# Stratégies modernes pour l'intégration des équations d'advection-réaction-diffusion

(ImEx & MultiRésolution Adaptative)

#### Alexandre EDELINE

ENSTA Paris Laboratoire : CMAP

Tuteurs laboratoire : Marc MASSOT, Christian TENAUD

Tuteur ENSTA : Patrick CIARLET

Avril - Octobre 2025





## Plan

3<sup>ème</sup> contribution

Compléments

Les équations d'advection-diffusion-réaction (ADR) Problématique  $1^{\grave{e}re} \ contribution$   $2^{\grave{e}me} \ contribution$ 

2/42

# Plan

## Les équations d'advection-diffusion-réaction (ADR)

Problématique

1ère contribution

2ème contribution

3<sup>ème</sup> contribution

Compléments

# Equations d'ADR Applications Physiques



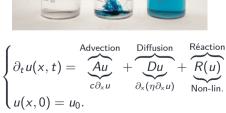




# Equations d'ADR Applications Physiques











### Le couplage des opérateurs

Les trois opérateurs ont des propriétés très différentes :

- Advection : Peu raide, raisonnant (spectre autour de  $i\mathbb{R}$ ).
- ightharpoonup Diffusion : Moyennement raide, spectre autour de  $\mathbb{R}^-$ .
- ▶ Réaction : Très raide, hautement non-linéaire, local.
- ⇒ les approches monolithiques peinent



### Le couplage des opérateurs

Les trois opérateurs ont des propriétés très différentes :

- Advection : Peu raide, raisonnant (spectre autour de  $i\mathbb{R}$ ).
- ightharpoonup Diffusion : Moyennement raide, spectre autour de  $\mathbb{R}^-$ .
- ▶ Réaction : Très raide, hautement non-linéaire, local.
- ⇒ les approches monolithiques peinent

#### Les solutions multi-échelles

- plusieurs échelles de temps
- plusieurs échelles d'espace

# Équations d'ADR Stratégies de simulation

## Stratégie $n^{\circ}1$ : Différencier le traitement sur chaque opérateurs

Ne pas faire un schéma monolithique.

- Séparation d'opérateurs (splitting)
- ► Méthodes ImEx (Additive Runge et Kutta)



### Stratégie $n^{\circ}1$ : Différencier le traitement sur chaque opérateurs

Ne pas faire un schéma monolithique.

- Séparation d'opérateurs (splitting)
- Méthodes ImEx (Additive Runge et Kutta)

### Stratégie n°2 : Adaptation en espace

La multirésolution adaptative :

- Des grilles de résolution multiples,
- Deux opérateurs de projection/reconstruction,
- Représentation de la solution comme une suite de détails,
- Une stratégie d'adaptation.

Niveau	de	résolution $j = 1$
Niveau	de	${\it r\'esolution}\ j=2$
Niveau	de	résolution $j = 3$

$u_0^1$				$u_1^1$			
$d_0^2$ $d_1^2$		$d_2^2$		$d_3^2$			
$d_0^3$	$d_1^3$	$d_2^3$	$d_3^3$	$d_4^3$	$d_5^3$	$d_6^3$	$d_7^3$

# Plan

Les équations d'advection-diffusion-réaction (ADR

## Problématique

1ère contribution

2ème contribution

3<sup>ème</sup> contribution

Complément

# Problématique

### Contribution $n^{\circ}1$ - Comparaison ImEx-splitting :

- ► Équation de réaction-diffusion (Nagumo spatiale 1D).
- Étude de stabilité.
- Convergence avec et sans adaptation spatiale.

### **Contribution** $n^{\circ}1$ - **Comparaison ImEx-splitting** :

- ▶ Équation de réaction-diffusion (Nagumo spatiale 1D).
- Étude de stabilité.
- Convergence avec et sans adaptation spatiale.

#### Contribution $n^{\circ}2$ - Calcul des équations équivalentes de schémas adaptés :

- Diffusion pure, linéaire, 1D.
- ▶ Méthode des lignes : *volume finis* + *Runge Kutta explicite*.
- Différents schémas de multirésolution.

### **Contribution** $n^{\circ}1$ - **Comparaison ImEx-splitting** :

- ▶ Équation de réaction-diffusion (Nagumo spatiale 1D).
- Étude de stabilité.
- Convergence avec et sans adaptation spatiale.

#### Contribution $n^{\circ}2$ - Calcul des équations équivalentes de schémas adaptés :

- Diffusion pure, linéaire, 1D.
- ▶ Méthode des lignes : *volume finis* + *Runge Kutta explicite*.
- Différents schémas de multirésolution.

### Contribution $n^{\circ}3$ - Expérience numérique :

- Comparaison de la convergence selon le schéma de multirésolution.
- Extensions : méthodes stabilisées et étude de stabilité.
- Mise en relation avec les équations équivalentes.

### **Contribution** $n^{\circ}1$ - **Comparaison ImEx-splitting** :

- ▶ Équation de réaction-diffusion (*Nagumo spatiale 1D*).
- Étude de stabilité.
- Convergence avec et sans adaptation spatiale.

#### Contribution $n^{\circ}2$ - Calcul des équations équivalentes de schémas adaptés :

- Diffusion pure, linéaire, 1D.
- ▶ Méthode des lignes : *volume finis* + *Runge Kutta explicite*.
- Différents schémas de multirésolution.

### Contribution $n^{\circ}3$ - Expérience numérique :

- Comparaison de la convergence selon le schéma de multirésolution.
- Extensions : méthodes stabilisées et étude de stabilité.
- Mise en relation avec les équations équivalentes.

## Complément :

▶ Mise à lépreuve d'une conjecture issue de la *contribution n°*3.

# Plan

Les équations d'advection-diffusion-réaction (ADR)

Problématique

#### 1ère contribution

2ème contribution

3<sup>ème</sup> contribution

Complément

# Comparaison ImEx - Splitting

#### Objectifs Principaux:

- Comprendre les méthodes *ImEx* : méthodes, intérêt, mise en oeuvre, stabilité.
- Comparaison empirique de l'impact de la multirésolution adaptative sur ces méthodes et sur le splitting.

# $\begin{array}{c|c} \textbf{Contribution 1} & \textbf{Comparaison ImEx - Splitting} \\ \textbf{L'équation de Nagumo} \end{array}$

## L'équation de Nagumo 1D :

Il s'agit d'une équation de diffusion-réaction faisant apparaître des dynamiques de fronts :

$$\partial_t u = \underbrace{D\partial_{xx} u}_{\text{diffusion}} - \underbrace{ku(1-u^2)}_{\text{réaction non. lin.}} \quad k, D \in \mathbb{R}_+^*. \tag{2}$$

#### L'équation de Nagumo 1D :

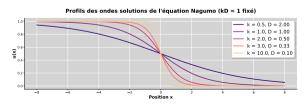
Il s'agit d'une équation de diffusion-réaction faisant apparaître des dynamiques de fronts :

$$\partial_t u = \underbrace{D\partial_{xx} u}_{\text{diffusion}} - \underbrace{ku(1 - u^2)}_{\text{réaction non, lin.}} \quad k, D \in \mathbb{R}_+^*. \tag{2}$$

#### Les solutions :

En domaine infini, cette équation admet des solutions sous forme d'ondes progressives :

$$u(x - ct) = \frac{e^{\sqrt{\frac{k}{2D}}((x - x_0) - ct)}}{1 + e^{-\sqrt{\frac{k}{2D}}((x - x_0) - ct)}}, \quad c = \sqrt{\frac{kD}{2}}.$$
 (3)



#### Contribution 1 | Comparaison ImEx - Splitting Présentation des méthodes

#### Méthode ImEx232 :

Schéma à trois étages explicites et deux étages implicites, avec  $\gamma = \frac{2-\sqrt{2}}{2}$  et  $\delta = -\frac{2\sqrt{2}}{2}$ :

$$\text{Explicite} : \underbrace{ \begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma & \gamma & 0 & 0 \\ \hline 1 & \delta & 1-\delta & 0 \\ \hline & 0 & 1-\gamma & \gamma \end{array} }_{} \text{Implicite} : \underbrace{ \begin{array}{c|cccc} \gamma & \gamma & 0 \\ \hline 1 & 1-\gamma & \gamma \\ \hline & 1-\gamma & \gamma \end{array} }_{}$$

#### Contribution 1 | Comparaison ImEx - Splitting Présentation des méthodes

#### Méthode ImEx232 :

Schéma à trois étages explicites et deux étages implicites, avec  $\gamma = \frac{2-\sqrt{2}}{2}$  et  $\delta = -\frac{2\sqrt{2}}{2}$ :

Explicite: 
$$\begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma & \gamma & 0 & 0 \\ \hline 1 & \delta & 1-\delta & 0 \\ \hline & 0 & 1-\gamma & \gamma \end{array} \quad \text{Implicite}: \begin{array}{c|cccc} \gamma & \gamma & 0 \\ \hline 1 & 1-\gamma & \gamma \\ \hline & 1-\gamma & \gamma \end{array}$$

Implicite : 
$$egin{array}{c|c} \gamma & \gamma & 0 \\ \hline 1 & 1-\gamma & \gamma \\ \hline & 1-\gamma & \gamma \end{array}$$

#### Méthode ImEx222:

Schéma à deux étages explicites et deux étages implicites, avec  $\gamma = \frac{2-\sqrt{2}}{2}$  et  $\delta = 1 - \frac{1}{2\alpha}$ :

Explicite: 
$$\begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma & \gamma & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1-\delta & \delta & 0 \\ \hline & 1-\delta & \delta & 0 \\ \end{array}$$
 Implicite: 
$$\begin{array}{c|ccccc} \gamma & \gamma & 0 \\ \hline 1 & 1-\gamma & \gamma \\ \hline & 1-\gamma & \gamma \\ \end{array}$$

$$\mathsf{Implicite} : \begin{array}{c|cccc} \gamma & \gamma & 0 \\ \hline 1 & 1 - \gamma & \gamma \\ \hline & 1 - \gamma & \gamma \end{array}$$

#### Contribution 1 | Comparaison ImEx - Splitting Présentation des méthodes

#### Méthode ImEx232 :

Schéma à trois étages explicites et deux étages implicites, avec  $\gamma = \frac{2-\sqrt{2}}{2}$  et  $\delta = -\frac{2\sqrt{2}}{3}$ :

#### Méthode ImEx222:

Schéma à deux étages explicites et deux étages implicites, avec  $\gamma = \frac{2-\sqrt{2}}{2}$  et  $\delta = 1 - \frac{1}{2\gamma}$ :

Explicite: 
$$\begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma & \gamma & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1-\delta & \delta & 0 \\ \hline & 1-\delta & \delta & 0 \\ \end{array}$$
 Implicite: 
$$\begin{array}{c|ccccc} \gamma & \gamma & 0 \\ \hline 1 & 1-\gamma & \gamma \\ \hline & 1-\gamma & \gamma \\ \end{array}$$

### Méthode Splitting:

Splitting de Strang | Réaction : ERK2 (Heun) | Diffusion : SDIRK2 (celle des méthode ImEx).  $_{13/42}$ 

#### Méthode ImEx232:

Schéma à trois étages explicites et deux étages implicites, avec  $\gamma=\frac{2-\sqrt{2}}{2}$  et  $\delta=-\frac{2\sqrt{2}}{3}$  :

Explicite: 
$$\frac{1}{\gamma} \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 1 & \delta & 1 - \delta & 0 \\ \hline 0 & 1 - \gamma & \gamma \end{vmatrix}$$
 Implicite: 
$$\frac{\gamma}{1} \begin{vmatrix} \gamma & \gamma & 0 \\ 1 & 1 - \gamma & \gamma \end{vmatrix}$$
 equation cible générique:  $\partial_t u = f_E(u) + f_I(u) \mid \text{objectif}: u^n \rightarrow u^{n+1}.$  (4)

#### Méthode ImEx232:

Schéma à trois étages explicites et deux étages implicites, avec  $\gamma=\frac{2-\sqrt{2}}{2}$  et  $\delta=-\frac{2\sqrt{2}}{3}$  :

# 

#### Méthode ImEx232:

Schéma à trois étages explicites et deux étages implicites, avec  $\gamma=\frac{2-\sqrt{2}}{2}$  et  $\delta=-\frac{2\sqrt{2}}{3}$  :

#### Calcul:

\_\_\_\_\_Initialisation \_\_\_\_\_

$$u_0 = u^n$$
,

\_\_ 1<sup>er</sup> étage \_\_\_\_\_

$$k_1^E = f_E(u_0), k_1^I = f_I(u_1).$$

#### Méthode ImEx232:

Schéma à trois étages explicites et deux étages implicites, avec  $\gamma=\frac{2-\sqrt{2}}{2}$  et  $\delta=-\frac{2\sqrt{2}}{3}$  :

#### Calcul:

\_\_\_\_\_ Initialisation \_\_\_\_\_

$$u_0 = u^n$$

1<sup>er</sup> étage

$$k_1^E = f_E(u_0), \, k_1^I = f_I(u_1).$$

$$u_1 = u_0 + \gamma \Delta t k_1^E + \gamma \Delta t \underbrace{f_I(u_1)}_{f_I(u_1)}$$

#### Méthode ImEx232:

Schéma à trois étages explicites et deux étages implicites, avec  $\gamma=\frac{2-\sqrt{2}}{2}$  et  $\delta=-\frac{2\sqrt{2}}{3}$  :

#### Calcul:

 $u_0 = u^n,$  Initialisation

$$k_1^E = f_E(u_0), k_1^I = f_I(u_1).$$

$$u_1 = u_0 + \gamma \Delta t k_1^{\mathcal{E}} + \gamma \Delta t \underbrace{f_I(u_1)}^{=k_1^I},$$
  

$$\Rightarrow u_1 = \left[ ld - \gamma \Delta t f_I(\cdot) \right]^{-1} (u_0 + \gamma \Delta t k_1^{\mathcal{E}}),$$

#### Méthode ImEx232:

Schéma à trois étages explicites et deux étages implicites, avec  $\gamma=rac{2-\sqrt{2}}{2}$  et  $\delta=-rac{2\sqrt{2}}{3}$  :

Initialisation 
$$u_0 = u^n,$$

$$1^{er} \text{ étage}$$

$$k_1^E = f_E(u_0), k_1^I = f_I(u_1).$$

$$u_1 = u_0 + \gamma \Delta t k_1^E + \gamma \Delta t \overbrace{f_I(u_1)}^{er},$$

$$\Rightarrow u_1 = \left[ td - \gamma \Delta t f_I(\cdot) \right]^{-1} (u_0 + \gamma \Delta t k_1^E),$$

$$\Rightarrow k_1^I = f_I(u_1).$$

#### Méthode ImEx232:

Schéma à trois étages explicites et deux étages implicites, avec  $\gamma=\frac{2-\sqrt{2}}{2}$  et  $\delta=-\frac{2\sqrt{2}}{3}$  :

Initialisation 
$$2^{eme} \text{ étage}$$

$$u_0 = u^n,$$

$$k_2^E = f_E(u_1), k_2' = f_I(u_2).$$

$$k_1^E = f_E(u_0), k_1' = f_I(u_1).$$

$$u_1 = u_0 + \gamma \Delta t k_1^E + \gamma \Delta t \underbrace{f_I(u_1)}_{f_I(u_1)},$$

$$\Rightarrow u_1 = \left[ ld - \gamma \Delta t f_I(\cdot) \right]^{-1} (u_0 + \gamma \Delta t k_1^E),$$

$$\Rightarrow k_1' = f_I(u_1).$$

#### Méthode ImEx232:

Schéma à trois étages explicites et deux étages implicites, avec  $\gamma=rac{2-\sqrt{2}}{2}$  et  $\delta=-rac{2\sqrt{2}}{3}$  :

$$\begin{aligned} u_0 &= u^n, \\ \frac{1^{er} \text{ étage}}{k_1^E &= f_E(u_0), k_1^I &= f_I(u_1). \\ u_1 &= u_0 + \gamma \Delta t k_1^E + \gamma \Delta t \overbrace{f_I(u_1)}^{er}, \\ &\Longrightarrow u_1 &= \left[ Id - \gamma \Delta t f_I(\cdot) \right]^{-1} (u_0 + \gamma \Delta t k_1^E), \\ &\Longrightarrow k_1^I &= f_I(u_1). \end{aligned}$$

$$\frac{2^{eme} \text{ étage}}{k_2^E = f_E(u_1), k_2^I = f_I(u_2).}$$

$$v_2 = u_0 + \delta \Delta t k_1^E + (1 - \delta) \Delta t k_2^E + (1 - \gamma) \Delta t k_1^I + \underbrace{\gamma \Delta t f_I(u_2)}_{=k_2^I},$$

$$\implies u_1 = \left[ Id - \gamma \Delta t f_I(\cdot) \right]^{-1} \left( u_0 + \delta \Delta t k_1^E + (1 - \delta) \Delta t k_2^E + (1 - \gamma) \Delta t k_1^I \right),$$

$$\implies k_2^I = f_I(u_2).$$

#### Méthode ImEx232:

Schéma à trois étages explicites et deux étages implicites, avec  $\gamma=\frac{2-\sqrt{2}}{2}$  et  $\delta=-\frac{2\sqrt{2}}{3}$  :

$$\begin{aligned} u_0 &= u^n, \\ k_1^E &= f_E(u_0), k_1^I &= f_I(u_1). \\ u_1 &= u_0 + \gamma \Delta t k_1^E + \gamma \Delta t \underbrace{f_I(u_1)}_{f_I(u_1)}, \\ &\Rightarrow u_1 &= \left[ ld - \gamma \Delta t f_I(\cdot) \right]^{-1} (u_0 + \gamma \Delta t k_1^E), \\ &\Rightarrow k_1^I &= f_I(u_1). \end{aligned}$$

$$\frac{2^{eme}}{k_2^E} = f_E(u_1), k_2^I = f_I(u_2).$$

$$u_2 = u_0 + \delta \Delta t k_1^E + (1 - \delta) \Delta t k_2^E + (1 - \gamma) \Delta t k_1^I + \underbrace{\gamma \Delta t f_I(u_2)}_{=k_2^I},$$

$$\implies u_1 = \begin{bmatrix} Id - \gamma \Delta t f_I(\cdot) \end{bmatrix}^{-1} \left( u_0 + \delta \Delta t k_1^E + (1 - \delta) \Delta t k_2^E + (1 - \gamma) \Delta t k_1^I \right),$$

$$\implies k_2^I = f_I(u_2).$$

$$\frac{3^{eme}}{k_2^E} \stackrel{\text{étage}}{=} k_2^E = f_E(u_2).$$

#### Méthode ImEx232:

Schéma à trois étages explicites et deux étages implicites, avec  $\gamma=\frac{2-\sqrt{2}}{2}$  et  $\delta=-\frac{2\sqrt{2}}{3}$  :

Initialisation 
$$u_0 = u^n,$$

$$1^{er} \text{ étage}$$

$$k_1^E = f_E(u_0), k_1^I = f_I(u_1).$$

$$u_1 = u_0 + \gamma \Delta t k_1^E + \gamma \Delta t \underbrace{f_I(u_1)}_{f_I(u_1)},$$

$$\implies u_1 = \begin{bmatrix} Id - \gamma \Delta t f_I(\cdot) \end{bmatrix}^{-1} (u_0 + \gamma \Delta t k_1^E),$$

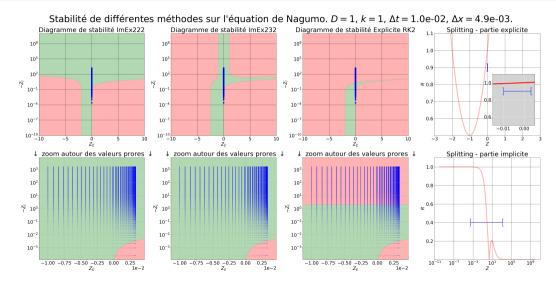
$$\implies k_1^I = f_I(u_1).$$

$$\begin{aligned} & 2^{\textit{eme}} \text{ \'etage} \\ & k_2^{\textit{E}} = f_{\textit{E}}(u_1), \, k_2^{\textit{I}} = f_{\textit{I}}(u_2). \end{aligned}$$

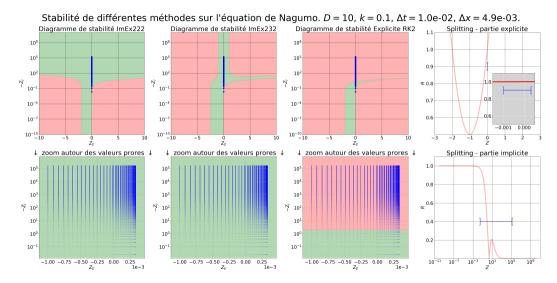
$$\begin{aligned} & v_2 = u_0 + \delta \Delta t k_1^{\textit{E}} + (1 - \delta) \Delta t k_2^{\textit{E}} + (1 - \gamma) \Delta t k_1^{\textit{I}} + \frac{2 \delta_2^{\textit{I}}}{\gamma \Delta t f_{\textit{I}}(u_2)}, \\ & \Longrightarrow u_1 = \left[ ld - \gamma \Delta t f_{\textit{I}}(\cdot) \right]^{-1} \left( u_0 + \delta \Delta t k_1^{\textit{E}} + (1 - \delta) \Delta t k_2^{\textit{E}} + (1 - \gamma) \Delta t k_1^{\textit{I}} \right), \\ & \Longrightarrow k_2^{\textit{I}} = f_{\textit{I}}(u_2). \\ & \underbrace{k_3^{\textit{E}} = f_{\textit{E}}(u_2).} \end{aligned}$$

$$\underbrace{Recombinaison \ des \ etages}_{u^{\textit{P}+1} = u^{\textit{P}}} + \Delta t \left( (1 - \gamma) k_2^{\textit{E}} + \gamma k_3^{\textit{E}} + (1 - \gamma) k_1^{\textit{I}} + \gamma k_2^{\textit{I}} \right). \end{aligned}$$

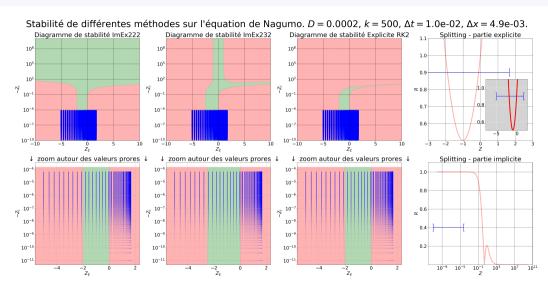
# $\begin{array}{c|c} \textbf{Contribution} & 1 & \textbf{Comparaison ImEx - Splitting} \\ \textbf{Analyse de stabilit\'e} \end{array}$



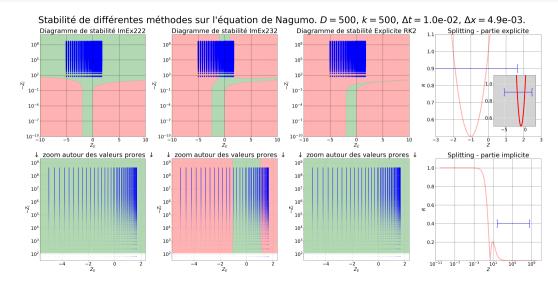
# $\underset{\mathsf{Analyse \ de \ stabilit\'e}}{\mathsf{Contribution}} \ 1 \ | \ \mathsf{Comparaison \ ImEx} \ - \ \mathsf{Splitting}$



# $\begin{array}{c|c} \textbf{Contribution} & 1 & \textbf{Comparaison ImEx - Splitting} \\ \textbf{Analyse de stabilit\'e} \end{array}$



# $\underset{\mathsf{Analyse\ de\ stabilit\acute{e}}}{\mathsf{Contribution}}\ 1\ \big|\ \mathsf{Comparaison\ ImEx\ -\ Splitting}$

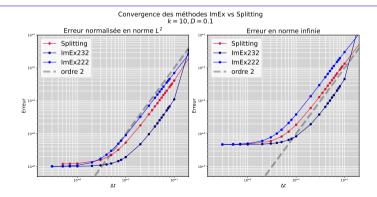


## $\begin{array}{c|c} \textbf{Contribution 1} & \textbf{Comparaison ImEx - Splitting} \\ \textbf{Convergence (\emptyset MRA)} \end{array}$

#### Contexte:

- k = 10, D = 0.1,
- $\Delta x = 2.4 \, 10^{-3}$ .
- conditions de Neumann au bord (quasi infini).

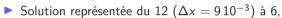




## $\begin{array}{c|c} \textbf{Contribution 1} \\ \textbf{Convergence (avec MRA)} \end{array} | \begin{array}{c|c} \textbf{Comparaison ImEx - Splitting} \\ \end{array}$

#### Contexte:

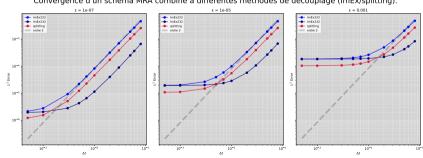
k = 10. D = 0.1.



conditions de Neumann au bord (quasi infini).







## Contribution 1 | Comparaison ImEx - Splitting

### Apprentissage personnel:

- ▶ Étude de la théorie des ImEx [3, 1, 4] et des schémas pour lois de conservation [5].
- ▶ Familiarisation avec l'étude de stabilité linéaire pour les ImEx  $((z_E, z_I) \in \mathbb{C}^2)$ .
- ► Code par volume fini en C++ grâce à la libraire Samurai.

### Résultat empirique

Le schéma de *splitting* est plus robuste à la *multirésolution adaptative* que les ImEx. Cela n'est pas forcément généralisale, c'est un cas particulier.

### Plan

Les équations d'advection-diffusion-réaction (ADR)

Problématique

1ère contribution

2ème contribution

3<sup>ème</sup> contributior

Compléments

**Équation cible :** 
$$\partial_t u = \partial_x (D\partial_x u), \quad D > 0.$$
 (5)

### Schéma numérique

Méthode des lignes : Volumes finis ordre deux + Runge Kutta explicite d'ordre deux.

o **Semi-discrétisation spatiale** : Sur un maillage 1D constitué de cellules  $C_i$  de tailles  $\Delta x$  :

$$\forall j, \quad \int_{C_j} u(x, t) dx = \partial_x \int_{C_j} \partial_x u(x, t) dx. \tag{6}$$

$$\forall j, \quad U_j(t) = \frac{D}{\Delta x} \left[ \partial_x u(x, t) \right]_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tag{7}$$

$$\forall j, \quad U_j(t) = \underbrace{\frac{D}{\Delta x} \left[ \frac{U_{j+1}(t) - U_j(t)}{\Delta x} - \frac{U_j(t) - U_{j-1}(t)}{\Delta x} \right]}_{} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$
(8)

 $\mathsf{not\acute{e}}:\mathcal{D}$ 

 $\circ$  Intégration en temps : Pour un pas de temps  $\Delta t$  :

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \mathcal{D} u^n + \frac{\Delta t^2}{2} \mathcal{D}^2 u^n \to \text{stabilit\'e} : \lambda = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2}. \tag{9}$$

### Flux numériques :

$$\Phi_k^+ = \frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x}$$

$$\Phi_k^- = \frac{u_k - u_{k-1}}{\Delta x}$$

### Flux numériques :

$$\Phi_k^+ = \frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x}$$

$$\Phi_k^- = \frac{u_k - u_{k-1}}{\Delta x}$$

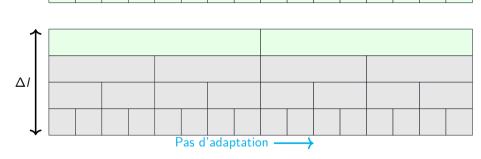


Pas d'adaptation ————

### Flux numériques :

$$\Phi_k^+ = \frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x}$$

$$\Phi_k^- = \frac{u_k - u_{k-1}}{\Delta x}$$

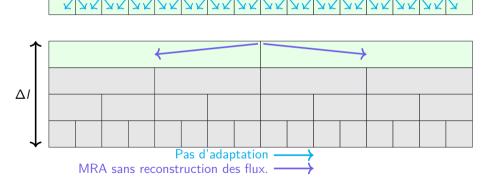


### Prédicteur polynomial à trois points.

### Flux numériques :

$$\Phi_k^+ = \frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x}$$

$$\Phi_k^- = \frac{u_k - u_{k-1}}{\Delta x}$$

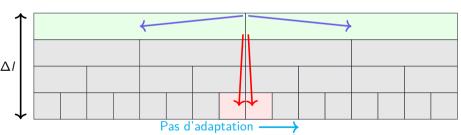


### Prédicteur polynomial à trois points.

### Flux numériques :

$$\Phi_k^+ = \frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x}$$

$$\Phi_k^- = \frac{u_k - u_{k-1}}{\Delta x}$$



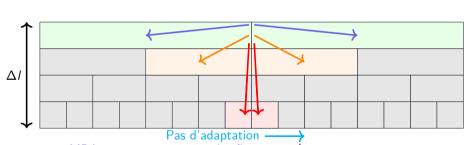
MRA sans reconstruction des flux. — MRA avec reconstruction des flux au niveau le plus fin. —

#### Prédicteur polynomial à trois points.

#### Flux numériques :

$$\Phi_k^+ = \frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x}$$

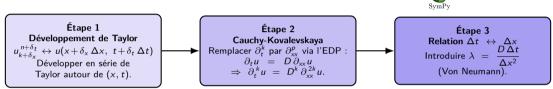
$$\Phi_k^- = \frac{u_k - u_{k-1}}{\Delta x}$$



## Contribution 2 | Équations Équivalentes, diffusion et MRA Méthode d'obtention des équivalentes

### Méthode d'obtention des équations équivalentes : Automatisation via

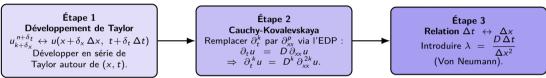




## Contribution 2 Équations Équivalentes, diffusion et MRA Méthode d'obtention des équations équivalentes

### Méthode d'obtention des équations équivalentes : Automatisation via





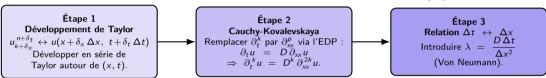
Multirésolution adaptative sans reconstruction des flux :

Remplacer  $\Delta x$  par  $2^{\Delta l} \Delta x$ .

## Contribution 2 | Équations Équivalentes, diffusion et MRA Méthode d'obtention des équations équivalentes

### Méthode d'obtention des équations équivalentes : Automatisation via





### Multirésolution adaptative sans reconstruction des flux :

Remplacer  $\Delta x$  par  $2^{\Delta l} \Delta x$ .

### Prise en compte de la reconstruction des flux :

- $\qquad \text{Reconstruction}: \left[ u_{2^{\Delta I}k-1}^{\bar{I}}, u_{2^{\Delta I}k}^{\bar{I}}, u_{2^{\Delta I}k+1}^{\bar{I}}, u_{2^{\Delta I}k+2}^{\bar{I}} \right]^T = P^{\Delta I} \left[ u_{k-1}^{\bar{I}-\Delta I}, u_k^{\bar{I}-\Delta I}, u_{k+1}^{\bar{I}}, u_{k+2}^{\bar{I}-\Delta I} \right]^T$
- ▶ Taille cellule :  $2^{\Delta l}\Delta x$ , Pas approximation gradient  $\Delta x$  .

 $\Delta I$  écart de niveau - D>0 coefficient de diffusion -  $\Delta x$  pas spatial de la grille fine -  $\Delta t$  pas temporel

### Sans multirésolution adaptative :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Delta x^2 \frac{D}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \Delta t^2 \frac{D^3}{6} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} - \Delta t^3 \frac{D^4}{24} \frac{\partial^8 u}{\partial x^8} + \mathcal{O}(\Delta x^4, \Delta t^4). \tag{10}$$

 $\Delta I$  écart de niveau - D>0 coefficient de diffusion -  $\Delta x$  pas spatial de la grille fine -  $\Delta t$  pas temporel

#### Sans multirésolution adaptative :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Delta x^2 \frac{D}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \Delta t^2 \frac{D^3}{6} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} - \Delta t^3 \frac{D^4}{24} \frac{\partial^8 u}{\partial x^8} + \mathcal{O}(\Delta x^4, \Delta t^4). \tag{10}$$

#### Avec multirésolution adaptative - sans reconstruction des flux :

$$\frac{\partial}{\partial t}u = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + (2^{\Delta I}\Delta x)^2 \frac{D}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \Delta t^2 \frac{D^3}{6} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} - \Delta t^3 \frac{D^4}{24} \frac{\partial^8 u}{\partial x^8} + \mathcal{O}(\Delta x^4, \Delta t^4). \tag{11}$$

 $\Delta I$  écart de niveau - D > 0 coefficient de diffusion -  $\Delta x$  pas spatial de la grille fine -  $\Delta t$  pas temporel

#### Sans multirésolution adaptative :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Delta x^2 \frac{D}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \Delta t^2 \frac{D^3}{6} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} - \Delta t^3 \frac{D^4}{24} \frac{\partial^8 u}{\partial x^8} + \mathcal{O}(\Delta x^4, \Delta t^4). \tag{10}$$

Avec multirésolution adaptative - sans reconstruction des flux :

$$\frac{\partial}{\partial t}u = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + (2^{\Delta I}\Delta x)^2 \frac{D}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \Delta t^2 \frac{D^3}{6} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} - \Delta t^3 \frac{D^4}{24} \frac{\partial^3 u}{\partial x^8} + \mathcal{O}(\Delta x^4, \Delta t^4). \tag{11}$$

Avec multirésolution adaptative - avec reconstruction des flux :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \Delta t \frac{D^2}{2} \left( 2^{2\Delta l} - 1 \right) \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \Delta t^2 \frac{D^3}{6} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} - \Delta t^3 \frac{D^4}{24} \frac{\partial^8 u}{\partial x^8} + \Delta x^2 \frac{2^{2\Delta l} D}{12} (1 - 3\Delta l) \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \mathcal{O}(\Delta x^4, \Delta t^4). \tag{12}$$

 $\Delta l$  écart de niveau - D>0 coefficient de diffusion -  $\Delta x$  pas spatial de la grille fine -  $\lambda=D\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$  c<sup>ste</sup> Von Neumann

### Sans multirésolution adaptative :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Delta x^2 \frac{D}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \lambda^2 \Delta x^4 \frac{D}{6} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} - \lambda^3 \Delta x^6 \frac{D}{24} \frac{\partial^8 u}{\partial x^8} + \mathcal{O}(\Delta x^7). \tag{13}$$

 $\Delta l$  écart de niveau - D>0 coefficient de diffusion -  $\Delta x$  pas spatial de la grille fine -  $\lambda=D\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$  c<sup>ste</sup> Von Neumann

### Sans multirésolution adaptative :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Delta x^2 \frac{D}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \lambda^2 \Delta x^4 \frac{D}{6} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} - \lambda^3 \Delta x^6 \frac{D}{24} \frac{\partial^8 u}{\partial x^8} + \mathcal{O}(\Delta x^7). \tag{13}$$

#### Avec multirésolution adaptative - sans reconstruction des flux :

$$\frac{\partial}{\partial t}u = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + (2^{\Delta I}\Delta x)^2 \frac{D}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \lambda^2 \Delta x^4 \frac{D}{6} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} - \lambda^3 \Delta x^6 \frac{D}{24} \frac{\partial^8 u}{\partial x^8} + \mathcal{O}(\Delta x^7)$$
(14)

 $\Delta l$  écart de niveau - D>0 coefficient de diffusion -  $\Delta x$  pas spatial de la grille fine -  $\lambda=D\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$  c<sup>ste</sup> Von Neumann

#### Sans multirésolution adaptative :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Delta x^2 \frac{D}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \lambda^2 \Delta x^4 \frac{D}{6} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} - \lambda^3 \Delta x^6 \frac{D}{24} \frac{\partial^8 u}{\partial x^8} + \mathcal{O}(\Delta x^7). \tag{13}$$

#### Avec multirésolution adaptative - sans reconstruction des flux :

$$\frac{\partial}{\partial t}u = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + (2^{\Delta I}\Delta x)^2 \frac{D}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \lambda^2 \Delta x^4 \frac{D}{6} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} - \lambda^3 \Delta x^6 \frac{D}{24} \frac{\partial^8 u}{\partial x^8} + \mathcal{O}(\Delta x^7)$$
(14)

Avec multirésolution adaptative - avec reconstruction des flux :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = +D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Delta x^2 D\left(\frac{\lambda}{2}(2^{2\Delta l} - 1) + \frac{2^{2\Delta l}}{12}(1 - 3\Delta l)\right)\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \Delta x^4 \frac{D\lambda^2 \frac{\partial^6 u}{\partial x^6}}{6} - \Delta x^6 \frac{D\lambda^3 \frac{\partial^8 u}{\partial x^8}}{24} + \mathcal{O}(\Delta x^7).$$
 (15)

### Apprentissage personnel:

- Calcul formel grâce à la libraire Sympy.
- Développement de la compréhension de l'algorithme d'adaptation.
- Usage des équations équivalentes comme puissant outil d'analyse, dans la continuité de l'équipe hpc@maths [6, 2].

#### Résultats

- Développement d'équations équivalente pour un schéma diffusif avec plusieurs types d'adaptation permettant une mise en lumière de l'erreur pour chaque contexte. (sans MRA, MRA sans reconstruction des flux et MRA avec reconstruction des flux)
- La reconstruction semble ajouter plus de termes d'erreurs
   + potentiellement perte d'ordre (à confirmer).

### Plan

Les équations d'advection-diffusion-réaction (ADR)

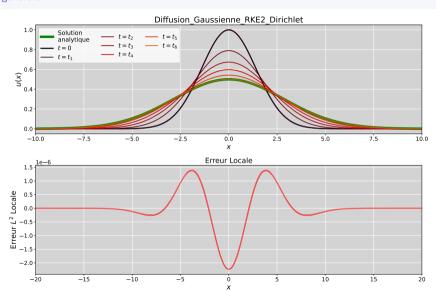
Problématique

1ère contribution

2ème contribution

3<sup>ème</sup> contribution

Compléments



# $\underset{\text{Intégration avec ERK2}}{\mathsf{Contribution}} \ | \ \mathsf{\acute{E}tude} \ \mathsf{nnum\acute{e}rique}, \ \mathsf{diffusion} \ \mathsf{et} \ \mathsf{MRA}$

- Niveaux de 12 à 6  $\varepsilon = 10^{-5}$ .
- Comparaison à la solution analytique.



- Niveaux de 12 à 6  $\varepsilon = 10^{-5}$ .
- Comparaison à la solution analytique.

### Erreur selon la méthode d'adaptation

Schéma <i>n</i> °	Niveau d'évaluation des flux	Erreur L <sup>2</sup>
I	Ø MRA	$2 \times 10^{-5}$
II	Courant	$1 \times 10^{-4}$
III	Plus fin I <sup>max</sup>	$3 \times 10^{-4}$
IV	Inférieur direct $(\mathit{I}+1)$	$2 \times 10^{-4}$



- Niveaux de 12 à 6  $\varepsilon = 10^{-5}$ .
- Comparaison à la solution analytique.

### Erreur selon la méthode d'adaptation

Schéma <i>n</i> °	Niveau d'évaluation des flux	Erreur L <sup>2</sup>
I	Ø MRA	$2 \times 10^{-5}$
II	Courant	$1 \times 10^{-4}$
III	Plus fin I <sup>max</sup>	$3 \times 10^{-4}$
IV	Inférieur direct $(\mathit{I}+1)$	$2 \times 10^{-4}$

- ▶ On retrouve que reconstruire → problèmes.
- Forte contrainte de stabilité  $\lambda = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2}$ .

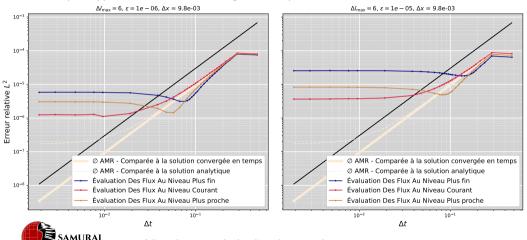


Etude de stabilité

# 

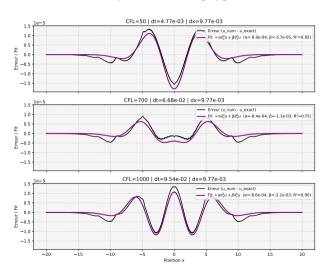
Ponio

#### Erreur par rapport à une solution convergée en temps selon la méthode d'évaluation des flux



Visualisation de la distribution des erreurs.

Correspondance Erreur Num.  $\propto \alpha \partial_{\nu}^{4} u + \beta \partial_{\nu}^{6} u$ 



#### Chute prématurée de l'erreur :

Les dérivées  $\partial_x^4$  et  $\partial_x^6$  ont des poids différents dans lerreur selon la constante de Von Neumann  $\lambda$ . Leurs profils se "compensent" quand elles ont un poids comparable.

### Moins bonne performances quand l'erreur temporelle est faible

Plus de termes d'erreur dans la contribution dominante de l'erreur :

Schéma nº	Évaluation des flux	Constante pondérant l'erreur en $\Delta x^2  \partial_x^4 u$ (dominante quand $\lambda$ est petite)
1	Ø AMR	$\frac{D}{12}$
II	Sans reconstruction	$2^{\Delta I} \frac{D}{12}$
III	Avec reconstruction	$D\left(\frac{\lambda}{2}\left(2^{2\Delta I}-1\right)+\frac{2^{2\Delta I}}{12}\left(1-3\Delta I\right)\right)$

La reconstruction semble ici problème car : prédicteur polynomial précis à l'ordre 3, permet une évaluation des gradients à l'ordre 2. Or le schéma est d'ordre 2, donc erreur de prédiction du même ordre et s'accumule.

### Plan

Les équations d'advection-diffusion-réaction (ADR)

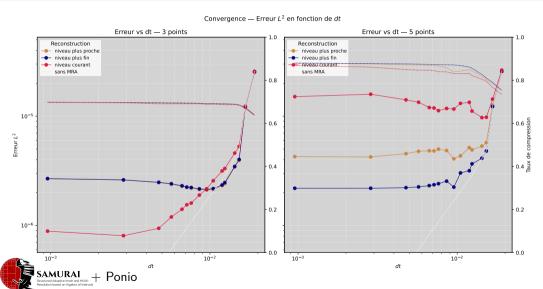
Problématique

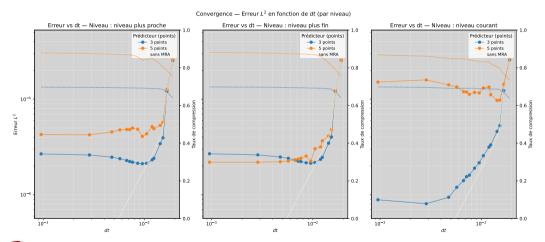
1ère contribution

2ème contribution

3<sup>ème</sup> contribution

### Compléments







### Conclusion

### Références I



Uri M. Ascher, Steven J. Ruuth, and Raymond J. Spiteri.

Implicit-explicit runge-kutta methods for time-dependent partial differential equations.

Applied Numerical Mathematics, 25(2):151-167, 1997 Special Issue on Time Integration.



Belloti, Gouarin, J. Massot, M. Massot, Matalon, Séries, and Tenaud,

Modified equation and error analyses on adaptative meshes for the resolution of evolutionary pdes with finite volume schemes.



Order conditions for numerical methods for partitioned ordinary differential equations.

Numerische Mathematik, 36(4):431-445, 1981.



Christopher A. Kennedy and Mark H. Carpenter.

Additive rungekutta schemes for convectiondiffusionreaction equations.

Applied Numerical Mathematics, 44(1):139-181, 2003



Randall J. LeVeque.

Numerical Methods for Conservation Laws.

Lectures in Mathematics ETH Zürich, Birkhäuser Verlag, Basel, 1990.



Marc Massot, Thomas Bellotti, Loïc Gouarin, Josselin Massot, Pierre Matalon, Laurent Séries, and Christian Tenaud.

Towards a new approach of mesh adaptation methods and its impact on accuracy for the simulation of stiff pdes.

Technical report / seminar presentation, NASA Ames Research Center, Advanced Modeling & Simulation Seminar Series, July 2025 Version accessible en ligne.

### Merci!

