



RAPPORT DE STAGE

Compression de maillage et problèmes d'évolution

Intégration temporelle et multirésolution adaptative pour les EDP en temps.

Étudiant : Alexandre Edeline

École : ENSTA Paris - Institut Polytechnique de Paris

Période : du 14/04/2025 au 15/09/2025

Laboratoire : CMAP - École Polytechnique

Maîtres de stages: Marc Massot et Christian Tenaud

Tuteur académique : Patrick CIARLET

Remerciements

Je tiens à remercier...

Résumé

Résumé

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

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

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

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

Table des matières

	цеп	iercienn	ents	
	Rési	ımé .		3
	List	e des fig	gures	3
	Liste	e des ta	bleaux	4
1	Pré	sentat	ion du laboratoire	5
		1.0.1	Historique et activités	5
		1.0.2	La recherche au CMAP	5
		1.0.3	L'équipe HPC@Math et l'envrionnement de travail	6
2	Des	cription	on du travail objectifs et état de l'art	7
	2.1	Préser	ntation du sujet et problématique générale	7
	2.2	Quelq	ues notions techniques	8
		2.2.1	Intégrations des EDOs	8
		2.2.2	Les équations d'advection-diffusion-réaction	10
		2.2.3	Les trois opérateurs	11
			Advection	11
			Diffusion	11
			Réaction	12
		2.2.4	Difficultés mathématiques intrinsèques	12
		2.2.5	Les stratégies de simulation	13
			L'adaptation de maillage	13
			Les techniques d'intégration	14
		2.2.6	Conclusion	15
		2.2.7	Simulation des EDPs d'évolution	15
		2.2.8	Analyse de schéma numériques	16
		2.2.9	La Multirésolution Adaptative	16
2.3 Objectifs		tifs	16	
	2.4	Métho	ode de travail et outils	16
3	Cor	ıtribut	ion	17
	3.1	Étude	de mathodes ImEx sur une équation de diffusion-réaciton	18
		3.1.1	L'équation de Nagumo	18
		3.1.2	Les méthodes ImEx	19
		3.1.3	Analyse de stabilité	19
		3.1.4	Étude de la convergence	19

		3.1.5	Conclusion				 • •	 	 	 			 19
4 Conclusion							20						
	.1	Annex	ke A : Titre d	le l'annexe			 	 		 			 23
	.2	Annex	ke B : Titre d	le l'annexe				 	 	 			 23

Table des figures

2.1	Exemple illustratif du comportement de l'erreur de l'approximation dans le ca	
	d'un schéma d'ordre 2 avec une instabilité pour $\Delta t > 10^{-1}$	9
2.2	Exemple de maillage adapté par multirésolution adaptative grâce au logiciel Samurai.	19
	murai.	10
3.1	Plage de valeurs du terme de réaction non-linéaire et de sa différentielle pour deux	
	coefficients de réactions : $k = 1$ et $k = 10$	18

Liste des tableaux

Chapitre 1

Présentation du laboratoire

1.0.1 Historique et activités

Le Centre de Mathématiques Appliquées de l'École Polytechnique ¹ (CMAP) a été créé en 1974 lors du déménagement de l'École Polytechnique vers Palaiseau. Cette création répond au besoin émergent de mathématiques appliquées face au développement des méthodes de conception et de simulation par calcul numérique dans de nombreuses applications industrielles de l'époque(nucléaire, aéronautique, recherche pétrolière, spatial, automobile). Le laboratoire fut fondé grâce à l'impulsion de trois professeurs : Laurent SCHWARTZ, Jacques-Louis LIONS et Jacques Neveu. Jean-Claude Nédélec en fut le premier directeur, et la première équipe de chercheurs associés comprenait P.A. RAVIART, P. CIARLET, R. GLOWINSKI, R. TEMAM, J.M. THOMAS et J.L. LIONS. Les premières recherches se concentraient principalement sur l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles. Le CMAP s'est diversifié au fil des décennies, intégrant notamment les probabilités dès 1976, puis le traitement d'images dans les années 1990 et les mathématiques financières à partir de 1997. Le laboratoire a formé plus de 230 docteurs depuis sa création et a donné naissance à plusieurs startups spécialisées dans les applications industrielles des mathématiques appliquées.

1.0.2 La recherche au CMAP

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

1. Analyse

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

2. Probabilités

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

 $^{1. \ \, \}text{https://cmap.ip-paris.fr}$

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

3. Décision et données

- ♦ Statistiques, apprentissage, simulation, image.
- ♦ RandOpt (optimisation aléatoire).
- \diamond Tropical (algèbre (max, +)), avec lINRIA.

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

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

L'équipe HPC@Math L'équipe HPC@Math ² travaille à l'interface des mathématiques de la physique (mécanique des fluides, thrermodynamique) et de l'informatique pour développer des méthodes numériques complètes (schéma, nalayse d'erreur, implémentation) pour la simulation des EDP. L'éuipe se centre sur les problèmes multi-échelles; les EDPs cibles qui typiquemebnt étudiées sont les équations d'advection-réaction-diffusion qui représente de manière générale le couplage entre la mécanique des fluides, la thermodynamique et la chimie (typiquement un problème de combustion). Tout cela se fait dans le contexte HPC (high performance computing). Le HPC désigne l'usage optimimal des ressources informatiques disponibles cela peut être développer une simulation efficace sur une petite machine comme des schéma hautement parallélisable dans des paradigmes de calculs hybrides ou dans des contextes hexascale ³. Ainsi l'application des méthodes développées est au coeur des réflexions de l'équipe.

Envrionnement de travail

 $^{2. \} https://initiative-hpc-maths.gitlab.labos.polytechnique.fr/site/index.html\\$

^{3.} Plateformes de calculs ayant une capacité de calcul théorique de 10¹⁶ opérations par seconde (hexaflops).

Chapitre 2

Description du travail objectifs et état de l'art

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

2.1 Présentation du sujet et problématique générale

Mon travail participe à l'élaboration de méthodes numériques pour l'approximations des équations au dérivées partielles d'évolution. En particulier, j'ai travaillé sur les équations d'advections-diffusion-réaction. Elles représentent typiquement des systèmes physiques couplant mécanique des fluides, thermodynamique et réactions chimiques ¹. Ces équations sont difficiles à simuler du fait de leur caractère multi-échelle ². Pour gérer les différentes échelles spatiales, des méthodes de compression de maillage ont été mises en oeuvre. La méthode de compression utilisée ici est la multirésolution adaptative, Les différentes échelles temporelles ³ sont usuellement gérées par force brute ou par séparation d'opérateurs. Ici nous allons égalmeent étudier des méthodes hybrides : les méthodes implcites-explicites (ImEx). Mon travaille vise principalement à comprendre comment s'agence la multirésolution adaptative avec les différentes méthodes d'intégrations temporelles.

^{1.} Typiquement des problèmes de combustion.

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

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

2.2 Quelques notions techniques

2.2.1 Intégrations des EDOs

Bien des techniques d'approximation d'EDPs d'évolution font intervenir à un moment la résolution d'une équation différentielle ordinaire (EDO ⁴), c'est à dire une équation différentielle ne faisant intervenir qu'une seule variable de difénretiation (ici le temps). Nous commeçons donc cette section par rappeler quelques notions d'analyse et de simulation des EDOs ⁵.

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

$$u' = f(u, t) \quad u : t \in \mathbb{R}^+ \mapsto u(t) \in \mathbb{R}^d$$

$$u(0) = u_0.$$
(2.1)

Schémas explicites et implcites. L'approximation des EDO se fait grâce à des schéma numériques. Ceux-ci se divisent en deux catégories, les schéma explicites et les schéma implicite ⁶. Dans ce qui suit on note u^n l'approximation de la solution d'une EDO au pas de temps n, c'est à dire que donné un pas de discrétisation temporel Δt l'objectif est d'avoir $u^n \approx u(t = n\Delta t)$.

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

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

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

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

Ainsi, une itétation d'un schéma implcite nécessite l'inversion d'un système linéaire ou non linéaire.

De fait une itéraiton implcite est souvent plus couteuse qu'une itération d'un schéma explicite ⁷. Cependant pour des raisons de stabilités les méthodes explicites peuvent nécessiter des pas de temps bien plus fin, et donc bien plus d'itérations. Le choix entre méthode explicite et implcite dépend de bien des facteurs (du problème, du niveau de précision voulu, de la difficulté d'implémentation etc...) c'est un enjeu central de la simulation numérique.

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

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

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

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

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

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

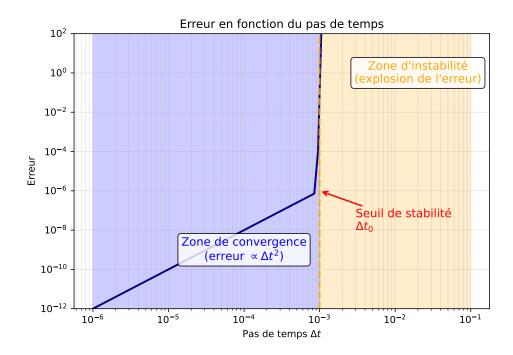


FIGURE 2.1 – Exemple illustratif du comportement de l'erreur de l'approximation dans le ca d'un schéma d'ordre 2 avec une instabilité pour $\Delta t > 10^{-1}$.

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

$$||u^{n+1}|| \le ||u^n||. \tag{2.4}$$

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

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

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

^{8.} Phénomène communément appelé "explosion" de la solution numérique.

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

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = f(u,t) \quad u(t) \in \mathbb{R}^d \,\forall t \ge 0. \tag{2.5}$$

est dit raide si la jacobienne de f, J_f possède de grandes valeurs propres négatives 9 .

En simplfiaint, si un opérateur est raide, il impose une condition de stabilité très restrictive aux méthodes explicites et force à choisir des méthodes implicites ¹⁰.

Exemple 2.2.6 (Équation de Dhalquist). Pour saisir de manière plus intuitive le concept de raideur, prenons le cas symple de l'équation de Dhalquist définissant le système suivant ¹¹:

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = -\lambda u, \quad \lambda > 0$$

$$u(t=0) = u_0$$
(2.6)

La solution analytique est : $u(t) = u_0 e^{-\lambda t}$. Ainsi passé quelque $1/\lambda$ la dynamqiue du système est au point mort. Grossièrement la dynamqiue digne d'intérêt du système se concentre entre t=0 et $t=\frac{10}{\lambda}$. Au delà, $u(t>\frac{10}{\lambda})=o(u_0)$, la dynamqiue est terminée. Ainsi le lecteur comprend aisément que si l'on souhaite simuler le comportement d'un tel système, il faut prendre des pas de temps petits devant $|\lambda|^{-1}$. Si λ est de grande amplitude cela peut devenir très contraignant... Si l'on souhaite utiliser des méthodes explicites, c'est encore pire car la raideur du sysème n'est plus un simple contrainte de précision mais de stabilité. En effet si l'on cherche à approximer le sysètme par un schéma d'Euler explicite, alors : $U^{n+1}=U^n(1-\lambda\Delta t)$ alors la contrainte de stabilité est $\Delta t \lambda < 1/2$ ce qui est contraignant si λ est grand. Si $\lambda=10^5$ alors il faut avoir $\Delta t/approx10^{-5}$ donc pour simuler le système entre t=0 et t=1 il faut cent-milles points! A l'inverse si l'on choisit un schéma d'Euler implicite : $u^{n+1}=u^n-\lambda\Delta tu^{n+1}$, alors la condition de stabilité devient : $||(1+\lambda\Delta t)^{-1}|| \leq 1$ ce qui est toujours vrai, quelque soit $-\lambda \in \mathbb{R}^-$, la raideur du système n'est pas un problème pour la méthode implicite. On comprend mieux la définition précédente Un système dynamqiue, est dit raide si les méthodes explicites ne sont pas adaptées à sa résolution.

Il existe plusieurs type de stabilité comme la A-stabilité (méthode stable indépedemment de la raideur du problème), la L-stabilité (schéma amortissant les hautes fréquences), par soucis de concision nous n'irons pas plus loins mais le lecteur intéressé se réfèrera à [5].

2.2.2 Les équations d'advection-diffusion-réaction

Plaçons nous dans le contexte physique naturel des équations d'advection, diffusion, réaction : Des particules sont placées dans un milieu fluide où elles **diffusent**, ce milieu fluide est en mouvement, cet écoulement déplace les particules, il les **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 donc ces trois phénomènes et leurs couplages respectifs.

^{9.} Ici grand est à comprendre au sens de grande aplitude devant d'autres valeurs propres.

^{10.} La réalité est plus nuancée, nous le verrons.

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

2.2.3 Les trois opérateurs

Advection

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

$$\frac{\partial u}{\partial t} = c \frac{\partial u}{\partial x} \tag{2.7}$$

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

Les opérateurs d'advections sont généralement à valeurs propres imaginaires ¹². Ainsi ils sont peu raides mais résonnants. Les méthodes explicites sont généralements les plus adaptées pour les traiter.

Diffusion

La diffusion désigne l'éparpillement de particules au sein d'un milieu fluide ¹³. Ce phénomène est la limite macroscopique du déplacement microscopiques des particules à cause de l'agitation thermique. L'opérateur de diffusion le plus classique est celui de l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u. \tag{2.8}$$

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

Cet opérateur est donc moyennement raide. Ainsi on pourrait penser qu'une méthode implcite est adéquate. Cependant ce n'est généralement pas le cas. En effet le coefficient de diffusion est généralement fonciton de la températeur, et donc l'éoprateur $D(T) \times \Delta(\cdot)$ varie généalement dans le temps et l'espace. Ainsi il faut inverser à chaque itération l'opérateur implcite, et comme c'est un opérateur non local ¹⁴, il faut inverser une matrice de taille d >> 1 dont la structure peut être très hétérogène. (car le coefficient de diffusion dépend de T et du milieu, donc in fine de \underline{x}). Aujourd'hui il est d'usage d'utiliser des méthodes explicites stabilisées qui parviennent à gérer la raideur moyenne ¹⁵ comme les méthodes ROK2 et ROK4[1].

^{12.} Par abus, s'il s'agit d'un opréteur non-linéiare on lui associera les valeurs propres de sa Jacobienne.

^{13.} En théorie de l'information cela décrit la tendance de l'entropie augmenter et l'information à se moyenner, se flouter.

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

^{15.} Nous reviendrons sur ce qualificatif au prochain paragraphe.

Réaction

Les phénomène sont en général bien adaptés aux méthodes implcites car extrêmements raides et locaux. En effet, les temps typiques d'une réaction chimique ¹⁶ sont de l'ordre de la nanoseconde. De fait, les réactions chimiques sont très diffciles à simuler par des méthodes explicites. Et les méthodes implcites ne sont pas très chères dans ce contexte, en effet comme les réactions sont locales (à chaque pas de temps les particules les particules au sein d'une cellules ne réagissent qu'avec les autres particules de la même cellule) les méthodes explicites peuvent se paralléliser. En d'autres termes il est possible de mettre en oeuvre une méthode implcite par cellule, ce qui revient à inverser un opérateur de petite dimension en chaque cellule, et il n'est pas nécessaire d'inverser un énorme système.

2.2.4 Difficultés mathématiques intrinsèques

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

Première difficulté: le couplage des opérateurs Les développements précédents auront convaincu le lecteur que résoudre chaque phénomène individuellement, n'est pas insurmontable. Cependant, les résoudre tous en même temps, c'est à dire les coupler, est en pratique très difficile. En effet, lorsque l'on couple les trois opérateurs, 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 extrêments restricitfs, à l'inverse si l'on choisit une méthode 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 trouver d'autres stratégies de pour simuler ces équations d'advetion-réaction-diffusion.

Seconde difficulté : le caractère multi-échelles des solutions Les solutions des solutions étudiées sont souvent multi-échelles, en temps et en espace. Cela signifie que certaines zones spatio-temporelles nécessitent une finesse d'approximation élevée pour pouvoir reproduire fidèlement le comportement physique, alors qu'en d'autres zones une approximation grossière est suffisante. Prenont l'exemple d'un incendie dans un local. Au début le foyer est très restreint et seul 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 serait une détonnation, 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. Ainsi si l'on maille naïvement, il est envisagrable qu'à cetrains instants, 90% du domaine soit maillé avec un pas d'espace 100 fois plus fin que nécessaire ; il y a alors une grande inefficacité ¹⁷.

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

^{17.} À cela s'ajoute le fait que ce problème augmente fortement avec la dimension.

2.2.5 Les stratégies de simulation

Pour surmonter ces difficultés, des stratégies d'adaptation de maillage et d'intégration en temps spécifiques doivent être utilisées de concert.

L'adaptation de maillage

Pour prendre avantage du caractère multi-échelle des solutions étudiées, il est courrant de procéder à de l'adaptation de maillage. C'est à dire mailler avec une finesse différentes chaque zone du domaine et être en mesure de faire évoluer ce maillage de concorde avec l'évolution du problème dans le temps. La méthode d'adaption de maillage sur lequel nous nous concentrons est la multirésolution-adaptative par transformée d'ondelettes introduite par Ami Harten dans les années 1990 [6]. Cette méthode est très étudiée par l'équipe du CMAP et a donnée lieu au développement du logiciel Samurai ¹⁸.



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

La multi-résolution adaptative La multirésolution adaptative se base sur une compression de la solution par transformée d'ondelette ¹⁹. Les détails méthématiques seront données plus tard et s'appuyerons notemment sur [10]. Pour l'heure le lecteur doit simplement comprendre que la compression se fait de la manière suivante : une transformée en ondelette permet de représenter la solution sur différentes échelle d'espace ²⁰. Cela permet de quantifier l'information contenue à en chaque échelle d'espace. Enfin la compression consiste à ignorer les échelles ne comprenant pas assez d'information par rapport à un seuil ε fixé par l'utilisateur.

^{18.} https://github.com/hpc-maths/samurai

^{19.} C'est même procédé qui est à l'oeurvre dans la compression d'image jpg.

^{20.} Par exemple les échelles $\Delta x, \Delta x/2, \Delta x/4, \dots, \Delta x/2^n$

Autres méthodes Il existe d'autre stratégies pour raffiner le maillage autour des zones sensibles que la transformée en ondelette. La plus classique est une adaptation basée sur les gradients. Si les gradients sont élevés c'est que la solution est complexe, et donc un maillage fin est nécessaire pour la représenter fidèlement. Cette approche est simple à mettre en oeuvre et part de la même heuristique que la multiresoltion adaptative, cependant elle est moins systématique (pas de quantification de l'information perdue) et plus difficile à analyser. Elle est cependant utilisée dans des logiciels industriels comme Ansys ²¹.

Les techniques d'intégration

Comme expliqué précédemment, la simulation de chaque opérateur est faisable individuellement mais très difficile conjointement. Les stratégies pour intégrer les trois opérateurs en même temps, reposent donc sur le fait de les intégrer... séparément.

La séparation d'opérateurs La séparation d'opérateurs (en Anglais : splitting) consiste à intégrer successivement chaque opérateur. L'intégration d'un opérateur A, dans une équation comme :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Au. (2.9)$$

s'écrit avec la notion d'exponentielle de matrice ²² :

$$u(t) = e^{tA}u_0. (2.10)$$

Ainsi si l'on a deux opérateurs :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = (A+B)u. \tag{2.11}$$

$$u(t) = e^{t(A+B)}u_0 \approx e^{t(B)}e^{t(A)}u_0.$$
 (2.12)

Ce n'est qu'une approximation car $e^{t(A+B)} = e^{t(B)}e^{t(A)}$ n'est vrai que si les opérateurs A et B commutent. Cependant c'est vrai à l'ordre O(t). Cela correspond au splitting de Lie ²³ Cette méthode permet de traiter les opérateurs l'un après l'autre, indépendamment les uns des autres, avec une méthode numérique qui lui est adaptée. Cela rend la méthode très simple de mise en oeuvre. En revanche, il est difficile de monter au-delà de l'ordre deux en temps.

Une étude extensive de l'usage du splitting, pour les équations d'advection-diffusion-réaction couplées à la multiresoltion adaptative a été réalisée dans la thèse de Max Duarte, préparée à Centrale Paris sous la direction de Marc Massot [3].

 $^{21.\} https://www.ansys.com/fr-fr/blog/how-to-accelerate-ansys-fluent-simulations-with-adaptive-meshing$

^{22.} Ou de manière plus rigoureuse avec la notion de semi-groupe.

^{23.} Un autre schéma : $e^{t/2(A+B)} = e^{t(B)}e^{t(A)}e^{t/2(B)}$, le splitting de Strang existe et est précis à l'ordre 2 en temps.

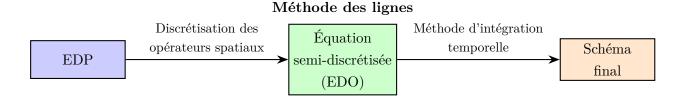
Les méthodes ImEx Nous détaillerons ces méthode en XXX. Pour l'heure le lecteur doit savoir que es méthodes ImEx ²⁴ [9] [8] sont très proches de la séparation d'opérateurs dans leurs implémentation, seulement elles apportent plus de cohérence mathématiques et facilite la montée en ordre. De manière général, une méthode Runge et Kutta et une technique d'intégration en temps qui se décompose en plusieurs étapes (aussi appelés étages). Cette succession d'étages engendre différentes approximations et une combinaison adéquate des ces approximations assure la montée en ordre de la méthode. Dans les méthodes RK-ImEx à chaque étage, l'approximation obtenu en ajoutant une contribution explicite d'un des opérateur (celui pour lequel une méthode explicite est adaptée, par exemple d'advection) et une contribution implicite de l'autre opérateur (celui pour lequel un méthode implicite est adatpée, par exemple la diffusion). Ainsi, un traitement différent est appliqué à chaque opérateur tout en conservant une méthode avec une cohésion globale ²⁵.

2.2.6 Conclusion

Cette introduction a mis en évidence la complexité intrinsèque des équations d'advection-diffusion-réaction, qui réside dans le couplage de trois phénomènes physiques aux propriétés mathématiques antagonistes. L'advection, peu raide, la diffusion, moyennement raide et non-locale, et la réaction, extrêmement raide mais locale, ne peuvent être traitées efficacement par une approche monolithique classique. Les deux défis principaux identifiés : le couplage des opérateurs et le caractère multi-échelles des solutions, nécessitent des stratégies numériques specifiques. D'une part, l'adaptation de maillage, notamment par multi-résolution adaptative, permet de concentrer les ressources de calcul là où l'information physique est la plus riche. D'autre part, des techniques d'intégration découplées, éparation d'opérateurs ou des méthodes ImEx, exploitant les propriétés spécifiques de chaque phénomène et éviter l'écueil du solver monolithique.

2.2.7 Simulation des EDPs d'évolution

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



Définition 2.2.8 (Méthodes d'intégration espace temps).

^{24.} Les méthdes évoquées ici sont les méthodes ImEx Runge et Kutta (RK-ImEx). Il existe également des méthodes ImEx couplées espace-temps [11].

^{25.} Cependant dans la méthode de splitting, nous avions le luxe de choisir chaque méthode de résolution indépendamment des autres, ici ce n'est plus le cas il fait respecter des relations d'ordre, plus de cohésion mais plus de contrainte.

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

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

$$U_j = \frac{1}{|C_j|} \int_{C_j} u(x) d\Omega. \tag{2.13}$$

2.2.8 Analyse de schéma numériques

Staiblité... Convergence...

Définition 2.2.10 (Procédure de Cauchy-Kovaleskaya).

Définition 2.2.11 (Équation modifiée).

2.2.9 La Multirésolution Adaptative

•••

2.3 Objectifs

Mon premier objectif a été de comparer les performances des méthodes ImEx avec une méthode de séparation d'opérateur car sur le papier ces deux méthodes sont très proches. J'ai mis en lumière leurs différents domaines de stabilité et réalisé des tests de convergence. Cette étude a été réalisée sur une équation simple mais très représentative des équations de réaction-diffusion, l'équation de Nagumo.

Mon second objectif était d'explorer l'impact théorique de la multi-résolution adaptative (MRA) sur un schéma numérique classique. J'ai mené une analyse d'erreur sur une équation de diffusion résolue par une méthode des lignes d'ordre deux, et j'ai découvert que la multirésolution-adaptative peut dégrader l'ordre de convergence d'une méthode. J'ai par la suite tenté (sans succès) de mettre en évidence ce résultat expérimentalement grâce au code Samurai. J'ai chosi de travailler sur la diffusion pour compléter le travail réalisé par l'équipe en [2] qui se centrait sur l'advection.

2.4 Méthode de travail et outils

Chapitre 3

Contribution

Cet partie vise à présenter mes travaux. Rappelons qu'il se sont concentrés sur la résolutions des EDPs d'advection-diffusion-réaction grâce. aux méthodes modernes de compression de maillage (multirésolution adaptative) et de découplage des opérateurs (ImEx et splitting).

Dans un premier temps, je présente l'analyse d'une méthode ImEx appliquée à l'équation de Nagumo (une équation de diffusion-réaction). J'étudie la stabilité des méthodes de manière générale puis dans le cas spécifique de cette équation. Par la suite, j'ai mené une comparaison expérimentale avec une méthode concurrente : la séparation d'opérateur.

Dans un second temps je présente une étude de l'impact de la multirésolution adaptative sur la convergence d'une méthode des lignes sur un problème de diffusion. Cette étude comprend un pan théorique (obtention de l'équation équivalente du schéma avec multirésolution adaptative) et un pan expérimental (étude de convergence grâce au logiciel Samurai).

3.1 Étude de mathodes ImEx sur une équation de diffusionréaciton

Pour cette première étude nous présentons d'abord l'équation de Nagumo et expliquons en quoi elle est une excellente équation test pour éprouver les méthodes de résolution des équations d'advection-diffusion-réaction. Dans un second temps nous présentons les méthodes ImEx utilisées. Par la suite, nous évaluons la stabilité de ces méthodes ImEx dans le contexte de l'équation de Nagumo. Cela permet de valider la pertience *a priori* de ces ImEx sur l'équation, et nous mène naturellement à une étude de convergence expérimentale ou les méthodes ImEx présentées sont confrontées à une méthode de séparation d'épérateur classique (splitting de Strang).

3.1.1 L'équation de Nagumo

L'équation de Nagumo (ou FitzHugh-Nagumo) est issue de modèles de transmission de l'information nerveuse [4]. Nous utilisons la forme spatiale de l'équation [7] avec un terme de réaction cubique pour ajouter de la non-linéarité :

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

Solutions Analytiques Cette équation admet des solutions propagatives sous la forme :

Analyse Qualitative Le terme de diffusion est classique, il est non-local et une fois discrétisé à l'ordre deux ses valeurs propres associées sont $\{...\}$, ainsi la raideur croit linéairement avec le coefficient de diffusion D et quadratiquement avec la finesse du maillage Δx . En partant d'une solution initiale ..., la solution reste entre 0 et 1. Ainsi le terme de réaction est local, et ses valeurs propres sont comprises entre ... En effet :

$$R(u) = ku(1 - u^2), (3.2)$$

$$R'(u) = k(1 - 3u^2). (3.3)$$

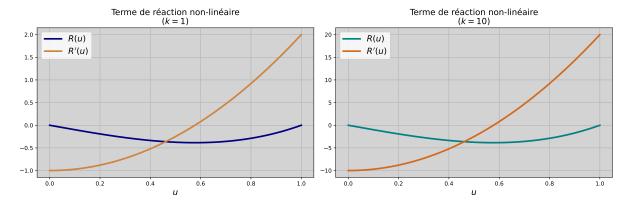


FIGURE 3.1 – Plage de valeurs du terme de réaction non-linéaire et de sa différentielle pour deux coefficients de réactions : k = 1 et k = 10.

- 3.1.2 Les méthodes ImEx
- 3.1.3 Analyse de stabilité
- 3.1.4 Étude de la convergence
- 3.1.5 Conclusion

Chapitre 4

Conclusion

Bibliographie

- [1] 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.
- [2] Belloti et al. "Modified equation and error analyses on adaptative meshes for the resolution of evolutionary PDEs with Finite Volume schemes". In: (2025).
- [3] 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.
- [4] 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.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] James Keener et James Sneyd. *Mathematical Physiology*. 1^{re} éd. Interdisciplinary Applied Mathematics. New York, NY: Springer, 1998, p. 281. ISBN: 978-0-387-22706-1. DOI: 10.1007/b98841.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] Marie Postel. "Approximations multiéchelles". Polycopié, Laboratoire Jacques-Louis Lions, Université Pierre et Marie Curie.

BIBLIOGRAPHIE 22

[11] Louis Reboul. "Development and analysis of efficient multi-scale numerical methods, with applications to plasma discharge simulations relying on multi-fluid models". 2024IP-PAX134. Thèse de doct. 2024. URL: http://www.theses.fr/2024IPPAX134/document.

BIBLIOGRAPHIE 23

.1 Annexe A: Titre de l'annexe

Contenu de la première annexe.

.2 Annexe B: Titre de l'annexe

Contenu de la deuxième annexe.