée doit être raffinée de nouveau, seuls les détails nécessaires à la bonne résolution des flux sont reconstruits par le prédicteur polynomial. On ne reconstruit donc pas l'entièreté de la solution, uniquement les coefficients indispensables. La simulation se poursuit ensuite sur cette grille adaptée.

Ce processus permet d'économiser mémoire et temps de calcul, puisque l'on stocke et manipule uniquement les niveaux de détail requis par la dynamique de la solution.

#### B Le cas des volumes finis

Dans un cadre de volumes finis, ń poursuivre la simulation sur la grille adaptée ż signifie prédire, pour chaque cellule de taille variable, la valeur moyenne au pas de temps suivant. On procède en évaluant un flux numérique aux interfaces de chaque cellule à partir des valeurs disponibles. En régime classique, les schémas de volumes finis reposent sur des cellules de tailles homogènes d'ordre $\Delta x^d$. L'adaptation par MRA introduit une subtilité : les flux peuvent être calculés directement à partir des valeurs sur la grille adaptée (méthode dite *sans reconstruction*), ou bien à partir de valeurs reconstruites au niveau de détail le plus fin (méthode dite *avec reconstruction*). Dans le premier cas, on profite pleinement de la compression ; dans le second, on limite le nombre de flux à calculer mais on reconstruit localement les valeurs pour obtenir une évaluation plus précise. Cette seconde approche non standard offre potentiellement un meilleur compromis entre coût et précision.

# Chapitre 3

# Contribution

Ce chapitre présente rassemble les trois contributions du stage :

- (3.1) : Une étude de la stabilité de deux méthodes ImEx ARK ; suivie d'une comparaison avec un schéma de splitting de leur stabilité et convergence pour l'équation-test de Nagumo (réaction-diffusion).
- (3.2) : Une étude théorique, via le calcul d'équations équivalentes, du comportement de l'erreur d'une schéma méthode des lignes pour un problème de diffusion. Cela dans trois contextes : `(I)` sans multi-résolution adaptative, `(II)` avec MRA standard, `(III)` avec MRA non-standard (reconstruction des flux).
- (3.3) : Une étude expérimentale des différences entre les trois schéma de MRA mentionné précédemment permettant de mettre en relation les résultats théoriques de la contributions 3.2 avec les observations expérimentales.

## 3.1 Étude de méthodes ImEx sur une équation de diffusion-réaction

L'objectif est de comparer la pertinence des méthodes RK implicites-explicites au *splitting* d'opérateurs traditionnel. Pour introduire cette première étude l'équation de Nagumo est d'abord présentée comme un excellent cas test pour éprouver les méthodes de résolution des équations d'advection-diffusion-réaction. Dans un second temps les méthodes ImEx utilisées sont détaillées. Par la suite leur stabilité est évaluée dans un contexte général ; puis en se focalisant sur l'équation de Nagumo, où elles sont comparée à une méthode de séparation d'opérateur classique (splitting de Strang). Ceci permet de valider la pertinence *a priori* de ces méthodes sur les équations de réaction-diffusion, et mène naturellement à une étude de convergence expérimentale.

### 3.1.1 L'équation de Nagumo

L'équation de Nagumo (ou FitzHugh-Nagumo) est issue de modèles de transmission de l'information nerveuse [15]. L'étude travaille sur la forme spatiale de l'équation [21] avec un terme de réaction cubique introduisant de la non-linéarité :

$$\partial_t u = \underbrace{D\partial_{xx} u}_{\text{diffusion}} - \underbrace{ku(1-u^2)}_{\text{réaction}}. \tag{3.1}$$

#### A Solutions Analytiques

L'équation admet des solutions propagatives sous la forme [1] :

$$u(x-ct) = \frac{e^{\sqrt{\frac{k}{2D}}\left((x-x_0)-ct\right)}}{1+e^{-\sqrt{\frac{k}{2D}}\left((x-x_0)-ct\right)}} \tag{3.2}$$

Avec : $c = \sqrt{\frac{kD}{2}}$ et $x_0$ le point de départ de l'onde.
Ainsi, le produit $kD$ fixe la vitesse et le ratio $\frac{k}{D}$ la magnitude du gradient d'espace.

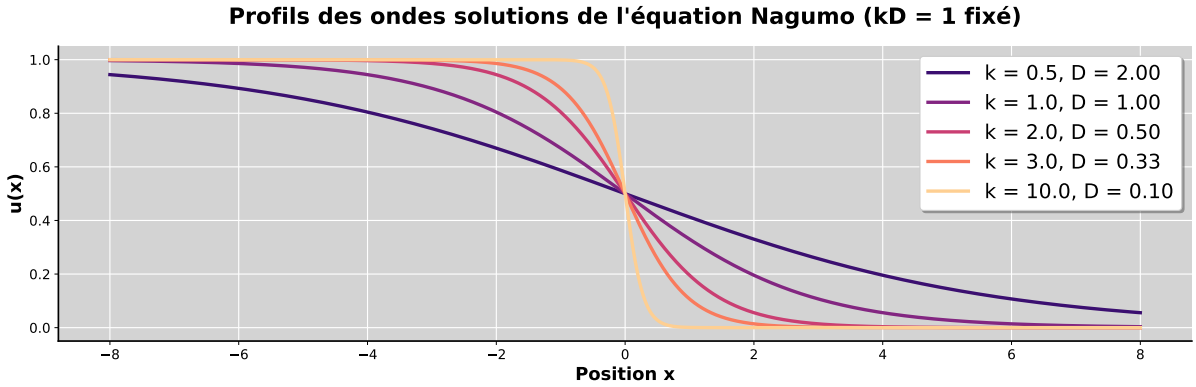



FIGURE 3.1 – Profils des ondes solutions de l'équation de Nagumo pour différents ratios $k/D$ avec le produit $kD = 1$ fixé (c'est à dire à vitesse fixée). L'augmentation du ratio k/D accentue le gradient spatial.

#### B Analyse des opérateurs

Un analyse des deux opérateurs de l'EDP est nécessaire pur en saisir les enjeux. *L'opérateur de diffusion* est non-local et, discrétisé à l'ordre deux par $n$ points et un pas $\Delta x$, les valeurs propres associées sont $\left\{\frac{2D}{\Delta x^2}\left(\cos\frac{p\pi}{n+1}-1\right) \mid p \in \{1,\dots,n\}\right\}$ [7], ainsi la raideur du terme de diffusion croit linéairement avec le coefficient de diffusion $D$ et de manière quadratique avec la finesse du maillage $1/\Delta x$. En effet les valeurs propres sont négatives et :

$$\max_p \left|\cos\frac{p\pi}{n+1}-1\right| \sim 2, \tag{3.3}$$

$$\min_p \left|\cos\frac{p\pi}{n+1}-1\right| \sim \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{n+1}\right)^2. \tag{3.4}$$

1. C'est une sigmoïde, qui se propage à vitesse $\sqrt{\frac{kD}{2}}$ [13].

Et donc :

$$\frac{\max_p |1-\cos\frac{p\pi}{n+1}|}{\min_p |1-\cos\frac{p\pi}{n+1}|} \approx n^2 \propto \left(\frac{1}{\Delta x}\right)^2. \tag{3.5}$$

Concernant *le terme de réaction*, en choisissant un état initial correspondant à 3.2, la solution reste entre 0 et 1. Ainsi le terme de réaction est local en espace, et ses valeurs propres sont comprises entre $-k$ et $2k$. En fonction de la valeur de $u$, la réaction se comporte localement (dans le temps et l'espace) comme une relaxation de temps caractéristique $\tau \sim \frac{1}{k}$ ou comme une explosion de temps caractéristique $\tau \sim \frac{1}{2k}$, en effet :

$$\text{Terme de réaction : } R(u) = ku(1-u^2), \tag{3.6}$$

$$\text{Valeurs propres de la réaction : } R'(u) = k(1-3u^2). \tag{3.7}$$

Pour les valeurs étudiés, $k \leq 20$, la réaction reste ainsi peu raide par rapport au "vraies" réactions chimiques (il faut avoir conscience de cette différence pour considérer ce cas test de la bonne manière, ici la réaction est le terme le moins raide alors que sur des "vrais" applications, ce n'est pas le cas).

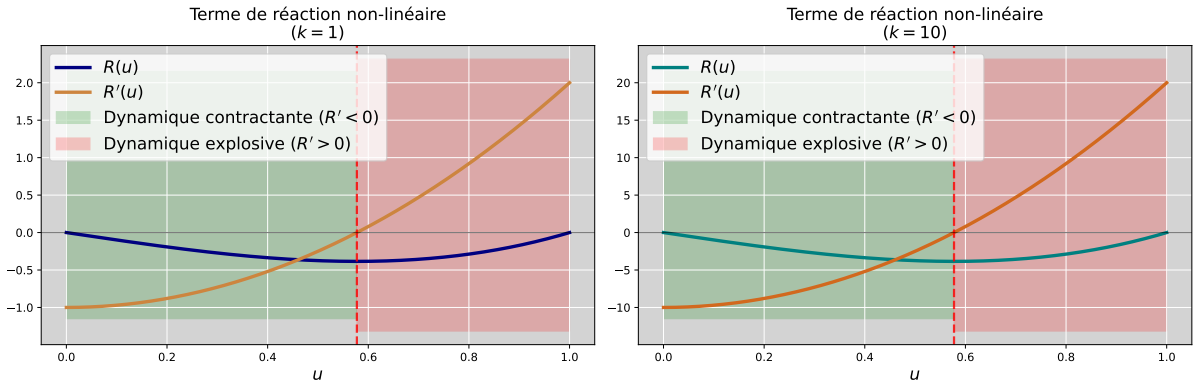



FIGURE 3.2 – Plage de valeurs du terme de réaction non-linéaire et de sa différentielle pour deux coefficients de réactions : $k = 1$ et $k = 10$.

### C Conclusion sur l'équation de Nagumo

Ainsi l'équation de Nagumo, présente un terme de réaction [2], et un terme de diffusion. Cette équation fait émerger un front d'onde [3] et dispose de deux paramètre $k$ et $D$ pour piloter aisément les propriétés des solutions. Cela en fait donc une équation-test de choix pour étudier le comportement de diverses méthodes dédiées aux équations d'advections-réaction-diffusion.

2. à noter qu'il n'est pas raide, comparé aux termes de réaction rencontrés en combustion.
3. Cela permet de tester le comportement de la multi-résolution adaptative.

### 3.1.2 Les méthodes ImEx

Les méthodes ImEx étudiées sont les méthodes de Runge et Kutta additives (RK-ImEx ou RK-additive). Ces méthodes consistent à sommer plusieurs méthodes de Runge et Kutta appliquées chacune à un opérateur différent. *L'objectif est d'intégrer chaque opérateurs avec des méthodes RK différentes (implicites ou explicites), en accord les spécificité de chaque opérateur et cela, indépendamment des autres opérateurs.*

#### A Un exemple

Pour introduire la méthodes de Runge et Kutta additives, on commence par un exemple simple usant d'une méthode RK-ImEx d'ordre un. Cette ImEx naît de la conjugaison de deux méthodes Runge et Kutta à un étages (RK1). Cette méthode est notée ImEx111 [5]. Les méthodes RK1 servant de briques élémentaires à la RK111 sont : un schéma d'Euler explicite et un schéma d'Euler implicite. Soit une équation d'évolution faisant intervenir deux opérateurs :

- ◇ L'opérateur $A^E$ se prêtant aux méthodes explicites (par exemple, un opérateur peu raide mais non local).
- ◇ L'opérateur $A^I$ se prêtant aux méthodes implicites (par exemple un opérateur raide mais local).

L'équation cible serait alors de la forme :

$$\partial_t u = A^E u + A^I u. \tag{3.8}$$

**A.i Résolution par approche monolithique** En n'utilisant qu'une seule RK1 pour tout le problème (approche monolithique), la dynamique serait approchée d'une des façon suivante. En simulant avec un schéma d'Euler explicite monolithique, la méthode s'écrit alors :

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t(A^E + A^I)u^n. \tag{3.9}$$

Mais si l'opérateur $A^I$ est très raide, la stabilité risque d'imposer un pas de temps très restrictif risquant de rendre la méthode non viable. En résolvant avec un schéma d'Euler implicite monolithique, la méthode s'écrit :

$$u^{n+1} = \big(Id - \Delta t(A^E + A^I)\big)^{-1} u^n. \tag{3.10}$$

Mais si l'opérateur $A^E$ rend l'inversion coûteuse ; par exemple s'il est non-local (impliquant la résolution d'un gros système au lieu de plusieurs petits systèmes), et/ou s'il est non linéaire (nécessite d'être réinverser à chaque pas de temps) ; alors cette méthode ne sera pas viable non plus.

**A.ii Résolution par une méthode ImEx : une Runge et Kutta Additive** Lorsque la méthode ImEx111 est choisie, lapproximation au pas de temps $n+1$ s'écrit en sommant une contribution issue de la méthode Euler explicite (RKE1) et une contribution issue de la méthode Euler implicite (RKI1) :

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t(\underbrace{k_1}_{\text{RKE1}} + \underbrace{k_1'}_{\text{RKI1}}) \tag{3.11}$$

La contribution issue de la RKE1 appliquée à $A^E$ s'écrit (Euler explicit) :

$$k_1 = A^E u^n. \tag{3.12}$$

La contribution issue de la RKI1 appliquée à $A^I$ s'écrit (Euler implicit) :

$$k'_1 = A^I u^{n+1} \tag{3.13}$$

Ainsi :

$$\begin{aligned} u^{n+1} &= u^n + \Delta t(A^E u^n + A^I u^{n+1}), \\ \text{donc : } u^{n+1} - \Delta t A^I u^{n+1} &= u^n + \Delta t A^E u^n, \\ \text{et donc : } u^{n+1} &= (Id - \Delta t A^I)^{-1} \circ (Id + \Delta t A^E) u^n. \end{aligned} \tag{3.14}$$

Ainsi dans cette méthode seul lopérateur $Id - \Delta t A^I$ est inversé et les problèmes de raideurs sont résolus ; ce qui était lobjectif. Les traitements sur les opérateurs sont bien découplés lors de la résolution.

## B Cadre mathématique général

Pour construire des méthodes plus complexes et d'ordres supérieurs introduisons le formalisme de [5] pour traiter les méthodes RK-additives. Ici, nous travaillons uniquement sur méthodes ImEx pour deux opérateurs mais théoriquement, il est possible de construire des méthodes ImEx pour traiter autant d'opérateurs que l'on le souhaite [22].

**B.i Notations** Une méthode ImEx additive est construite à partir d'une méthode implicite à $s$ étages (une méthode DIRK et si possible SDIRK [23]) et d'une méthode explicite à $s+1$ étages [4]. Pour uniformiser, le tableau de Butcher de la méthode implicite est complété par une ligne et une colonne de zéros afin que les deux méthodes s'écrivent comme si elles avaient le même nombre d'étages. Les tableaux de Butcher des deux méthodes s'écrivent alors :

**Méthode RKE, $s+1$ étages :**

$$\text{RKE : } \begin{array}{c|c} \tilde{c} & \tilde{A} \\ \hline & \tilde{b}^T \end{array} = \begin{array}{c|cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \tilde{c}_1 & \tilde{a}_{10} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \tilde{c}_2 & \tilde{a}_{20} & \tilde{a}_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \tilde{c}_s & \tilde{a}_{s0} & \tilde{a}_{s1} & \tilde{a}_{s2} & \cdots & 0 \\ \hline & \tilde{b}_0 & \tilde{b}_1 & \tilde{b}_2 & \cdots & \tilde{b}_s \end{array} \tag{3.15}$$

4. Au besoin, la méthode explicite peut être à $s$ étages, qui est un cas particulier d'une méthode à $s+1$ étages.

**Méthode RKI (DIRK) $s$ étages :**

$$\text{RKI}: \begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^T \end{array} = \begin{array}{c|cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ c_1 & 0 & a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ c_2 & 0 & a_{21} & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ c_s & 0 & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & 0 & b_1 & b_2 & \cdots & b_s \end{array} \tag{3.16}$$

où les coefficients $\tilde{a}_{ij}$, $\tilde{b}_i$, $\tilde{c}_i$ définissent la méthode explicite et les coefficients $a_{ij}$, $b_i$, $c_i$ définissent la méthode implicite DIRK.

**B.ii Schéma général d'une méthode RK-additive** Une étape de la méthode RK-additive appliquée entre les pas de temps $n$ et $n+1$ au système $\frac{du}{dt} = A^E u + A^I u$ s'écrit :

**Calcul des approximations intermédiaires :** Les calcul des approximations aux pas de temps intermédiaires $(u_i)_{i\in\{0,\dots,s\}}$ se fait grâce à la relation :

$$u_i = u^n + \Delta t \sum_{j=0}^{i-1} \tilde{a}_{ij} A^E u_j + \Delta t \sum_{j=0}^{i} a_{ij} A^I u_j, \qquad i = 0,1,\dots,s, \tag{3.17}$$

En initialisant $u_0 = u^n$.

Soit en mettant en lumière le caractère implicite de la méthode sur $A^I$ :

$$(Id - \Delta t a_{ii} A^I) u_i = u^n + \Delta t \sum_{j=0}^{i-1} \left(\tilde{a}_{ij} A^E u_j + a_{ij} A^I u_j\right), \qquad i = 0,1,\dots,s \tag{3.18}$$

**Calcul de l'approximation déinitive :**

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{i=0}^{s} \tilde{b}_i A^E u_i + \Delta t \sum_{i=0}^{s} b_i A^I u_i \tag{3.19}$$

Cette formulation générale permet de construire des méthodes d'ordre élevé.

**B.iii Ordre de convergence** L'ordre d'une méthode RK-additive est évidemment borné par l'ordre des méthodes RK individuelles convoquées. Naturellement, cette borne n'est pas nécessairement atteintes ; des conditions d'ordre liant les coefficients des méthodes individuelles entre eux doivent être respectées. Le nombre de ses conditions augmente (très) rapidement avec l'ordre de la méthode et le nombre d'opérateurs à résoudre [22], le lecteur motivé se référera par exemple à [17].

### 3.1.3 Analyse de stabilité

L'objectif est d'appréhender la viabilité des ImEx ARK sur l'équation de Nagumo. Dans ce but, leur stabilité est étudiée. Dans un premier temps, une étude générale de la stabilité des ImEx ARK est menée. Puis, l'étude de stabilité se centre sur l'application à l'équation de Nagumo. L'ensemble des codes utilisés pour évaluer numériquement et afficher les domaines de stabilités sont disponibles à l'adresse : https ://github.com/Ocelot-Pale/ImEx_stability_Nagumo.

#### A Étude de stabilité générale des RK-ImEx

Avec une méthode ImEx, les deux opérateurs de l'EDP sont découplés, c'est là l'intérêt. Cependant cela complexifie l'analyse usuelle de stabilité. En effet la fonction de stabilité attend alors deux variables, le coefficient spectral $Z_E$ associé à l'opérateur traité explicitement et le coefficient spectral $Z_I$ associé à l'opérateur traité implicitement. Ainsi, pour chaque couple $(Z_E, Z_I)$ d'indices spectraux, la fonction de stabilité prend une valeur différente, et comme les coefficients spectraux sont des nombres complexes, on ne peut plus visualiser d'un simple coup d'oeil le domaine de stabilité, puisque celui-ci se trouve dans un espace de dimension quatre $\mathbb{C}^2$.

**A.i Calcul des fonctions d'amplification** Afin d'étudier la stabilité linéaire des méthodes, les fonctions d'amplifications ont été évaluées numériquement. L'algorithme est le suivante :

1. Entrer les valeurs de $(Z_E, Z_I)$ pour lesquelles la fonction de stabilité doit être évaluée
2. Simuler un pas du schéma en partant de $u_0 = 1$ appliqué à une équation du type Dahlquist : $\partial_t u = \lambda_E u + \lambda_I u$
   (a) Construire toutes les approximations intermédiaires avec les valeurs
   (b) Construire l'approximation finale $u_1$
3. Évaluer la norme de $u_1$

Cette l'étude générale, c'est à dire pour tout $(Z_E, Z_I) \in \mathbb{C}^2$ n'est pas détaillée ici, toutefois le lecteur intéressé pourra trouver les graphiques représentants les domaines de stabilité sur le Notebook en ligne.

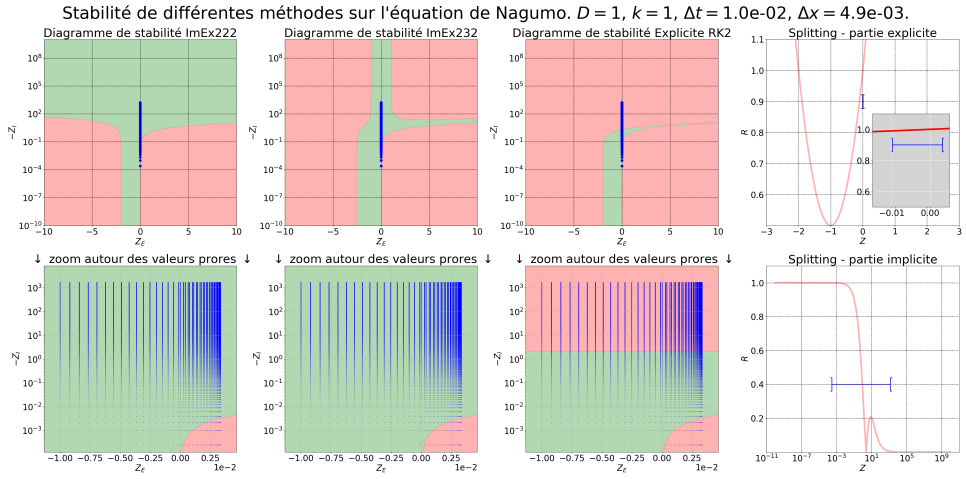
#### B Étude de stabilité linéaire appliquée à l'équation de Nagumo

La démarche précédente est particularisée en se centrant sur l'équation de Nagumo ; permettant d'étudier la stabilité des méthodes ImEx sur ce problème particulier.

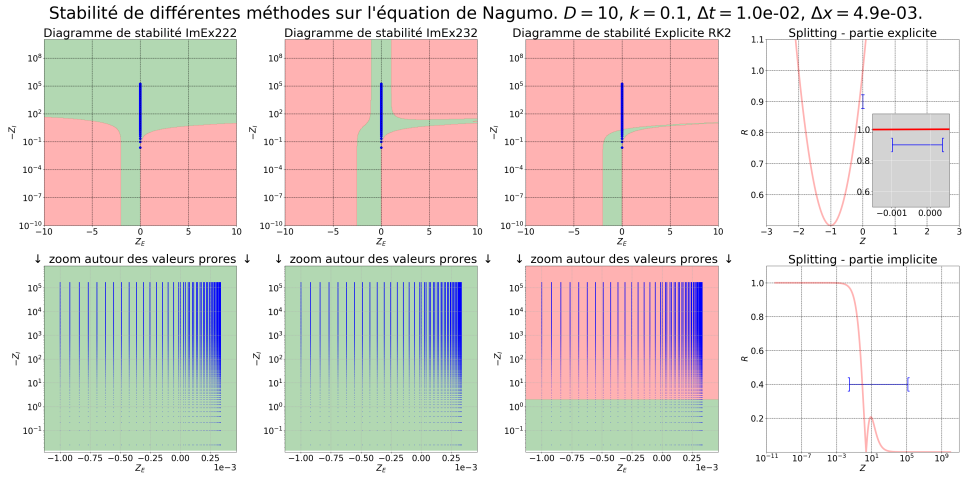
**B.i Valeurs propres mises en jeu** Comme expliqué en 3.1.1 l'équation présente deux opérateurs :

- La diffusion dont le spectre s'étend de $\frac{-1}{L^2}$ à $\frac{-1}{\Delta x^2}$ (où $L$ est la taille du domaine discrétisé).
- La réaction dont le spectre balaie continûment $-k$ jusqu'à $2k$

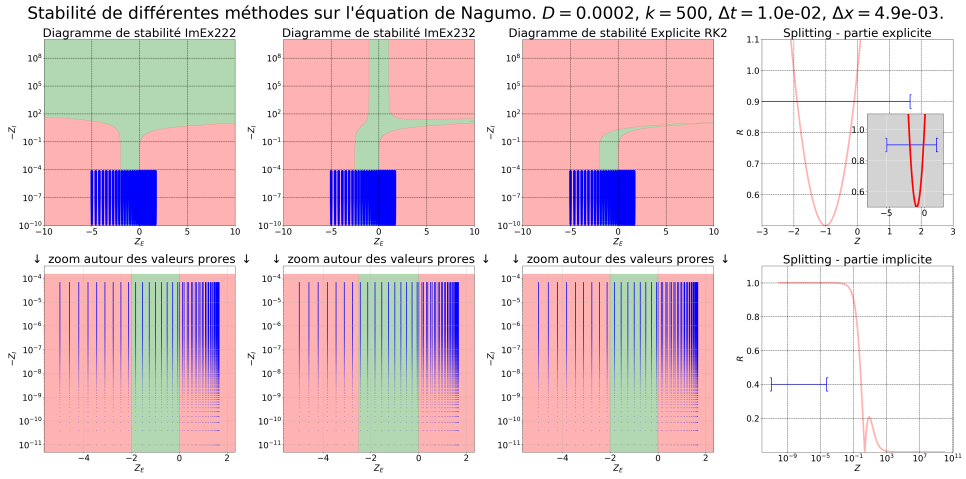
Pour particulariser l'analyse de stabilité il faut donc tracer le diagramme de stabilité des méthodes étudiées en prenant $Z_I \in \mathbb{R}^-$ et $Z_E \in [-k; 2k] \subset \mathbb{R}$ ce qui donne un espace à deux dimensions. Il est ensuite pertinent placer des couples $(Z_E, Z_I)$ correspondant. Cela donne les diagrammes en fig. 3.3




(a) Cas standard
D=1, k=1, dt=1.0e-03, dx=2.4e-03




(b) Cas diffusion plus raide, réaction moins raide
D=10, k=0.1, dt=1.0e-02, dx=4.9e-03




(c) Cas diffusion moins raide, réaction plus raide
D=2e-4, k=500, dt=1.0e-02, dx=4.9e-03

FIGURE 3.3 – Diagrammes de stabilité des méthodes ImEx comparés à ceux d'une méthode explicite à un schéma de splitting sur l'équation de Nagumo, pour différents couples $D$ et $k$.

**B.ii Résultats** Ces diagrammes permettent d'analyser respectivement la stabilité de la méthode *ImEx222*, de la méthode *ImEx232*, et, à titre de comparaison, la stabilité d'une méthode *Runge et Kutta explicite* d'ordre 2 [5] et d'un *schéma de splitting de Strang* utilisant une RK explicite pour la réaction et une RK implicite pour la diffusion. Chaque colonne représente l'analyse d'une méthode différente.

- La première ligne présente le domaine de stabilité en fonction des indices spectraux $Z_E \in \mathbb{R}$ et $Z_I \in \mathbb{R}^-$.
- La seconde ligne est un zoom autour de ces indices spectraux.
- Les points bleus représentent les couples d'indices spectraux intervenant dans la résolution de l'équation de Nagumo pour les paramètres d'équation choisis ($D$ et $k$) et les paramètres de discrétisation retenus ($\Delta t$ et $\Delta x$).
- La dernière colonne (splitting) présente une disposition différente, puisque les opérateurs sont totalement découplés.
  - La première ligne correspond alors à la fonction de stabilité de la méthode explicite (avec un zoom autour des indices spectraux de la réaction) et
  - la seconde ligne représente la fonction de stabilité de la méthode implicite.
  - Dans les deux cas, l'intervalle tracé en bleu représente la plage de valeurs d'indices spectraux balayés par chaque opérateur.

**B.iii Analyse**

**Analyse générale** Analyse des domaines de stabilité (fig.fig. 3.3) :

- **Méthode explicite :** En troisième colonne, le diagramme de stabilité d'une méthode explicite RK explicite d'ordre deux, sert de référence. Le domaine de stabilité s'étend pour valeurs propres négatives jusqu'à $-2$ (résultat classique des méthodes EKR2). Le schéma traitant conjointement les deux opérateurs, l'indice spectral résultant est $Z = Z_E + Z_I$. De fait domaine de stabilité s'étend jusqu'à $-2$ selon l'axe $Z_E$ tant que $Z_I$ est négligeable et de même, le domaine de stabilité s'étend jusqu'à $-2$ selon $Z_I$ tant que $Z_E$ est négligeable. Enfin il y a une zone intermédiaire quand $Z_E$ et $Z_I$ sont tous les deux de l'ordre de l'unité [6].
- **Méthode ImEx232 :** La seconde colonne montre que la méthode ImEx232 maintient un domaine de stabilité restreint (jusqu'à $-2$) selon l'axe $Z_E$, mais selon l'axe $Z_I$, le domaine de stabilité s'est étendu considérablement. C'est logique puisque la valeurs propre $Z_E$ est explicitée, sont domaine pris seul n'a évolué, et la valeur propre $Z_I$ peut être très raide (très négative) puisque la méthode explicite l'opérateur lié à $Z_I$.
- **Méthode ImEx222 :** Passant à la première colonne, le domaine de stabilité ImEx222 resemble beaucoup à celui de l'ImEx232. Seulement, le domaine de stabilité s'élargit considérablement selon $Z_E$, pourvus que $Z_I$ soit assez grand. Cette propriété est remarquable, cela signifie que la méthode traite couple les raideurs dans sont traitement. Plus précisément, plus l'opérateur implicité est raide, plus l'opérateur explicité peut être raide.

5. Celle apparaissant dans ImEx222.
6. Attention à l'échelle logarithmique.

**Analyse selon les paramètres de l'équation $k$ et $D$** Grace au graphiques fig. 3.3 la disposition couples de valeurs propres mis en jeu par l'équation de Nagumo peut être analysées selon les paramètre $k$ et $D$. Les paramètres de simulation : $\Delta t$ et $\Delta x$ sont fixés. Les jeux de valeurs choisis sont $(k,D) = (1,1)$, $(k,D) = (0.1,10)$, $(k,D) = (500, 2\,10^{-4})$. Le produit $kD$ est maintenu égal à un, ainsi la vitesse de propagation est toujours la même (*cf.* 3.1.1). Ces couples de valeurs propres $Z_E, Z_I$ sont en effet tracés en bleus sur le graphique [7].

- **Cas standard,** $(k,D) = (1,1)$ - fig. 3.3a :
  Dans ce cas, la raideur de la diffusion $(Z_I)$ déstabilise la méthode RKE2 (on voit que de nombreux couples de v.p. entrent dans le zones rouges quand $Z_I$ augmente). Pour ces valeurs de $(\Delta x, \Delta t)$ cette méthode n'est donc pas viable. C'est tout à fait normal, les méthodes imposent des pas de temps très restrictifs sur les problèmes de diffusion. En revanche, les méthodes ImEx sont tout à fait stable puisque, comme constaté précédemment, le domaine de stabilité s'étend infiniment quand $Z_I \to -\infty$. Le point notable est que certains couples de valeurs propres tombent malgré tout dans une zone instable (en bas à gauche). Mais cela n'est pas un problème car il s'agit de couples de valeurs propres ou la valeur propres [8] de l'opérateur de réaction $(Z_E)$ est positive. Donc la méthode n'est pas instable au sens ou elle reflète simplement la dynamique explosive de la réaction. D'ailleurs si en se penchant sur le graphique de la partie explicite du splitting, on constante qu'il y a une zone (correspondant à $Z_E$ positive) ou la fonction d'amplification est d'amplitude supérieure à un, le splitting reproduit donc fidèlement la dynamique de la réaction. Ce qui peut être un problème est l'inverse, pour les méthodes ImEx, il y a des couples de valeurs propres où $Z_E$ est positif et où la fonction d'amplification est d'amplitude inférieure à un. Cela pourrait être un frein pour reproduire fidèlement la dynamique explosive de la réaction dans les zones concernées [9].
- **Cas diffusion raide, réaction peu raide,** $(k,D) = (0.1,10)$ - fig. 3.3b :
  Ici, $D = 10$ donc toutes les valeurs propres liées à la diffusion sont multipliées par 10 par rapport au cas précédent. De fait la méthode RK2E de référence présente des instabilités pour encore plus de couples de valeurs propres est n'est pas pas viable. Concernant les méthodes ImEx222 et ImEx232 elles sont stables, et cette fois-ci toutes les valeurs propres liées à la dynamique explosive de la réaction sont amorties.
- **Cas diffusion peu raide, réaction très raide**$(k,D) = (500, 2\,10^{-4})$ - fig. 3.3c
  Dans ce cas de figure, $k = 500$. La grande valeur du coefficient de réaction rend cette dernière très raide. Cela à pour effet de dilater selon l'axe des abscisse les indices spectraux puisque $Z_E \in [-500\Delta t, +1000\Delta t]$ alors que dans le cas $k = 1$ : $Z_E \in [-\Delta t, 2\Delta t]$. Ici la méthode méthode explicite au sein des ImEx n'est plus stable pour la réaction, ainsi toutes les méthodes deviennent instables. Le splitting également devient instable car il utilise aussi la méthode RK2E pour la réaction. Le fait que la méthode explicite de l'ImEx soit instable pour l'opérateur explicité peu sembler un obstacle infranchissable, cependant ce n'est pas si simple. Pour illustrer ce point, étendons l'analyse avec le cas spécial en fig. 3.4, dans ce cas la réaction est toujours raide

7. Pour les $Z_I$ le spectre est discret, pour $Z_E$, le spectre est continu, il a donc fallut échantillonnés le long de l'axe $Z_E$
8. Dans cette section, valeurs propres $\lambda$ et indices spectraux $z = \lambda\Delta t$ sont identifiés puisque le pas de temps $\Delta t$ est fixé.
9. Il n'est pas évident d'avoir *a priori* la bonne intuition car peut être que la diffusion calme en quelque sorte le caractère explosif de la réaction et qu'alors une fonction d'amplification d'amplitude $< 1$ est normal... Restons prudent sur cette analyse.

$k = 500$ mais la diffusion est également très raide car $D = 500$ [10] Alors la méthode ImEx222 devient stable, comme vu en B.iii, plus l'opérateur traité implicitement est raide, plus la méthode permet à l'opérateur traité explicitement d'être raide. C'est un cas remarquable ou le couplage intervenant au sein de la méthode ImEx la rend plus stable que le splitting!

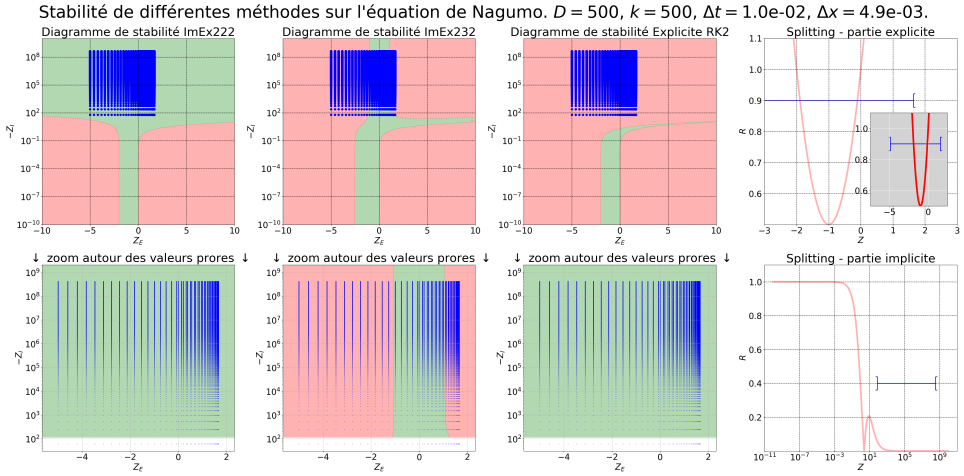



FIGURE 3.4 – Pour $k = 500$ et $D = 500$ : diagrammes de stabilité des méthodes ImEx et de référence sur l'équation de Nagumo.

10. Jusqu'ici, la vitesse de propagation était la même dans tous les scénarios puisque $kD$ était maintenu constant. Dans le scénario présenté ici, ce n'est plus le cas

### 3.1.4 Étude de la convergence

À présent que la stabilité des deux méthodes ImEx ont été comparées au *splitting* d'opérateur, il est naturel de poursuivre par une expérience numérique pour qualifier la convergence de chaque méthode et d'évaluer la pertinence des méthodes ImEx face au *splitting*.

**Présentation de l'expérience :** L'expérience est réalisée sur l'équation de Nagumo 1D à partir d'une solution initiale correspondant au profil de l'onde propagative de l'équation (voir 3.1.1). Succinctement, la simulation à lieu sur le domaine spatial $[-20,+20]$ entre $t=0$ et $t=3$. La grille spatial est divisée en $2^{13}$ cellules ce qui équivaut à un pas d'espace $\Delta t \approx 4.8\,10^{-3}$. Des conditions de Neumann homogènes et une vitesse de propagation adaptées permettent de maintenir le front d'onde au centre du domaine et de négliger les effets de bords afin de comparer à la solution analytique exacte d'onde propagative. Les erreurs sont calculés sur le domaine $[-5,+5]$ pour ce centrer sur l'étude du front d'onde.

**Résultats :** Les résultats de l'expérience sont présentés en 3.5. Il apparaît que si le schéma de splitting et ImEx222 ont des performances similaires, la méthode ImEx232 à clairement une constante de convergence plus faible. De fait on voit que sur un maillage clanique (non-adapté), les méthodes ImEx peuvent apporter une cohérence globale qui mène a une meilleure précision. Dans la section suivante, nous allons réitérer l'expérience sur un maillage adapté par multi-résolution adaptative pour étudier si l'adaptation en espace interagit avec les méthodes ImEx et la méthode de splitting.

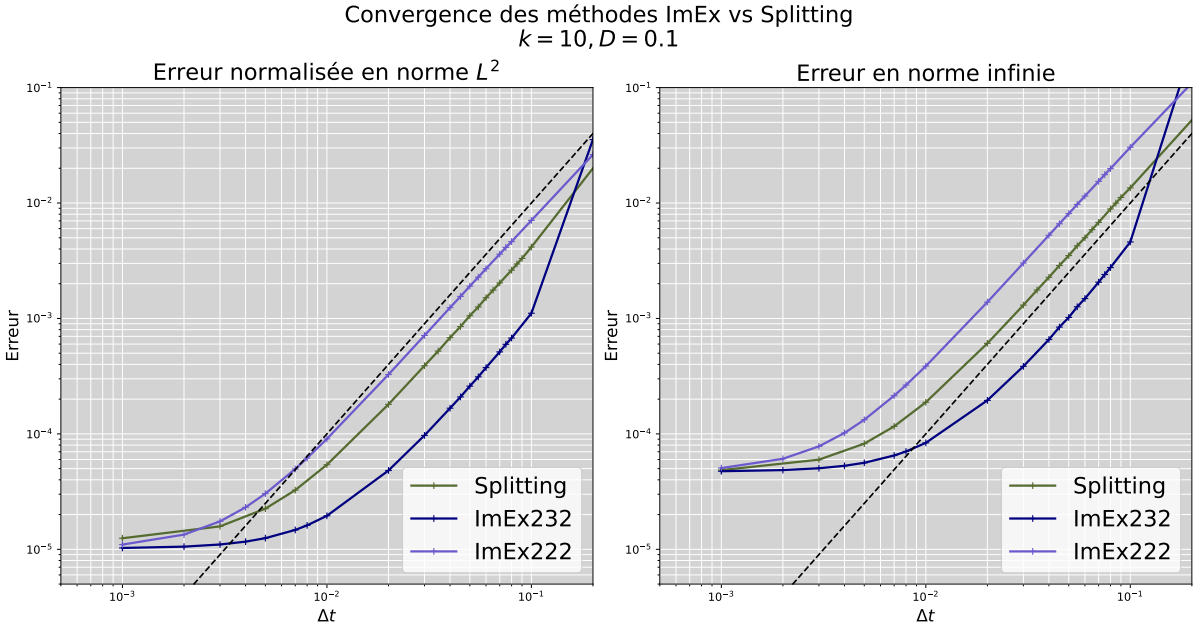



FIGURE 3.5 – Comparaison de la convergence du schéma de splitting avec celle des méthodes ImEx222 et ImEx232 sur l'équation de Nagumo avec $D = 0.1$ et $k = 10$

### 3.1.5 Mise en lumière expérimental de couplages entre la méthode en temps et l'adaptation spatiale

**Objectifs et contexte de l'étude :** L'objectif est d'observer d'éventuelles interactions entre la méthode de découplage des opérateurs (ImEx/splitting) et l'adaptation en espace par multi-résolution adaptative. Pour ce faire la comparaison entre ImEx222, ImEx2332 et splitting a été refaite (fig 3.6) en adaptant spatialement chaque schéma par MRA. Si des différences par rapport à l'étude précédente (fig. 3.5) apparaissent, ils résultent nécessairement de couplages entre la méthode d'intégration en temps et l'adaptation spatiale.

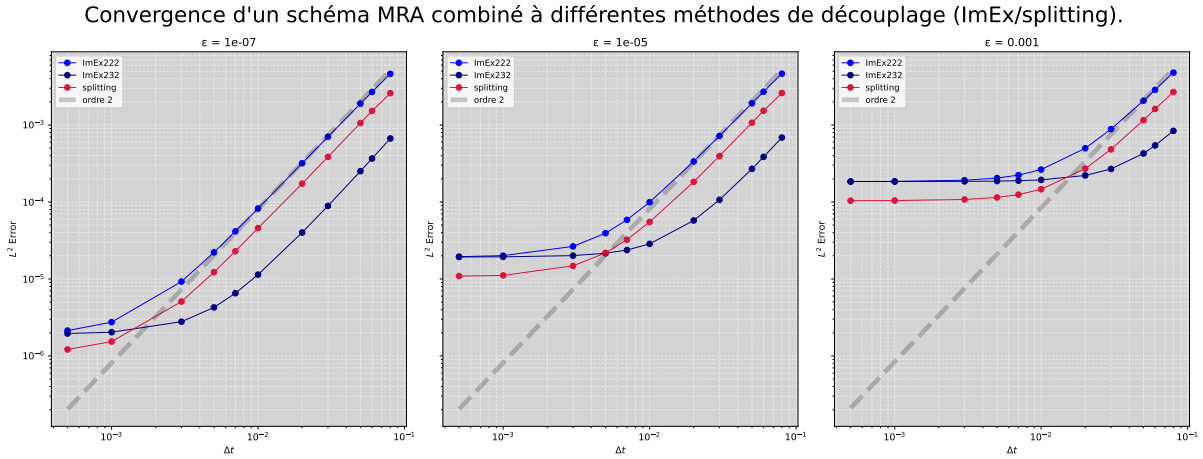



FIGURE 3.6 – Convergence des schémas ImEx et de splitting, adaptés en espace par MRA, sur l'équation de Nagumo pour $k = 10$, $D = 0.1$. Les flux sont évalués au niveau courant (*cf.* 3.2), la prédiction/reconstruction est assurée par un prédicteur à trois points et l'erreur est comparé à une solution convergé en temps.

**Analyse des résultats :** pour les grands pas de temps, la convergence est similaire au cas non-adapté (fig. 3.5). En particulier la méthode ImEx232 exhibe une constante de convergence plus faible que le splitting. En revanche, lorsque l'erreur sature les méthodes ImEx offrent systématiquement des performances moins bonnes que le splitting. La solution est comparée à une méthode quasi-exacte en temps, la convergence s'infléchie donc lorsque les erreurs de liée à la MRA sont de l'ordre des erreurs en temps. Il semble donc que l'erreur plateau soit composée d'un terme lié à la compression, au $\varepsilon$ choisit, et d'une erreur de couplage entre l'adaptation spatiale et la méthode en temps. Plus précisément il apparaît que les méthodes ImEx interagissent avec l'adaptation spatiale d'une manière plus néfaste que le splitting.

### 3.1.6 Conclusion

Cette première contribution a comparé un schéma de splitting ERK2+IRK2 à deux schémas ImEx ARK sur des questions de stabilités de convergence. L'étude de convergence à été réalisées dans deux contextes différents : sans adaptation spatiale et avec adaptation spatiale par MRA. Les principaux résultats sont :

- ◇ **Stabilité :** Tandis que par nature le splitting découple les problématiques de stabilités, celle des méthodes ARK résulte d'un couplage entre le spectre des deux opérateurs. Cela pourrait être exploité astucieusement puisque dans certains cas (*cf.* B.iii) un opérateur implicité très raide peut stabiliser la méthode explicite. Ce serait particulièrement intéressement pour des problèmes de diffusion-réaction où une réaction implicite très raide pourrait étendre la stabilité d'une diffusion explicite.
- ◇ **Convergence :** Les deux approches, ImEx ARK et splitting sont toutes les deux viables sur le maillage non-adapté. Il semble empiriquement que bien choisies, l'approche ImEx peut en effet offrir des constantes de convergences meilleures que le simple spitting.
- ◇ **Couplage avec l'adaptation spatiale :** Il a été monté empiriquement que les méthode ImEx peuvent interagir de manière néfaste avec l'adaptation spatiale par MRA. Il est probable que les méthode de splitting interagissent également, mais il semble que cette interaction soit plus limités. Comme montré au chapitre suivant (chapitre 3.2) ce type dinteraction (méthode en temps - adaptation spatiale) sont complexes et dépendent énormément des schémas temporelles et des modalités de mises en oeuvre de la MRA. Donc cette étude ne suffit pas à tirer des conclusions générales, en revanche elle confirme l'existence de tels couplage et montre qu'ils peuvent être important car (*cf* **??**) une méthode ImEx meilleure que le splitting sur un schéma non-adapté devient moins bonne que le splitting pour un schéma adapté (dès lors que les erreurs de MRA ne sont plus négligeables).

## 3.2 Obtention de l'équation équivalente d'une méthode de lignes avec multirésolution adaptative sur un problème de diffusion.

Cette deuxième contribution étudie l'interaction entre la multirésolution adaptative (MRA) et le schéma d'intégration temporel, une interaction encore mal comprise. Une première analyse de ce type a été menée sur des problèmes d'advection en [6]. La présente étude se concentre sur les problèmes de diffusion. Pour analyser l'impact de la MRA, les équations équivalentes de trois schémas sont calculées (voir C) :

I. Un schéma méthode des lignes d'ordre deux, servant de référence. Il s'agit d'une discrétisation spatiale d'ordre deux par volume finis, puis une intégrations temporelle par une méthode Runge et Kutta explicite d'ordre deux.

II. Un schéma correspondant au schéma `I` avec MRA, où les valeurs nécessaires à l'évaluation des flux numériques est prise au niveau de compression courant.

III. Un schéma correspondant au schéma `I` avec AMR, où les valeurs nécessaires à l'évaluation des flux numériques sont systématiquement reconstruites au niveau de résolution le plus fin.

Le schéma `III` est peu étudié dans la littérature. En [6], il a été montré que cette approche améliore pourtant significativement la qualité des solutions numériques sur les problèmes d'advection. En sera-t-il de même pour la diffusion ? La réponse est plus mitigée, cela motivera d'ailleurs la troisième contribution en 3.3.

### 3.2.1 Cadre de l'étude

Cette section présente en A le problème cible, en B le schéma `I` méthode des lignes servant de référence et en C la façon dont la MRA est utilisée pour obtenir les schémas `II` et `III`.

#### A Problème cible

L'étude se fait en dimension un, l'équation d'évolution à résoudre est donc :

$$\partial_t u = D\partial_{xx} u \quad D > 0. \tag{3.20}$$

Les problématiques de bords ne sont pas prises en compte dans l'analyse.

#### B Méthode des lignes utilisée

Pour résoudre cette équation aux dérivées partielles, une méthode des lignes est utilisée.

**Discrétisation spatiale :** La discrétisation spatiale se fait à l'ordre deux selon le paradigme des volumes finis. L'équation est d'abord intégrée sur une cellule $C_k$ de taille $\Delta x$ centrée sur $x_k$ :

$$\int_{C_k} \partial_t u(x,t)\,dx = D\int_{C_k} \partial_{xx} u(x,t)\,dx \tag{3.21}$$

Puis posant la valeur moyenne sur la cellule : $U_k(t) = \frac{1}{\Delta x}\int_{C_k} u(x,t)\,dx$ et en simplifiant l'intégrale de gauche :

$$\frac{d}{dt}U_k(t) = D\left[\partial_x u(x_k + \frac{\Delta x}{2}, t) - \partial_x u(x_k - \frac{\Delta x}{2}, t)\right] \tag{3.22}$$

Puis en approximant les dérivées spatiales à l'ordre deux , cela donne l'équation semi-discrétisée en espace suivante.

$$\partial_t U(t) = \underbrace{\frac{D}{\Delta x}}_{\text{cellule}}\Big(\underbrace{\frac{U_{k+1} - 2U_k + U_{k-1}}{\Delta x}}_{\text{approx. gradients}}\Big) \tag{3.23}$$

On remarque que les $\Delta x$ qui apparaissent ont des origines distinctes, d'une part la taille de la cellule pour obtenir une valeur moyenne et d'autre part la distance entre les deux points servant à approximer les gradients.

**Intégration temporelle :** en notant $\mathbb{D}$ l'opérateur de diffusion spatial, l'intégration temporelle se fait grâce à la méthode Runge et Kutta explicite d'ordre deux suivant :

$$u^{n+1} = \left(Id + \Delta t\,\mathbb{D} + \frac{1}{2}\Delta t^2\,\mathbb{D}^2\right)u^n. \tag{3.24}$$

C'est à dire :

$$\begin{aligned} U_k^{n+1} &= U_k^n \\ &+ D\underbrace{\frac{\Delta t}{\Delta x}}_{\text{cellule}}\Big(\underbrace{\frac{U_{k+1} - 2U_k + U_{k-1}}{\Delta x}}_{\text{approx. gradients}}\Big) + \frac{1}{2}D^2\underbrace{\frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}}_{\text{cellule}}\Big(\underbrace{\frac{U_{k+2} - 4U_{k+1} + 6U_k - 4U_{k-1} + U_{k-2}}{\Delta x^2}}_{\text{approx. gradients}}\Big). \end{aligned} \tag{3.25}$$

**Forme conservative :** Ce schéma peut s'écrire sous forme conservative en exhibant les flux numériques suivants :

$$u_k^{n+1} = u_k^n + D\frac{\Delta t}{\Delta x}\left(\Phi_{k+1/2}^n - \Phi_{k-1/2}^n\right) + \left(D\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2\left(\Psi_{k+1/2}^n - \Psi_{k-1/2}^n\right) \tag{3.26}$$

Avec :

$$\Phi_{k+1/2}^n = \frac{1}{\Delta x}(u_{k+1}^n - u_k^n), \tag{3.27}$$

$$\Phi_{k-1/2}^n = \frac{1}{\Delta x}(u_k^n - u_{k-1}^n), \tag{3.28}$$

$$\Psi_{k+1/2}^n = \frac{1}{\Delta x^2}\left(\frac{1}{2}u_{k+2}^n - \frac{3}{2}u_{k+1}^n + \frac{3}{2}u_k^n - \frac{1}{2}u_{k-1}^n\right),$$

$$\Psi_{k-1/2}^n = \frac{1}{\Delta x^2}\left(\frac{1}{2}u_{k+1}^n - \frac{3}{2}u_k^n + \frac{3}{2}u_{k-1}^n - \frac{1}{2}u_{k-2}^n\right).$$

### C La multirésolution adaptative, différents différents paradigmes ?

La multirésolution adaptative est présenté avec plus de détails en 2.4. Cette partie clarifie surtout la différence entre les deux schémas MRA étudiés (schémas `II` et `III`). Pour rappel, la multirésolution adaptative consiste à compresser la solution sur plusieurs niveau de profondeur, puis a effectuer les calculs sur la compressée. L'adaptation par MRA d'un schéma se fait de la manière suivante :

1. Partir d'un état compressé au pas de temps $n$.
2. Calculer la solution au pas de temps $n+1$
3. Compresser de nouveau selon un seuil de compression $\varepsilon$ grâce à une transformée multiéchelle et à l'heuristique d'Harten.

La valeur d'une cellule à un niveau de détail donné est calculée au temps pas de temps suivant grâce à un flux numérique. Cependant, la manière d'évaluer ce flux numérique n'est pas univoque et donc à plusieurs schémas numériques potentiels :

- Le schéma `II` calcule le flux numérique à partir des cellules voisines à linterface évaluées au niveau de détail courant, c'est à dire au niveau de détail choisit par l'adaptation spatiale (voir 3.7). C'est la méthode dite *sans reconstruction des flux*. C'est la paradigme classique en MRA.
- Le schéma `III` calcule le flux numérique à partir des cellules voisines reconstruites au niveau de détail le plus fin (voir 3.7). C'est la méthode dite *avec reconstruction des flux au niveau le plus fin*. Cette approche n'est pas standard en MRA, elle est plus complexe à mettre en place et demande plus de calculs. Toutefois il est attendu que cela réduise l'erreur puisqu'elle permet d'évaluer le flux numérique à partir de valeurs plus précises. Pour des problèmes d'advection, ces gains ont été établis théoriquement et validé expérimentalement en [6].

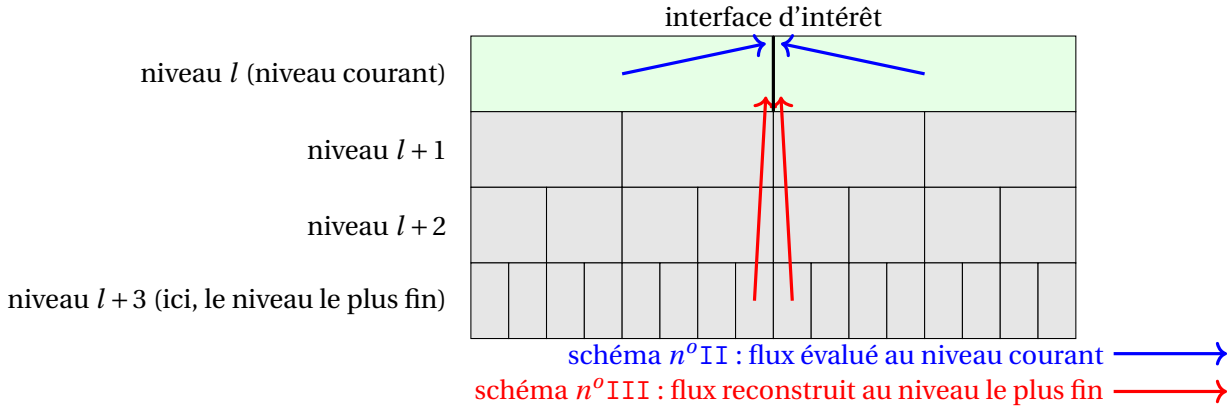



FIGURE 3.7 – Illustration de la différence entre les schémas adaptés spatialement `II` et `III`. Le schéma `II` utilise l'information au niveau de détail $l$ pour calculer les flux numériques, c'est à dire l'information brute à l'issue de la compression. En revanche, le schéma `III` reconstruit par interpolation polynomiale cette information au niveau de détail le plus fin, sur le schéma au niveau $l+3$.

Le travail suivant fournit donc les équations équivalentes du schéma `I` (non-adapté), du schéma `II` (adapté, sans reconstruction des flux) et du schéma `III` (adapté, avec reconstruction des flux). Grâce à ces résultat, les erreurs théoriques portées par chacune de ces approches sont alors comparées et analysées.

*Dans la suite seul le schéma `III` est détaillé par soucis de concision.*

**L'opérateur de reconstruction** Étant donné une cellule à un niveau de détail donné $l$, on cherche à la faire évoluer du pas de temps $n$ vers le pas de temps $n+1$. A cette fin, évaluer les flux numérique doivent être évalués à partir les cellules voisines reconstruite par un prédicteur à trois points (on dit qu'il à un *stencil* de un, car il prend un compte une cellule de part et d'autre de la cellule centrale).

L'opérateur de prédiction d'un niveau à l'autre s'écrit alors :

$$\hat{u}_{2k}^{l+1} = +\frac{1}{8}u_{k-1}^{l} + u_k^l - \frac{1}{8}u_{k+1}^{l}, \tag{3.29}$$

$$\hat{u}_{2k+1}^{l+1} = -\frac{1}{8}u_{k-1}^{l} + u_k^l + \frac{1}{8}u_{k+1}^{l}. \tag{3.30}$$

Puis en notant $\hat{\hat{u}}_{(\cdot)}^{l+\Delta l}$ cet opérateur de prédiction itéré au travers de $\Delta l$ niveaux :

$$\begin{bmatrix} \hat{\hat{u}}^{(l+\Delta l)}_{2^{\Delta l}k-2} \\ \hat{\hat{u}}^{(l+\Delta l)}_{2^{\Delta l}k-1} \\ \hat{\hat{u}}^{(l+\Delta l)}_{2^{\Delta l}k} \\ \hat{\hat{u}}^{(l+\Delta l)}_{2^{\Delta l}k+1} \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} +1/8 & 1 & -1/8 & 0 \\ -1/8 & 1 & +1/8 & 0 \\ 0 & +1/8 & 1 & -1/8 \\ 0 & -1/8 & 1 & +1/8 \end{bmatrix}^{\Delta l}}_{\text{Matrice de passage } P \text{ pour } s=1.} \cdot \begin{bmatrix} u^l_{k-2} \\ u^l_{k-1} \\ u^l_k \\ u^l_{k+1} \end{bmatrix} \tag{3.31}$$

**Flux reconstruits au niveau le plus fin :** On travaille sur une cellule au niveau courant $l$ (de tailles $2^{\Delta l}\Delta x$) et lon reconstruit les états au niveau $l+\Delta l$ grâce à des flux flux au niveau fin, dont les gradients sont approximé par un pas $\Delta x$. La mise à jour conservative utilisée est donc

$$u_k^{n+1} = u_k^n + \underbrace{\frac{D\Delta t}{\Delta x 2^{\Delta l}}}_{\text{cellule}}\left(\hat{\hat{\Phi}}^n_{k+\frac{1}{2}} - \hat{\hat{\Phi}}^n_{k-\frac{1}{2}}\right) + \left(\underbrace{\frac{D\Delta t}{\Delta x 2^{\Delta l}}}_{\text{cellule}}\right)^2 \left(\hat{\hat{\Psi}}^n_{k+\frac{1}{2}} - \hat{\hat{\Psi}}^n_{k-\frac{1}{2}}\right). \tag{3.32}$$

Les flux sont évalués au *niveau fin* (facteurs $1/\Delta x$ et $1/\Delta x^2$ portés par les flux) à partir détats reconstruits $\hat{\hat{u}}^{\,l+\Delta l}$ :

$$\hat{\hat{\Phi}}^n_{k-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta x}\left(\hat{\hat{u}}^{l+\Delta l}_{2^{\Delta l}k} - \hat{\hat{u}}^{l+\Delta l}_{2^{\Delta l}k-1}\right), \tag{3.33}$$

$$\hat{\hat{\Phi}}^n_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta x}\left(\hat{\hat{u}}^{l+\Delta l}_{2^{\Delta l}(k+1)} - \hat{\hat{u}}^{l+\Delta l}_{2^{\Delta l}(k+1)-1}\right), \tag{3.34}$$

$$\hat{\hat{\Psi}}^n_{k-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta x^2}\left(\tfrac{1}{2}\,\hat{\hat{u}}^{l+\Delta l}_{2^{\Delta l}k+1} - \tfrac{3}{2}\,\hat{\hat{u}}^{l+\Delta l}_{2^{\Delta l}k} + \tfrac{3}{2}\,\hat{\hat{u}}^{l+\Delta l}_{2^{\Delta l}k-1} - \tfrac{1}{2}\,\hat{\hat{u}}^{l+\Delta l}_{2^{\Delta l}k-2}\right), \tag{3.35}$$

$$\hat{\hat{\Psi}}^n_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta x^2}\left(\tfrac{1}{2}\,\hat{\hat{u}}^{l+\Delta l}_{2^{\Delta l}(k+1)+1} - \tfrac{3}{2}\,\hat{\hat{u}}^{l+\Delta l}_{2^{\Delta l}(k+1)} + \tfrac{3}{2}\,\hat{\hat{u}}^{l+\Delta l}_{2^{\Delta l}(k+1)-1} - \tfrac{1}{2}\,\hat{\hat{u}}^{l+\Delta l}_{2^{\Delta l}(k+1)-2}\right). \tag{3.36}$$

**Forme matricielle du flux reconstruit :** Pour simplifier l'usage les outils de calculs formels, il est pertinent d'écrire se qui précède sous forme matricielle.

Pour les flux gauches :

$$\hat{\hat{\Phi}}^n_{k-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta x}\begin{bmatrix}0\\-1\\+1\\0\end{bmatrix}^\top \cdot \begin{bmatrix}\frac{1}{8} & 1 & -\frac{1}{8} & 0\\ -\frac{1}{8} & 1 & +\frac{1}{8} & 0\\ 0 & +\frac{1}{8} & 1 & -\frac{1}{8}\\ 0 & -\frac{1}{8} & 1 & +\frac{1}{8}\end{bmatrix}^{\Delta l} \cdot \begin{bmatrix}u^l_{k-2}\\u^l_{k-1}\\u^l_k\\u^l_{k+1}\end{bmatrix}, \tag{3.37}$$

$$\hat{\hat{\Psi}}^n_{k-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta x^2}\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}\\+\frac{3}{2}\\-\frac{3}{2}\\+\frac{1}{2}\end{bmatrix}^\top \cdot \begin{bmatrix}\frac{1}{8} & 1 & -\frac{1}{8} & 0\\ -\frac{1}{8} & 1 & +\frac{1}{8} & 0\\ 0 & +\frac{1}{8} & 1 & -\frac{1}{8}\\ 0 & -\frac{1}{8} & 1 & +\frac{1}{8}\end{bmatrix}^{\Delta l} \cdot \begin{bmatrix}u^l_{k-2}\\u^l_{k-1}\\u^l_k\\u^l_{k+1}\end{bmatrix}. \tag{3.38}$$

Pour les flux droits :

$$\hat{\hat{\Phi}}^n_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta x}\begin{bmatrix}0\\-1\\+1\\0\end{bmatrix}^\top \cdot \begin{bmatrix}\frac{1}{8} & 1 & -\frac{1}{8} & 0\\ -\frac{1}{8} & 1 & +\frac{1}{8} & 0\\ 0 & +\frac{1}{8} & 1 & -\frac{1}{8}\\ 0 & -\frac{1}{8} & 1 & +\frac{1}{8}\end{bmatrix}^{\Delta l} \cdot \begin{bmatrix}u^l_{k-1}\\u^l_k\\u^l_{k+1}\\u^l_{k+2}\end{bmatrix}, \tag{3.39}$$

$$\hat{\hat{\Psi}}^n_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta x^2}\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}\\+\frac{3}{2}\\-\frac{3}{2}\\+\frac{1}{2}\end{bmatrix}^\top \cdot \begin{bmatrix}\frac{1}{8} & 1 & -\frac{1}{8} & 0\\ -\frac{1}{8} & 1 & +\frac{1}{8} & 0\\ 0 & +\frac{1}{8} & 1 & -\frac{1}{8}\\ 0 & -\frac{1}{8} & 1 & +\frac{1}{8}\end{bmatrix}^{\Delta l} \cdot \begin{bmatrix}u^l_{k-1}\\u^l_k\\u^l_{k+1}\\u^l_{k+2}\end{bmatrix}. \tag{3.40}$$

### 3.2.2 Les équations équivalentes

#### A Calcul des équations équivalentes

Tout le calculs ont été réalisés grâce à la bibliothèque de calcul formel `Sympy` et les codes sont disponibles à l'adresse : https://github.com/Ocelot-Pale/etude_MR_RK2.

**A.i Équation équivalente du schéma `I` - non adapté** Le calcul de l'équation équivalente sans MRA donne :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Delta x^2 \frac{D}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \Delta t^2 \frac{D^3}{6}\frac{\partial^6 u}{\partial x^6} - \Delta t^3 \frac{D^4}{24}\frac{\partial^8 u}{\partial x^8}. \tag{3.41}$$

Le schéma de référence est donc bien d'ordre deux en espace et en temps. En utilisant la constante CFL diffusive (constante de Von Neumann) : $\lambda = D\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Delta x^2 \frac{D}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \lambda^2 \Delta x^4 \frac{D}{6}\frac{\partial^6 u}{\partial x^6} - \lambda^3 \Delta x^6 \frac{D}{24}\frac{\partial^8 u}{\partial x^8}. \tag{3.42}$$

**A.ii Équation équivalente du schéma `II` - adapté *sans* reconstruction des flux** Lorsque le schéma est adapté sans reconstruction des flux sur $\Delta l$ niveaux de détails, l'équation du équivalente est :

$$\frac{\partial}{\partial t}u = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + (2^{\Delta l}\Delta x)^2 \frac{D}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \Delta t^2 \frac{D^3}{6}\frac{\partial^6 u}{\partial x^6} - \Delta t^3 \frac{D^4}{24}\frac{\partial^8 u}{\partial x^8} \tag{3.43}$$

En somme, sans reconstruction des flux, le schéma avec MRA se comporte comme le schéma de référence mais sur un maillage plus grossier. La constante d'erreur en espace est effet de l'ordre de $2^{2\Delta l}\frac{D}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$ au lieu de $\frac{D}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$. En injectant la CFL diffusive dans l'équation (3.43) :

$$\frac{\partial}{\partial t}u = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + (2^{\Delta l}\Delta x)^2\frac{D}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \lambda^2\Delta x^4\frac{D}{6}\frac{\partial^6 u}{\partial x^6} - \lambda^3\Delta x^6\frac{D}{24}\frac{\partial^8 u}{\partial x^8} \tag{3.44}$$

**A.iii Équation équivalente du schéma `III` - adapté *avec* reconstruction des flux** En évaluant les flux à partir des cellules reconstruites au niveau le plus fin, l'équation équivalente est :

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2}D^2\left(2^{2\Delta l}-1\right)\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \Delta t^2\frac{D^3}{6}\frac{\partial^6 u}{\partial x^6} - \Delta t^3\frac{D^4}{24}\frac{\partial^8 u}{\partial x^8} \\ &\quad + 2^{2\Delta l}\frac{D\Delta x^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - 2^{2\Delta l}\frac{D\Delta l\Delta x^2}{4}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\end{aligned} \tag{3.45}$$

Ce schéma est d'ordre un en temps contrastant avec l'ordre deux des deux schémas précédents. Ainsi, théoriquement la reconstruction au plus fin des flux réduit l'ordre de convergence temporelle de la méthode des lignes. En utilisant la constante CFL diffusive, l'équation (3.45) se réécrit :

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= +D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ &\quad + \Delta x^2 D\left(\frac{\lambda}{2}(2^{2\Delta l}-1) + \frac{2^{2\Delta l}}{12}(1-3\Delta l)\right)\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \\ &\quad - \Delta x^4\frac{D\lambda^2\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}}{6} - \Delta x^6\frac{D\lambda^3\frac{\partial^8 u}{\partial x^8}}{24}\end{aligned} \tag{3.46}$$

## B Comparaison

Pour comprendre le mécanisme menant à cette perte d'ordre, l'équation équivalente du schéma avec AMR et reconstruction des flux est comparée à celle du schéma de référence, **avant** d'appliquer la procédure de Cauchy-Kovaleskaya ; c'est à dire sans exploiter $\partial_t u = D\partial_{xx}u$.

**B.i Sans multirésolution (schéma de référence)** L'équation modifiée sans multirésolution, avant procédure de Cauchy-Kovaleskaya est :

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ &\quad + \frac{1}{2}\underbrace{\left(D^2\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)}_{\substack{\text{Se compense par}\\ \text{la procédure de}\\ \text{Cauchy-Kovaleskaya}}}\Delta t + \frac{D}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\Delta x^2 - \frac{1}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial t^4}\Delta t^3 - \frac{1}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\Delta t^2.\end{aligned} \tag{3.47}$$

La méthode est bien d'ordre un, car à l'ordre un : $\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ et donc le terme $D^2\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$ se compense au cours de la procédure de Cauchy-Kovaleskaya.

**B.ii multirésolution avec reconstruction des flux** L'équation modifiée avec multirésolution et reconstruction des flux, sans appliquer procédure de Cauchy-Kovaleskaya est :

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} =& D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ &+ \frac{\Delta t}{2}\underbrace{\left(2^{2\Delta l}D^2\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)}_{\text{Ne se compensent plus.}} - \frac{\Delta t^3}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial t^4} - \frac{\Delta t^2}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + \frac{\Delta x^2}{12}(1-3\Delta l)2^{2\Delta l}D\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\end{aligned} \tag{3.48}$$

Dans ce cas le terme en facteur du $\Delta t$ ne se s'annule plus. En effet le terme $D^2\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$ est devenu au cours de la reconstruction $2^{2\Delta l}D^2\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$. En conséquence, la méthode perds un ordre de convergence temporel.

Ce mécanisme s'explique de la manière suivante : dans l'équation équivalente, le terme $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$ apparaît indépendamment de la discrétisation spatiale [11]. La méthode des lignes initiale crée un terme *sur mesure* pour le compenser en approximant le terme spatial $D^2\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$. Cependant au cours du processus de compression-reconstruction, cette approximation est entachée d'un facteur $2^{2\Delta l}$. En d'autres termes le terme spatial construit pour compenser un terme temporel a été modifié par la multirésolution, alors que le terme temporel lui n'est pas affecté par la multirésolution. Ainsi, les deux termes ne se compensent plus et l'ordre est perdu.

### C Conclusion sur le résultat obtenu grâce aux équations équivalentes

Il a été ici mis en lumière que la reconstruction des flux au plus fin sur appliquée à méthode des lignes très simple peut théoriquement mener à un couplage des erreurs espace-temps polluant l'ordre initial de la méthode. Alors que cela n'arrive pas lorsque les flux sont évaluées plus grossièrement. En particulier l'étape de reconstruction-reconstruction altère des termes spatiaux qui ne compensent plus certaines erreurs temporelles et perturbent l'ordre de la méthode Runge et Kutta.

11. Il emerge de la différence $u_k^{n+1} - u_k^n$ à $k$ fixé.

### 3.2.3 Complément expérimental

#### A Présentation du cas test

Pour tâcher d'observer la perte d'ordre des expériences numériques ont été menées grâce au logiciel Samurai. Les expériences ont portées sur la simulation de l'équation de diffusion en 1D avec une solution initiale en forme de courbe de Gauß avec conditions de Dirichlet homogènes au bords. Pour limiter les effets de bords (qui non pris en compte dans l'analyse précédente) le domaine à été pris *grand* devant la largeur de la gaussienne initiale et le temps final assez petit pour que la diffusion n'atteigne pas le bord (qualitativement). L'erreur à été calculée comme la norme $L^2$ de l'erreur au temps final centrée sur la gaussienne [12]. Ce cas test est pertinent car il offre une solution lisse mais avec des gradients (donc l'AMR doit compresser à divers endroits) tout en offrant une solution analytique connue pour comparer l'erreur. En effet le problème posé sur $\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}$ (sans conditions de bord) :

$$\partial_t u = \partial_{xx} u, \tag{3.49}$$
$$u(t=0,x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi a}} \exp\left(-\frac{x^2}{4a}\right).$$

Admet pour solution :

$$u(t=0,x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi a(1+t)}} \exp\left(-\frac{x^2}{4a(1+t)}\right). \tag{3.50}$$

La solution numérique avec conditions de bord a été comparée avec la solution analytique sans conditions de bord, au vu de la taille du domaine et des temps de simulation cela ne devrait pas interférer de manière mesurable.

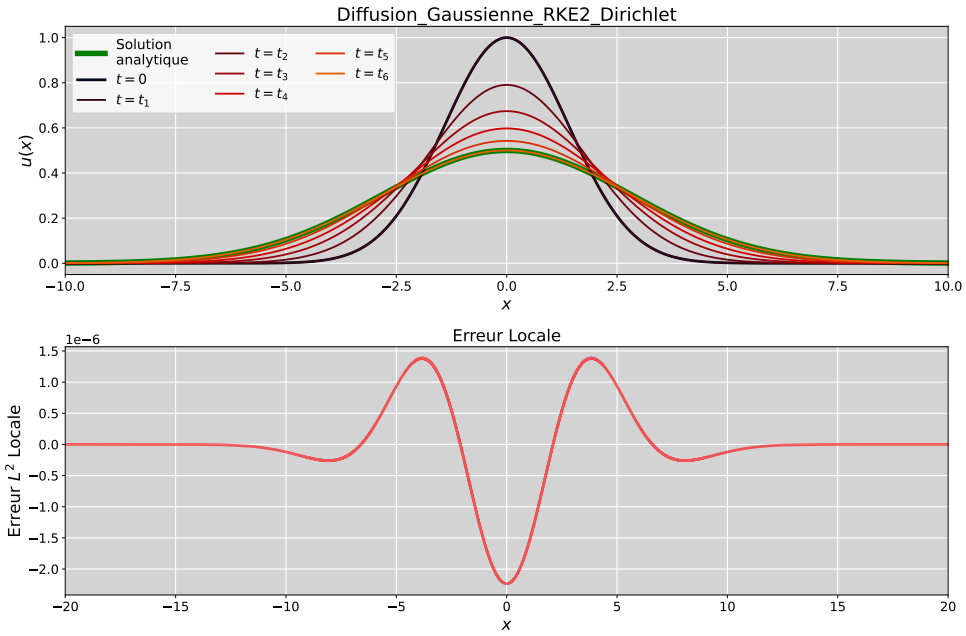



FIGURE 3.8 – Illustration d'une simulation du cas test 3.49 avec conditions de Dirichlet homogène et affichage de l'erreur locale au temps final.

12. On calcul l'erreur autour de la gaussienne et pas sur tout le domaine car sinon elle serait artificiellement faible puisque la solution est quasi-nulle sur le reste du domaine qui a été pris grand pour éviter les effets de bord.

## B Des défis expérimentaux

L'observation du mécanisme de perte d'ordre mis théoriquement à jour précédemment est une tâche ardue.

**B.i Une expérience exacte impossible à reproduire** Il n'est pas possible d'utiliser la méthode numérique utilisée dans l'étude théorique pour essayer de la valider expérimentalement. En effet, la méthode est une RK2 explicite, elle impose sur ce problème de diffusion une condition de stabilité du type $\Delta t \propto \Delta x^2$, ce qui en pratique donne $\Delta t \ll \Delta x$. De fait, la majorité des erreurs sont liés au pas d'espace "grand" devant le pas de temps, et donc si l'on fixe le pas d'espace pour faire converger la méthode en temps, l'erreur est déjà saturée en temps et on n'observe rien. C'est un classique de l'analyse numérique.

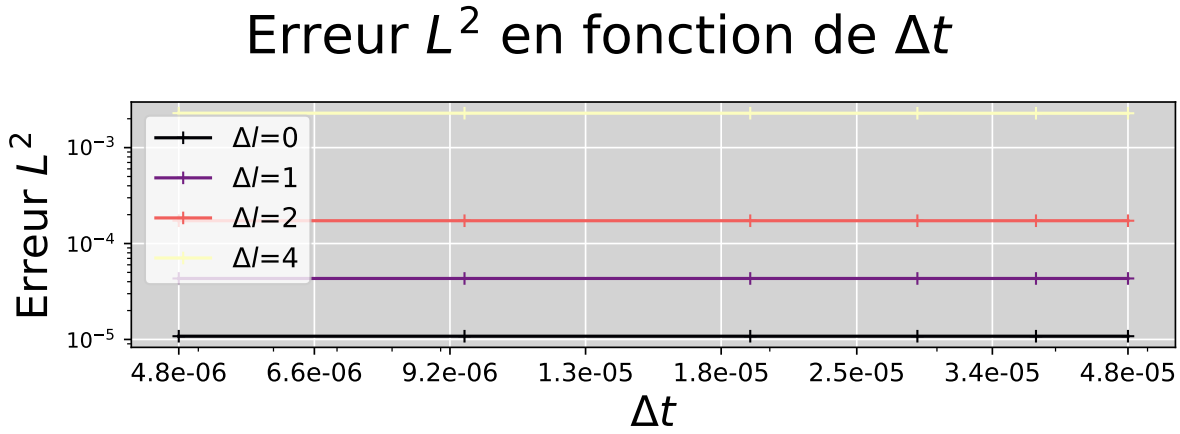



FIGURE 3.9 – Saturation de la convergence temporelle avec une méthode RKE2 sur l'équation de diffusion. L'erreur Lš stagne malgré la diminution du pas de temps, illustrant la domination de l'erreur spatiale due à la contrainte CFL $\Delta t \propto \Delta x^2$.

**B.ii Une tentative infructueuse** Suite à cette limite, l'expérience a été retentée avec une méthode voisine mais sans contrainte de stabilité. Le code de calcul Samurai a donc été relancé avec une méthode RK implicite d'ordre deux, plus précisément une SDIRK. Cependant, la reconstruction des flux au niveau le plus fin est difficile à mettre en oeuvre pour les méthode implicites et donc le schéma n'a été éprouvé qu'avec la MRA classique. Dans ce cas l'ordre deux en temps est bien maintenu (voir fig. 3.10), comme ce que prévoyais l'équation équivalente pour la ERK2. Toutefois cela ne dit rien du comportement avec reconstruction au niveau le plus fin.

**B.iii Des biais multiples** D'autres biais expérimentaux peuvent expliquer l'invisibilité du phénomène. Par exemple l'étude précédente ne prend pas en compte les conditions de bord. Une autre hypothèse est peut être que le maillage n'est compressé que localement ce qui n'altère que peut être pas la convergence globale. Enfin, dans les calculs théoriques précédents, il a été fait l'hypothèse que l'évaluation est faite au niveau le plus fin (que la solution est entièrement reconstruite pour l'évaluation des flux), ce qui n'est pas fait en pratique. Cette idée viens du fait qu'intuitivement, si l'on reconstruit jusqu'au niveau le plus fin les termes servant dans le calcul des flux, alors l'erreur devrait

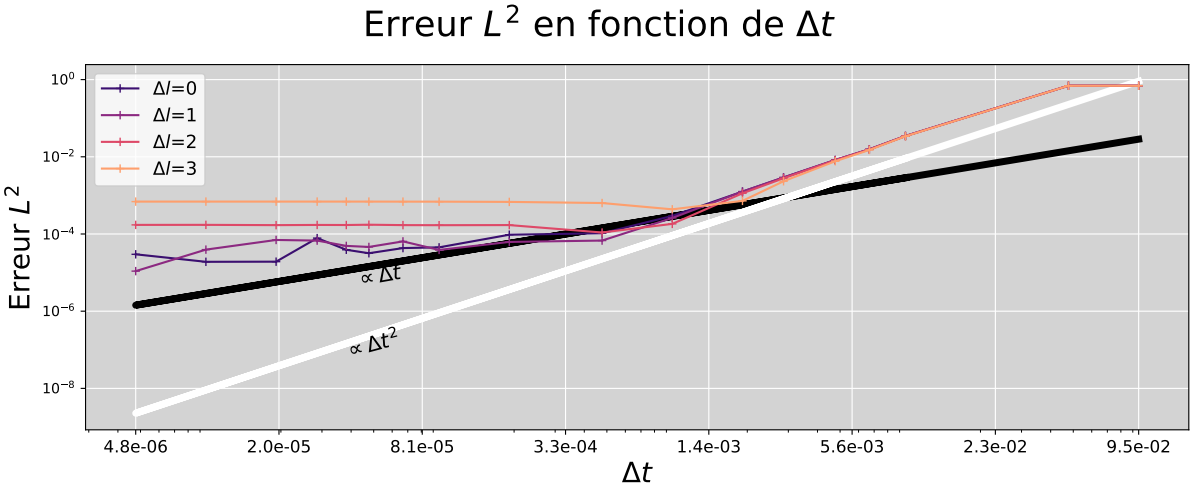



FIGURE 3.10 – Convergence temporelle d'ordre 2 avec une méthode SDIRK-RK2 sur l'équation de diffusion pour différentes profondeurs de maillages adaptés. L'ordre théorique est préservé comme attendu, puisque les flux sont évalués au niveau courants.

diminuer ; c'est ce que suggère [6]. Cependant cette fonctionnalité n'étant pas encore disponible dans le logiciel de calcul, l'expérience a été réalisée sans reconstruire ls flux au niveau le plus fin mais en prenant la valeur disponible au niveau courant de compression. Il semble peu probable que ce soit la cause de la non-observation du phénomène de perte d'ordre mais cela reste un biais potentiel. Enfin peut être qu'un bug s'est glissé dans mon implémentation mais cela semble peu probable puisque ce serait une erreur d'implémentation qu'il "améliore" l'ordre de convergence...

### 3.2.4 Conclusion

En conclusion, en résolvant le problème de diffusion grâce à la méthode des lignes proposée, la multi-résolution adaptative usuelle (sans reconstruction des flux) préserve l'ordre du schéma. En revanche et contre toute attente, lorsque les flux sont reconstruits au niveau le plus fin, l'ordre deux en temps du semble formellement réduit à un. Malheureusement ce phénomène n'a pas pu être mis en lumière expérimentalement, notamment à cause de la contrainte de stabilité. Face à ces difficultés des expériences numériques plus ambitieuses ont été entreprises (méthodes stabilisées, différents niveaux de reconstruction, extension à d'autre cas que la diffusion "pure" etc...). C'est l'object de la contribution suivante qui étudie empiriquement l'impact de la reconstruction ou non du flux sur les problèmes de diffusion puis de diffusion-réaction.

## 3.3 Impact de la qualité de reconstruction des flux pour les problèmes diffusion avec AMR.

Cette troisième contribution prolonge empiriquement la précédente, étudiant *expérimentalement* l'impact de différentes approches de multirésolution adaptatives sur les solution numériques des problèmes diffusifs. Elle étudie trois manières de mettre en place l'adaptation spatiale par MRA : celle des schémas `II` (sans reconstruction des flux) et `III` (avec reconstruction des flux) de la contribution précédente ainsi qu'une approche *intermédiaire*.

Ce travail s'articule de la manière suivante :

- ◇ 3.3.1 Présentation des paradigmes MRA comparés.
- ◇ 3.3.2 Première expérience numériques comparant l'erreur en fonction du paradigme d'AMR choisi sur le problème de diffusion résolu par le schéma numériques de la contribution antérieure (3.2) - méthode des lignes, Volumes Finis + Runge et Kutta explicite.
- ◇ 3.3.3 Les résultats, inattendus ont conduit à formuler l'hypothèse que les schéma *avec* reconstruction serait moins stables que le schéma *sans* reconstruction. Cependant cette hypothèse est invalidée par une étude de stabilité linéaire.
- ◇ 3.3.4 La principale limite de l'étude antérieure est la contrainte de stabilités de la méthode explicite imposant . Cela ne permet d'observer que des solutions convergées en temps (erreur spatiale dominante car stabilité $\Rightarrow \Delta t \ll \Delta x$). Pour poursuivre la comparaison dans un contexte où les erreurs temporelles ne sont pas négligeables, une seconde expérience est réalisée remplaçant la méthode ERK2 par la méthode *stabilisée* ROCK2 [2] permettant d'accéder à une plus large gamme de pas de temps.
- ◇ 3.3.5 Les résultats numériques pour des pas de temps moins restreint sont encore plus inattendus que les précédents. Cependant en les reliant aux travaux théoriques précédents (3.2), l'ensemble des comportements obtenus sont finalement compris et expliqués.

### 3.3.1 Les schémas paradigmes d'AMR comparés

Les schémas comparés dans cette étude sont ceux de l'étude précédente (3.2) : le schéma `I` non adapté (référence), le schéma `II` adapté sans reconstruction des flux, le schéma `III` adapté avec reconstruction des flux au niveau le plus fin. À ceux-ci s'ajoute une approche intermédiaire entre les schémas `II` et `III` : le schéma `IV` qui est adapté et qui reconstruit les flux avec un niveau de détails supplémentaire. C'est à dire que si en un point, la multirésolution adaptative représente la solution au niveau de détail $l$, et si le maillage propose un niveau de détail maximal $l^{\max} > l$ ; alors le schéma `II` calcule les flux à partir des données au niveau $l$, le schéma `III` calcule les flux à partir de données reconstruites du niveau $l$ jusquau niveau $l^{\max}$ (nécessitant $\Delta l = l^{\max} - l$ reconstructions) et le schéma `IV` calcul les flux à partir de données reconstruites du niveau $l$ jusqu'au niveau $l+1$ (nécessitant une seule reconstruction). L'objectif du schéma `IV` est d'être un bon compromis entre précision et coût computationnel.

### 3.3.2 Expérience numérique avec une méthode Runge et Kutta explicite

Cette première expérience numérique résout numériquement l'équation de diffusion par le schéma de la contribution 3.2 (Volumes Finis + ERK2). Une méthode implicite pourrait paraître plus appropriée pour s'affranchir des problèmes de stabilité ; cependant l'inversion d'un système linéaire couplé à la reconstruction des flux à des niveaux plus fin (non-standard, algos  et 3) est difficile à implémenter informatiquement et aurait ralenti l'étude. À cause de la contrainte de stabilité $\Delta t \propto \Delta x^2$, seules des solutions convergées en temps (erreur spatiale dominante puisque $\Delta t \ll \Delta x$) sont observées. Cette contrainte est levée dans l'expérience suivante en 3.3.4.

#### A Résultats numériques

Les résultats sont étonnants : parmi les schéma adaptés, le schéma `II` (le plus grossier) offre la plus faible erreur et plus l'algorithme reconstruit finement les flux plus l'erreur augmente. À titre d'exemple, pour la diffusion d'une Gaussienne (*cf* 3.2.3) et un seuil de compression $\varepsilon = 10^{-4}$, les erreurs $L^2$ au temps final $T_f = 1$ sont les suivantes :

| Schéma $n^o$ | Niveau d'évaluation des flux | Erreur $L^2$ |
|---|---|---|
| `I` | $\emptyset$ MRA | $2 \times 10^{-5}$ |
| `II` | Courant | $1 \times 10^{-4}$ |
| `III` | Plus fin $l^{\max}$ | $3 \times 10^{-4}$ |
| `IV` | Inférieur direct $(l+1)$ | $2 \times 10^{-4}$ |

L'erreur des différents schéma adaptés est de l'ordre du seuil de compression choisit $\varepsilon = 10^{-4}$ montrant que ce sont bien les effets de la MRA qui sont dominants ici.

#### B Analyse et hypothèses

Ce résultat est assez surprenant puisqu'on s'attendrait à ce qu'une reconstruction plus précise du flux donne de meilleurs résultats. Toutefois c'est assez cohérent avec l'analyse théorique en 3.2 qui prédit que reconstruire augmente le nombre de terme d'erreur (*cf.* 3.2.2). Face à ces résultats, plusieurs hypothèses sont émises :

1. La reconstruction introduit des *instabilités* dans le schéma.
2. Peut-être que cette tendance ne vaut que sur des solutions avec où l'erreur temporelle pure (sans prendre en compte une éventuelle interaction avec la MRA) est négligeable. En effet, le caractère explicite de la méthode ERK2 force le choix $\Delta t \propto \Delta x^2$ et donc en pratique $\Delta t \ll \Delta x$. Et donc le régime $\Delta t \sim \Delta x$ ne peut pas être exploré expérimentalement.

La première hypothèse est éprouvée dans la prochaine section 3.3.3 et une méthode explicite stabilisée est utilisée [13] en 3.3.4 pour explorer numériquement la seconde.

13. On préfère une méthode explicite stabilisée à une méthode implicite, car la reconstruction systématique des flux au niveau fin est très complexe pour une méthode implicite.

### 3.3.3 Analyse de stabilité

Le caractère inattendu du résultat précédent - le schéma AMR sans reconstruction des flux est meilleur que celui avec reconstruction - a fait émergé l'hypothèse que le schéma *avec reconstruction* présenterait des problèmes de stabilités pour certains modes de l'équation. Une étude comparative de la stabilité des deux méthodes a donc été réalisées par analyse de Fourrier - Von Neumann en adaptant le code de calcul formel ayant fourni les équations équivalente en 3.2. Une interface permettant de visualiser ces résultats est disponible à l'adresse : https ://github.com/Ocelot-Pale/etude_MR_RK2/blob/main/code_2/stabilite_AMR_plotly.html.

**La principale conclusion est que la méthode *avec* reconstruction ne présente pas plus de problème de stabilité que la méthode *sans* reconstruction.**

### 3.3.4 Expérience numérique avec une méthode explicite stabilisée

Pour observer ce qui se produit lorsque l'erreur n'est pas saturée en espace mais que l'erreur temporelle intervient également, le logiciel Ponio [14] a été couplé à Samurai. Il permet d'utiliser facilement des méthodes d'intégration en temps complexe. Grâce Ponio, lexpérience précédent à été réitérée en remplaçant la méthode ERK2 par la méthode stabilisée ROCK4 [3]. Cette méthode reste explicite (ce qui permet grâce à Samurai d'étudier facilement les différentes façons d'évaluer les flux) tout en assouplissant significativement la contrainte de stabilité.

#### A Résultats numériques

Les résultats sont présentés en fig. 3.11. Chaque graphique correspond à un paramétrage différent de l'MRA. Les solutions sont comparées à une solution convergée en temps afin d'isoler les erreurs temporelles et celles liées à la MRA de l'erreur spatiale. La grille la plus fine du maillage de niveau 12, ce qui correspond à $2^{12}$ cellules et le maillage peut être représenté sur 6 niveaux, donc du niveau 12 au niveau $12-6=6$. Le graphique de droite correspond à un seuil de compression modéré ($\varepsilon = 10^{-5}$) et celui de gauche à un seuil de compression plus restrictif ($\varepsilon = 10^{-6}$). Sur chaque graphique l'erreur $L^2$ est tracée en fonction du pas de temps pour chaque méthode de calcul du flux numérique : sans MRA (grille fine) ; **MRA niveau courant** ; **reconstruction d'un niveau** ; **reconstruction au niveau le plus fin**. Les principales observations sont :

1. Pour un petit pas de temps : plus les flux sont reconstruit finement plus l'erreur augmente, ce qui est étonnant mais cohérent avec l'expérience numérique précédente.
2. Pour un grand pas de temps : la méthode d'évaluation du flux importe peu. Les erreurs en temps dominent les erreurs liés à la MRA.
3. Il existe une gamme de pas de temps intermédiaires où les méthodes reconstruisant les flux sur-performent la MRA classique **et** (étonnant !) la méthode sur grille fine.

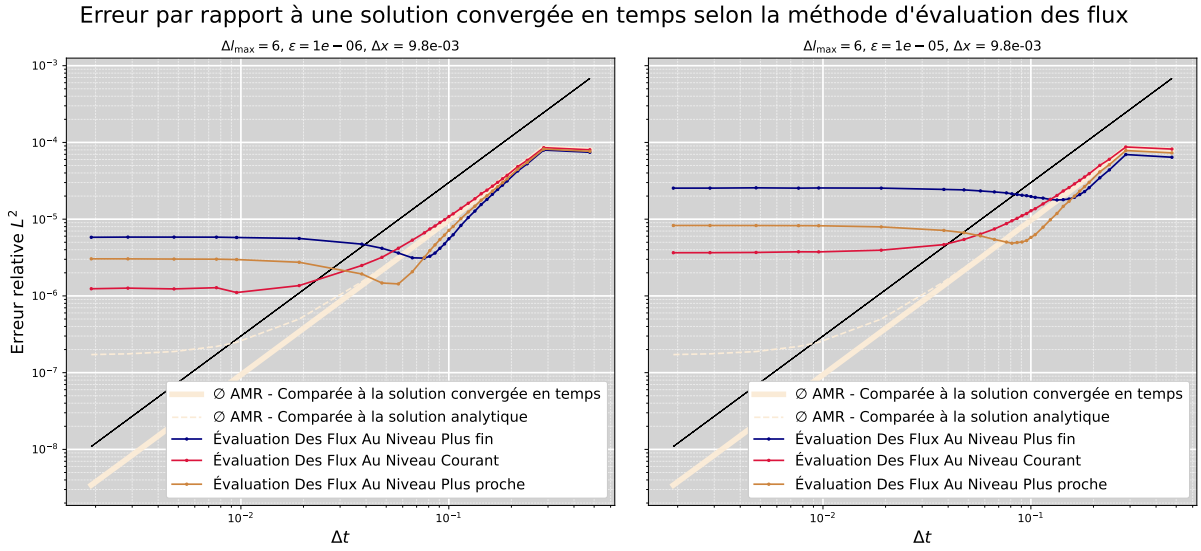



FIGURE 3.11 – Convergence pour les différentes méthodes numériques.

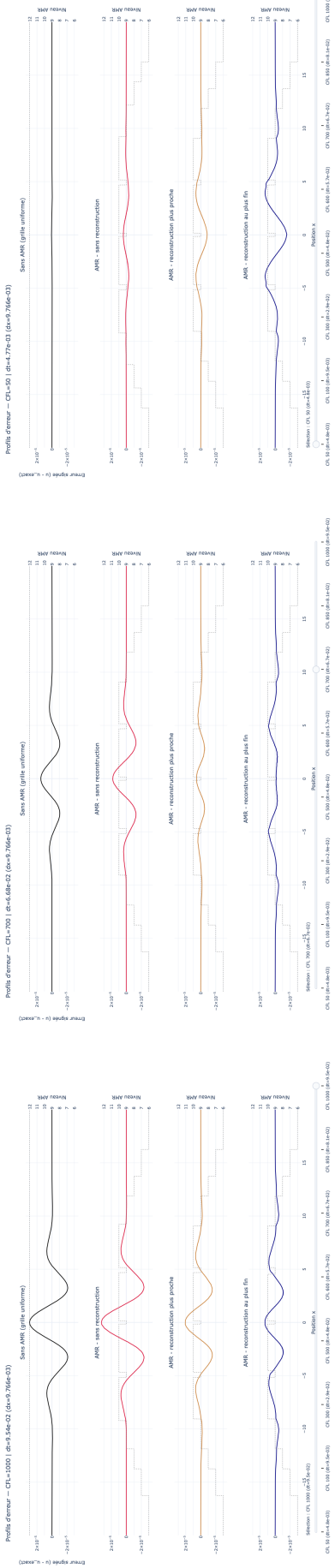
14. https://github.com/hpc-maths/ponio

Afin d'éclairer ces résultats surprenants, la figure 3.12 présente le profil des erreurs pour les différents régimes de pas de temps : petit, intermédiaire, grand.

**Pour la méthode sur grille fine et la méthode MRA classique :** le profil présente une *cloche centrale* qui "s'écrase" au fur et à mesure que le pas de temps se réduit, de fait l'erreur chute avec le pas de temps.

**En revanche pour les méthodes impliquant une reconstruction :** le profil présente également une *cloche centrale* mais au lieu de s'écraser, elle change progressivement de convexité et de signe. Elle est d'abord positive convexe pour les grands pas de temps puis concave négative pour les petits pas de temps. Pour un régime intermédiaire, la cloche est aplatie en zéro ce qui provoque pour ces pas de temps, la chute brutale de l'erreur.

Ce comportement très intéressant - le changement de signe de la cloche - résulte du couplage entre les erreurs en temps du schéma et les erreurs de la reconstruction de la MRA. Dans la suite, nous allons relier cette observations au équations équivalentes précédemment établies.



(a) Constante CFL Élevée

(b) Constante CFL Moyenne

(c) Constante CFL Petite

FIGURE 3.12 – Profils d'erreur pour différentes valeurs de la constante CFL. C'est le pas d'espace est fixé, cela revient simplement à changer le pas de temps.

### 3.3.5 Lien avec les équations équivalentes

Pour comprendre les résultats de convergence précédents (3.3.4), le profil des erreurs a été tracé (voir 3.12) pour chaque méthode numérique et pour différents régimes de CFL; puis ces observations ont été reliées aux équations équivalentes développées en 3.2. Cette mise en relation est cohérente car les équations équivalentes ont été calculées pour un schéma d'intégration en temps ERK2 et l'expérience a été réalisée avec ROCK2 qui est une ERK2 stabilisée.
Les résultats précédents sont confirmés :

1. Pour les petites CFL, les méthodes avec reconstruction sont moins précisés que les méthodes sans reconstruction.
2. Il existe une gamme de CFL très précise pour laquelle les schémas avec reconstruction surperforment les autres méthodes.

Munis de ces nouveaux résultats, une première hypothèse est formulée puis invalidée, avant qu'une seconde ne soit proposée et validée.

#### A Première Hypothèse

**L'observation** suivante a de plus été faite : *il semble que le profil de l'erreur avec reconstruction ressemble à la dérivée spatiale d'ordre quatre de la solution et que le signe de cette erreur change avec la CFL.*
**Une première hypothèse** a d'abord été proposée : *l'évolution du profil d'erreur selon la CFL s'explique par le terme* $\Delta x^2 D\left(\frac{\lambda}{2}(2^{2\Delta l}-1)+\frac{2^{2\Delta l}}{12}(1-3\Delta l)\right)\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$ *dans l'équation équivalente* (3.46). En effet pour les grandes CFL le coefficient $\frac{\lambda}{2}(2^{2\Delta l}-1)+\frac{2^{2\Delta l}}{12}(1-3\Delta l)$ est positif et pour les petites CFL il est négatif, pour $\lambda = \frac{4^{\Delta l}}{6}\frac{3\Delta l-1}{4^{\Delta l}-1} \underbrace{>}_{\Delta l>0} 0$ ce coefficient serait null expliquant chute de l'erreur pour ces CFL, l'erreur s'allégeant du terme d'ordre deux.
**Validation expérimentale :** Pour valider cette hypothèse, une régression linéaire entre l'erreur numérique et la dérivée $4^e$ de la solution a été réalisée par une méthode des moindres carrées :

$$\min_{\alpha\in\mathbb{R}} \|\alpha\partial_x^4 u - \mathrm{err}\|^2.$$

Ce modèle (fig. 3.13) explique bien l'erreur pour les petites CFL ($R^2 > 0.9$) mais mal pour les grandes CFL ($R^2 \sim 0.2$).

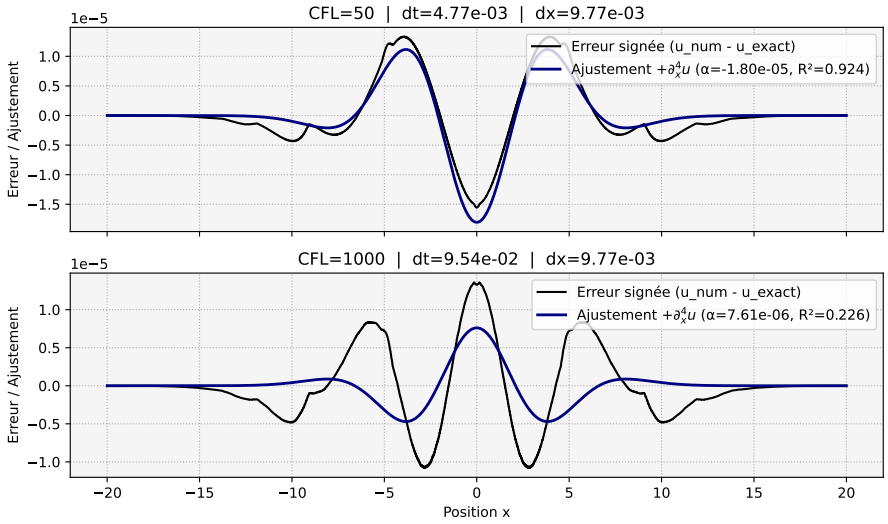



FIGURE 3.13 – Régression entre l'erreur numérique expérimentale (AMR + reconstruction fine) et la dérivées $4^e$ de la solution.

## B Seconde Hypothèse

**Une seconde observation** a alors révisé la première : *à grande CFL, l'erreur ne ressemble pas à l'opposé de* $\partial_x^4 u$ *mais à* $\partial_x^6 u$.

**Une seconde hypothèse** a alors été émise :

- ◇ Pour les grandes CFL, le terme $-\Delta x^4 \frac{D}{6} \lambda^2 \partial_x^6 u$, quadratique en $\lambda$ domine dans (3.46),
- ◇ Pour les petites CFL, le terme $\Delta x^2 D \left( \frac{\lambda}{2} (2^{2\Delta l} - 1) + \frac{2^{2\Delta l}}{12} (1 - 3\Delta l) \right) \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$, affine en $\lambda$ domine.

Le fait que pour les petites CFL le schéma `II` (sans reconstruction) soit plus précis que le schéma `III` (avec reconstruction), s'explique simplement par le fait que la constante d'erreur pondérant terme d'erreur dominant $\Delta x^2 \partial_x^4 u$ est plus grand pour le schéma `III` :

| **Schéma n°** | **Évaluation des flux** | **Constante pondérant l'erreur en $\Delta x^2 \partial_x^4 u$ (dominante quand $\lambda$ est petite)** |
|---|---|---|
| I | ∅ AMR | $\frac{D}{12}$ |
| II | Sans reconstruction | $2^{\Delta l} \frac{D}{12}$ |
| III | Avec reconstruction | $D \left( \frac{\lambda}{2} (2^{2\Delta l} - 1) + \frac{2^{2\Delta l}}{12} (1 - 3\Delta l) \right)$ |

**Validation expérimentale :** pour valider empiriquement cette nouvelle hypothèse, l'erreurs a été modélisée par moindre carré comme $\text{err} \approx \alpha \partial_x^4 u + \beta \partial_x^6 u$. Ce modèle explique très bien l'erreur pour tous les régimes de CFL (voir 3.14).

**Remarque :** la plage de CFL où la méthode avec reconstruction est plus la précise correspond en fait au cas ou les profils de $\alpha \partial_x^4 u$ de $\beta \partial_x^6 u$ se compensent. C'est donc un comportement tout à fait accidentel lié au fait que les dérives de la courbe de Gauss sont en quelque sort "en opposition de phase".

**Analyse retrospective :** Le comportement observé s'explique par une *incohérence précision* entre le schéma et la reconstruction. Une prédiction à trois points n'apporte pas d'information supplémentaire par rapport au schéma spatial d'ordre deux : elle reste du même ordre de précision et ne réduit


FIGURE 3.14 – Régression entre l'erreur numérique expérimentale (AMR + reconstruction fine) et une combinaison linéaire des dérivées $4^e$ et $6^e$ de la solution.

donc pas le terme d'erreur dominant. Dans ces conditions, la reconstruction ajoute du bruit au lieu d'améliorer la solution.

**Complément important :** Ce n'est pas présenté ici, mais le travail à été refait avec un prédicteur à 5 points, permettant d'approximer correctement la dérivée d'ordre quatre. Alors la reconstruction apporte un gain notable, les solutions numériques avec et sans MRA sont dans ce cas très proches.

### 3.3.6 Extension sur une équation de diffusion-réaction

Cette expérience permet d'observer l'impact du niveau de reconstruction des flux quand l'opérateur de diffusion est couplé à un opérateur de diffusion et faisant émerger des dynamiques de couplage. L'équation de diffusion est donc remplacée par l'équation de Nagumo (voir 3.1.1). Des ondes progressives sont solution de cette équation, le schéma numérique donc doit être en mesure de suivre la dynamique du front d'onde.

#### A Résumé de l'expérience

L'expérience à été réalisée dans des conditions similaires à l'expérience numérique 3.1. C'est à dire :

- ◇ Profil de l'onde propagative comme état initial.
- ◇ Domaine étendu avec conditions de Neumann aux limites pour limiter les effets de bord

L'unique différence majeur est le remplacement de la méthode Runge et Kutta ImEx par un schéma de séparation d'opérateur avec une méthode stabilisée explicite pour la diffusion (ROCK 2 [3]). Ce choix découle, comme précédemment expliqué, de la nécessité d'éviter toute inversion de système linéaire lorsque les flux sont reconstruits à partir de reconstructions fines.

#### B Résultats de l'expérience

Les résultats présentés à la figure 3.15 confirment les tendances observées sur la diffusion pure :

- ◇ **Pas de temps élevés :** l'erreur est dominée par la discrétisation temporelle. Les trois approches (sans reconstruction, reconstruction partielle ou complète) montrent alors des précisions quasi identiques.
- ◇ **Pas de temps très faibles :** lorsque l'erreur spatiale devient prépondérante, la reconstruction fine des flux dégrade la solution. Plus les flux sont reconstruits, plus l'erreur augmente.
- ◇ **Influence des paramètres :** cette conclusion générale reste valable quels que soient les paramètres $k$ et $D$. Toutefois, lorsque la diffusion est prépondérante (valeurs de $D$ élevées), l'écart de précision entre la méthode sans reconstruction et celle avec reconstruction fine se creuse nettement.
- ◇ **Profils raides et pas intermédiaires :** pour des ondes très raides (réaction dominante), on observe à nouveau un effondrement brutal de l'erreur sur une gamme de pas de temps intermédiaires. Cet effet, déjà mis en évidence dans le cas ROCK2 sans reconstruction (voir 3.3.5), semble lié à la géométrie du front d'onde et mériterait une investigation dédiée.

## C Conclusion de l'expérience sur Nagumo

Cette série de simulations indique que l'ajout du terme de réaction dans l'équation de Nagumo ne modifie pas de façon radicale le couplage entre le schéma numérique et la MRA. Cela s'explique par le fait que la dégradation observée provient avant tout d'une prédiction des flux insuffisamment précise au regard de l'ordre spatial du schéma, indépendamment de la présence d'une réaction. On note en outre que l'erreur introduite lors de la résolution du terme diffusif ne semble pas se propager au terme de réaction : plus la diffusion domine (grand $D$), plus l'effet négatif de la reconstruction se renforce, ce qui suggère un découplage efficace assuré par le splitting de Strang. Pour aller plus loin, une étude utilisant des méthodes ImEx partitionnées - qui coupleraient peut-être plus les erreurs - telles que PIROCK [1], appliquée à une équation de diffusionréaction avec un terme réactif réellement raide [15], serait pertinente afin de vérifier si ce comportement se maintient.

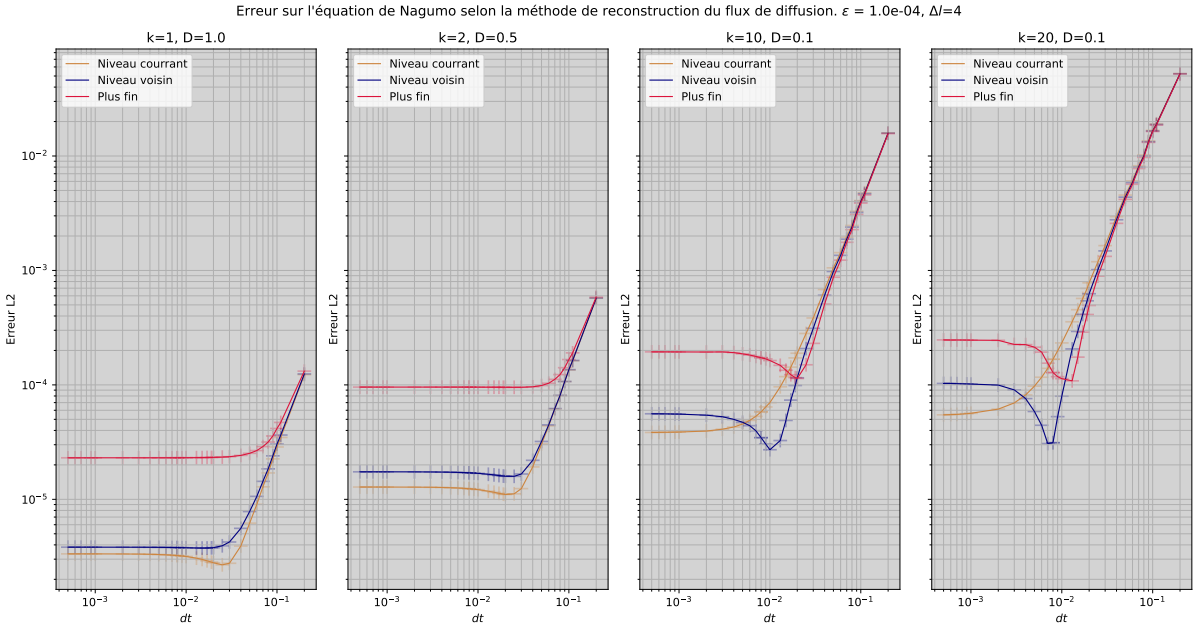



FIGURE 3.15 – Courbes de convergence de chaque méthode d'AMR pour différents paramètres de l'équation. Plus $k$ est élevé, plus le profil de l'onde est raide et plus la réaction domine. La célérité de l'onde est néanmoins identique pour chaque jeu de paramètres puisque le produit $kD$ reste constant d'une expérience à l'autre.

15. On rappelle que la réaction dans l'équation de Nagumo n'est pas raide.

### 3.3.7 Conclusion

Le résultat principal est que, sur le schéma méthode des lignes étudié, une reconstruction systématique des flux n'est bénéfique que si la reconstruction est faite par un prédicteur polynomial à plus de trois points. Dans le cas étudié la reconstruction des flux à partir d'un prédicteur à trois points apporte avant tout du bruit et dégrade la qualité de la solution numérique. **Il semble raisonnable de conjecturer que de manière générale, la reconstruction des flux est bénéfique si et seulement si sa précision est strictement supérieure à l'ordre spatial du schéma.** En somme pour un discrétisation spatiale est d'ordre $k$, la prédiction polynomiale doit au moins être d'ordre $k+1$ et donc se baser $k+2$ points, c'est à dire un stencil $s = \left\lceil \frac{k+1}{2} \right\rceil$.

Sur notre cas d'étude, le prédicteur prend trois points alors que la règle précédente en demanderait au moins quatre. Ainsi la prédiction polynomiale ajoute des erreurs du même ordre que le schéma, dégradant nettement la solution. De plus cela explique qu'avec un prédicteur à cinq points (cas présenté dans la soutenance de stage), la reconstruction mitige considérablement les perturbations induites par la multi-résolution adaptative.

# Chapitre 4

# Conclusion

### Conclusion scientifique

**Résultats** Les principaux résultats du stage sont :

- L'interaction entre l'adaptation spatiale par multirésolution et le schéma numérique dépend directement du schéma d'intégration en temps utilisé. En effet, en 3.1.5, on constate expérimentalement qu'une méthode ImEx et un *splitting* des même ordre ne réagissent pas de la même manière face à l'adaptation spatiale.
- La reconstruction des flux au niveau le plus fin améliore nettement les solutions numériques à condition que la prédiction polynomiale se fasse à partir d'au moins $k+2$ points, avec $k$ l'ordre de discrétisation spatiale [1]. Sinon, la reconstruction peut dégrader sensiblement la solution numérique, notamment pour des solutions déjà convergées en temps.

**Perspectives** Ce travail met en évidence l'importance d'une compréhension fine des interactions entre la multirésolution adaptative et le schéma numérique pour exploiter pleinement le potentiel de cette méthode. Une première étape consisterait à reprendre l'analyse théorique (section 3.2) et expérimentale (section 3.3) en utilisant un interpolateur à cinq points pour la reconstruction des flux. De plus une étude des coûts calculatoires de chaque approche devrait être réalisée pour évaluer le ratio coût/bénéfice d'une reconstruction des flux selon le stencil nécessaire. Ces résultats complémentaires seront sans doute présentés lors de la soutenance. À plus long terme, une analyse théorique systématique du couplage entre méthodes ImEx et MRA serait nécessaire : les observations présentées en 3.1.5 suggèrent un comportement non trivial, propre à chaque intégrateur temporel.

**Conclusion sur ma progression technique** Sur le plan théorique, j'ai approfondi des domaines variés : méthodes de volumes finis [26], systèmes dynamiques et méthodes de RungeKutta additives [18], ainsi que la théorie des ondelettes, en résonance avec mes cours antérieurs. Sur le plan pratique, je me suis familiarisé avec des outils puissants d'analyse (équations équivalentes, analyse de Von Neumann), avec des codes de recherche avancés tels que `Samurai`, et avec les exigences de la simulation numérique (estimation rigoureuse des erreurs, gestion de grilles de taille différente, instabilités). J'ai aussi développé mes compétences de programmation scientifique en Python et en `C++`,

1. Par manque de temps ces résultats n'ont pas été intégrés à ce rapport.

ainsi que ma maîtrise de l'environnement Unix (terminal, git, bash). Enfin, j'ai renforcé mes capacités de communication scientifique, en diffusant mes codes pour en favoriser la reproductibilité et en produisant des graphiques complexes mais lisibles, parfois interactifs.

**Conclusion personnelle** Ce stage a renforcé mon intérêt pour les mathématiques appliquées, en me confrontant à la fois aux exigences théoriques de l'analyse et aux réalités concrètes de la mise en uvre computationnelle. Cela à révélé mon épanouissement au sein des environnements où les méthodes mathématiques contribuent directement à résoudre des problématiques complexes, qu'elles relèvent de la recherche scientifique ou d'applications technologiques. Les gains rendus possibles par la diversité de l'équipe, la réutilisation des outils développés et leur interopérabilité m'ont fait prendre conscience de l'importance du travail collectif et de la mise en commun des savoir-faire dans la réussite d'un projet scientifique.

# Bibliographie


[1] A. ABDULLE et G. VILMART. "PIROCK : A swiss-knife partitioned implicit–explicit orthogonal Runge–Kutta Chebyshev integrator for stiff diffusion–advection–reaction problems with or without noise". In : *Journal of Computational Physics* 242 (2013), p. 869-888.

[2] Assyr ABDULLE. "Fourth Order Chebyshev Methods with Recurrence Relation". In : *SIAM Journal on Scientific Computing* 23.6 (2002), p. 2041-2054. DOI : 10.1137/S1064827500379549.

[3] Assyr ABDULLE et Alexei A. MEDOVIKOV. "Second order Chebyshev methods based on orthogonal polynomials". In : *Numerische Mathematik* 90.1 (2001), p. 1-18. DOI : 10.1007/s002110100292.

[4] Mojtaba ALIASGHAR-MAMAGHANI et al. "Multiphysics Modeling of Chloride-Induced Corrosion Damage in Concrete Structures". In : *Computers & Structures* 308 (2025), p. 107643. ISSN : 0045-7949. DOI : 10.1016/j.compstruc.2025.107643.

[5] Uri M. ASCHER, Steven J. RUUTH et Raymond J. SPITERI. "Implicit-explicit Runge-Kutta methods for time-dependent partial differential equations". In : *Applied Numerical Mathematics* 25.2 (1997). Special Issue on Time Integration, p. 151-167. ISSN : 0168-9274. DOI : https://doi.org/10.1016/S0168-9274(97)00056-1. URL : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168927497000561.

[6] BELLOTI et al. "Modified equation and error analyses on adaptative meshes for the resolution of evolutionary PDEs with Finite Volume schemes". In : (2025).

[7] M. BOUCHET. *Le laplacien discret 1D*. Notes de cours. Agrégation externe de mathématiques 2019-2020, Leçons 144, 155, 222, 226, 233. ENS Rennes, 2020. URL : https://perso.eleves.ens-rennes.fr/~mbouc892/lapdisc1d.pdf.

[8] Philippe G. CIARLET. *Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation*. 1re éd. Ouvrage de référence en analyse numérique et optimisation. Paris : Dunod, 1982. ISBN : 978-2-04-012365-3.

[9] A. COHEN et al. "Fully adaptive multiresolution finite volume schemes for conservation laws". In : *Mathematics of Computation* 72 (2003).

[10] Marcus Ó CONAIRE et al. "A Comprehensive Modeling Study of Hydrogen Oxidation". In : *International Journal of Chemical Kinetics* 36.11 (2004), p. 603-622. DOI : 10.1002/kin.20026.

[11] V. DARU et C. TENAUD. "High order one-step monotonicity-preserving schemes for unsteady compressible flow calculations". In : *Journal of Computational Physics* 193.2 (2004), p. 563-594. ISSN : 0021-9991. DOI : https://doi.org/10.1016/j.jcp.2003.08.023. URL : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999103004327.

[12] Ralf DEITERDING et al. “Comparison of Adaptive Multiresolution and Adaptive Mesh Refinement Applied to Simulations of the Compressible Euler Equations”. In : *SIAM Journal on Scientific Computing* 38.5 (2016), S173-S193. DOI : 10.1137/15M1026043.

[13] Max Pedro DUARTE. “Méthodes numériques adaptives pour la simulation de la dynamique de fronts de réaction multi-échelle en temps et en espace”. 2011ECAP0057. Thèse de doct. 2011. URL : http://www.theses.fr/2011ECAP0057/document.

[14] Tarek ECHEKKI. “Multiscale methods in turbulent combustion : strategies and computational challenges”. In : *Computational Science & Discovery* 2.1 (2009), p. 013001. DOI : 10.1088/1749-4699/2/1/013001.

[15] Richard FITZHUGH. “Impulses and Physiological States in Theoretical Models of Nerve Membrane”. In : *Biophysical Journal* 1.6 (1961), p. 445-466. ISSN : 0006-3495. DOI : https://doi.org/10.1016/S0006-3495(61)86902-6. URL : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0006349561869026.

[16] V. GUVANASEN et R. E. VOLKER. “Numerical solutions for solute transport in unconfined aquifers”. In : *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 3.2 (1983), p. 103-123. DOI : https://doi.org/10.1002/fld.1650030203. eprint : https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/fld.1650030203. URL : https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/fld.1650030203.

[17] E. HAIRER. “Order conditions for numerical methods for partitioned ordinary differential equations”. In : *Numerische Mathematik* 36.4 (1981), p. 431-445. ISSN : 0945-3245. DOI : 10.1007/BF01395956. URL : https://doi.org/10.1007/BF01395956.

[18] Ernst HAIRER, Syvert P. NØRSETT et Gerhard WANNER. *Solving Ordinary Differential Equations I : Nonstiff Problems*. 2e 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. URL : https://doi.org/10.1007/978-3-540-78862-1.

[19] Ami HARTEN. “Adaptive Multiresolution Schemes for Shock Computations”. In : *Journal of Computational Physics* 115.2 (1994), p. 319-338. ISSN : 0021-9991. DOI : https://doi.org/10.1006/jcph.1994.1199. URL : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999184711995.

[20] M. KAIBARA et S. M. GOMES. “A fully adaptive multiresolution scheme for shock computations”. In : *Godunov Methods : Theory and Applications*. Sous la dir. d’E. F. TORO. Kluwer Academic/-Plenum Publishers, 2001.

[21] James KEENER et James SNEYD. *Mathematical Physiology*. 1re éd. Interdisciplinary Applied Mathematics. New York, NY : Springer, 1998, p. 281. ISBN : 978-0-387-22706-1. DOI : 10.1007/b98841.

[22] Christopher A. KENNEDY et Mark H. CARPENTER. “Additive RungeKutta schemes for convectiondiffusionreaction equations”. In : *Applied Numerical Mathematics* 44.1 (2003), p. 139-181. ISSN : 0168-9274. DOI : https://doi.org/10.1016/S0168-9274(02)00138-1. URL : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168927402001381.

[23] Christopher A. KENNEDY et Mark H. CARPENTER. “Diagonally Implicit Runge-Kutta Methods for Ordinary Dierential Equations. A Review”. In : *NASA STI Program* (2025).

[24] Chung K. LAW. *Combustion Physics*. Cambridge : Cambridge University Press, 2006. DOI : 10.1017/CBO9780511754517.

[25] Randall J. LEVEQUE. *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations : Steady-State and Time-Dependent Problems*. Classics in Applied Mathematics. Philadelphia : Society for Industrial et Applied Mathematics, 2007. ISBN : 978-0-898716-29-0. DOI : 10.1137/1.9780898717839.

[26] Randall J. LEVEQUE. *Numerical Methods for Conservation Laws*. Lectures in Mathematics ETH Zürich. Basel : Birkhäuser Verlag, 1990. ISBN : 978-3-7643-2464-3. DOI : 10.1007/978-3-0348-5116-9.

[27] Iulian MUNTEANU et al. “Single-Particle Model of Li-ion Battery – Model Calibration and Validation Against Real Data in an Electric Vehicular Application”. In : *IFAC-PapersOnLine* 58.13 (2024). 12th IFAC Symposium on Control of Power & Energy Systems (CPES 2024), Rabat, Morocco, 10–12 July 2024, p. 23-30. ISSN : 2405-8963. DOI : 10.1016/j.ifacol.2024.07.454.

[28] L. PARESCHI et G. RUSSO. *Implicit-explicit Runge-Kutta schemes and applications to hyperbolic systems with relaxation*. 2010. arXiv : 1009.2757 [math.NA]. URL : https://arxiv.org/abs/1009.2757.

[29] Marie POSTEL. “Approximations multiéchelles”. Polycopié, Laboratoire Jacques-Louis Lions, Université Pierre et Marie Curie.

[30] Louis REBOUL. “Development and analysis of efficient multi-scale numerical methods, with applications to plasma discharge simulations relying on multi-fluid models”. 2024IPPAX134. Thèse de doct. 2024. URL : http://www.theses.fr/2024IPPAX134/document.

[31] Diego ROSSINELLI et al. “Multicore/Multi-GPU Accelerated Simulations of Multiphase Compressible Flows Using Wavelet Adapted Grids”. In : *SIAM Journal on Scientific Computing* 33.2 (2011), p. 512-540. DOI : 10.1137/100795930. URL : https://doi.org/10.1137/100795930.

[32] Gilbert STRANG. “On the construction and comparison of difference schemes”. In : *SIAM Journal on Numerical Analysis* 5.3 (1968), p. 506-517.

[33] Guglielmo VIVARELLI, Ning QIN et Shahrokh SHAHPAR. “A Review of Mesh Adaptation Technology Applied to Computational Fluid Dynamics”. In : *Fluids* 10.5 (mai 2025). ISSN : 2311-5521. DOI : 10.3390/fluids10050129. URL : https://www.mdpi.com/2311-5521/10/5/129.

[34] Eva-Maria WARTHA, Markus BÖSENHOFER et Michael HARASEK. “Characteristic Chemical Time Scales for Reactive Flow Modeling”. In : *Chemical Engineering & Technology* 44.7 (2021), p. 1240-1249. DOI : 10.1002/ceat.202000573.