

UNIVERSITÉ LILLE 1 - Sciences et Technologies



Document de synthèse présenté en vue d'obtenir
L'HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES

Discipline : Mathématiques

Soutenu publiquement le 10 décembre 2010 par

Pauline LAFITTE-GODILLON

EXPLORATION NUMÉRIQUE
DE COMPORTEMENTS ASYMPTOTIQUES
POUR DES ÉQUATIONS DE TRANSPORT-DIFFUSION

après avis des rapporteurs :

Shi JIN	Professeur, Université du Wisconsin-Madison
Benoît PERTHAME	Professeur, Université Pierre et Marie Curie
Alexis VASSEUR	Professeur, Lincoln College, Oxford

devant le jury composé de :

Christophe BESSE	Professeur, Université Lille 1
Maria ESTEBAN	Directrice de Recherches, Université Paris-Dauphine
Francis FILBET	Professeur, Université Lyon 1
Thierry GOUDON	Directeur de Recherches, INRIA Lille Nord-Europe
Emmanuel GRENIER	Professeur, École Normale Supérieure de Lyon
Alexis VASSEUR	Professeur, Lincoln College, Oxford

Table des matières

1	Introduction	4
2	Équations cinétiques	8
2.1	Modélisation et description des équations	9
2.1.1	Système photons-fluide	9
2.1.2	Interaction fluide-particules	13
2.2	Présentation des schémas et résultats numériques	17
2.2.1	Équations modèles	18
2.2.2	Schémas cinétiques discrets (SCD)	19
2.2.3	Schémas issus de fermetures par minimisation d'entropie (M)	20
2.2.4	Intégration projective (IP)	22
2.3	Comparaison	23
2.3.1	Equation cinétique	23
2.3.2	Problème de Su et Olson	24
3	Phénomènes de transport en mécanique statistique	29
3.1	Modèle physique	30
3.2	Étude de la mobilité en dimension 1	31
3.3	Investigations numériques	33
3.4	Résultats en dimension 2	35
4	Transition de phase	41
4.1	Modèle	42
4.2	Solutions diphasiques	43
4.3	Schéma aux différences finies	45
4.4	Schéma diphasique	49
4.5	Conclusions et perspectives	51
5	Problèmes en biologie	54
5.1	Évolution des métastases	55
5.2	Cascades de protéines	56
5.3	Bancs de poissons	60
5.4	Extinction de populations multitypes	60
5.4.1	Conditions extérieures pour des processus de branchement	61
5.4.2	Reproduction de plantes distyles	62

Remerciements

Je tiens en premier lieu à témoigner ma gratitude à Thierry Goudon, pour sa confiance, sa gentillesse et sa disponibilité ainsi que pour m'avoir accompagnée sur la voie de la modélisation à la simulation numérique. Que de chemin parcouru !

Je remercie humblement Shi Jin, Benoît Perthame ainsi qu'Alexis Vasseur pour avoir bien voulu évaluer mes travaux, Maria Esteban, Francis Filbet, Emmanuel Grenier et Alexis Vasseur, à nouveau, de s'être déplacés pour constituer le jury. Merci également à Christophe Besse d'avoir accepté d'en faire partie.

J'ai fait la connaissance de Thierry et de Christophe au même congrès à Vienne, A-HYKE en 2003, auquel je suis allée grâce à Roberto Natalini, qui m'a accueillie en post-doc à Rome en 2002, et au soutien de Laurent Desvillettes. Il est indéniable que ces rencontres ont fortement influé sur le cours de ma carrière et je profite chaque jour de pouvoir travailler, discuter, apprendre et, en un mot, progresser grâce à eux. Qu'ils en soient encore mille fois remerciés.

Merci à vous, ô tous mes collaborateurs, pour votre travail et votre patience : Bénédicte, Christophe, Sylvain, Ralf, Virginie, Laurent, Benjamin, José Antonio, Jean-François, Stephan, Anne, Mathilde, Guillaume, Sophie, Frédéric, Corrado, Benoît, Sebastian, Paul, Kilian, Mathias, Giovanni, Chi, Francesco. Nos efforts communs font la matière de ce mémoire et ma motivation quotidienne.

Une mention spéciale revient à mes relecteurs, Emmanuel, Stephan, Thierry, Frédéric L. et Frédéric R., ainsi qu'à Stéphane, qui m'ont particulièrement aidée, en me consacrant une part non négligeable de leur emploi du temps pourtant déjà terriblement chargé !

Aller au(x) bureau(x) tous les matins est finalement très facile, car je sais que je vais y retrouver l'atmosphère chaleureuse et harmonieuse (et studieuse !) qui y règne grâce à toutes et à tous : merci à Caterina, Sandrine, Claire, Stella, Ingrid, Christophe, Pierre, Jean-François, Emmanuel, Stephan, Guillaume, Antoine, Thierry, Sahbi, Léon, Sebastian, Martin, Yohan, Gabriel, Mathias, Chang dont les diverses préoccupations font la richesse des EDP à Lille, ainsi qu'à mes autres collègues, enseignants, chercheurs, administratifs, du laboratoire Painlevé, de l'UFR de Mathématiques et de l'INRIA Lille Nord-Europe, avec une mention spéciale à Jean-Jacques, Soledad, Isabelle, Valérie, Sabine, Véronique, Frédérique et François pour leur aide au quotidien.

Organiser le Canum2008 a été long et éprouvant, mais aussi intense et formateur : c'est dans les moments difficiles qu'on sait sur qui on peut compter ! Merci au comité d'organisation, et particulièrement à Olivier.

L'oral de l'agrégation est un moment fort de l'année où j'ai plaisir à retrouver mes co-interrogateurs, avec qui j'ai toujours des discussions passionnantes et très instructives, dont je les remercie !

Merci à tous mes collègues qui s'investissent pour la communauté, localement et/ou nationalement : c'est en donnant tous un peu de soi qu'on fait avancer la machine ! Je profite de cette occasion pour remercier particulièrement les membres de l'Opération Postes, les membres de la SMAI et de

son conseil d'administration pour leur confiance, et les maîtres de conférences de l'USTL ainsi que les élus de son CA, notamment Jean D'Almeida et Francis Guilbert, et le Président de l'USTL, Philippe Rollet, pour m'avoir fait partager l'expérience, très instructive, des conseils de l'Université.

Enfin, mes remerciements vont à mes amis et à ma famille, pour leurs encouragements, leur écoute, leurs « bon, alors, ça vient, cette habilitation ? », et tout simplement leur aide, au quotidien, dans les bons comme dans les mauvais jours : Sylvie, Christophe, Isabelle, Aymeric, Anaëlle et Ysée, Virginie, Laurent, Franck, Pierre Ca., Pierre Ce., Pierre, Claire, Titouan, Anouk et Léna, Jean-François et Sébastien, Guillaume, Gilles, Sandrine et Gwenaëlle, Stéphane, Karine, Ambre et Anaëlle, Maria, David, Antoine, François, Virginie et Carl, Thierry, Patricia, Antoine et Aline, Olivier et Isabelle, Emmanuel, Jean-Philippe, Audrey et Chloé, Delphine et Jean-Paul, Ingrid et Bertrand, Frédéric L., André, Julien, Giovanni, Ottavia, Alice, Jacopo et Rachele, Alain, Julien, Magali, Camille et Jeanne, Frédéric R., Mathias, Olivier et Fanny, Chi, Théodore, Wei et Long-Na, merci Papa, merci Maman, merci à toi mon cœur et à toi ma Rita, vous définissez ma vie !

Chapitre 1

Introduction

Mon travail de recherche a couvert ces dernières années un spectre assez large de modélisation, analyse numérique et simulation pour des problèmes physiques et biologiques, de la mécanique à l'échelle moléculaire ou particulaire, niveau dit « microscopique », à la diffusion non-linéaire, niveau « macroscopique », en passant par des équations cinétiques décrivant la distribution en vitesse de particules, niveau « mésoscopique ». Le point commun de ces travaux est l'étude de comportements asymptotiques et la recherche d'explications de phénomènes observables macroscopiques par des descriptions micro ou mésoscopiques à l'aide d'outils numériques. Les applications auxquelles on s'intéresse ici sont, pour la partie physique, liées à la thermodynamique couplée ou non avec du transfert radiatif ou une dynamique particulaire raréfiée et, pour la partie biologie-chimie, à des problèmes de propagation d'information par des mécanismes de transport ou de diffusion, ainsi qu'à la recherche de formation de motifs et à l'étude d'extinction de populations. Les équations aux dérivées partielles que j'ai étudiées proviennent de modèles déterministes ou probabilistes et se classent dans les catégories de transport et de diffusion évolutifs. L'apparition, lors de l'adimensionnement des problèmes, de petits paramètres qui augmentent l'influence de certains des phénomènes caractéristiques dans la solution peut entraîner des difficultés importantes lors du traitement numérique, ce qui impose le recours à des solutions nouvelles permettant de recouvrer au minimum le comportement macroscopique prédit par les observations et par l'analyse mathématique.

Ce mémoire se découpe en cinq parties : on traite au chapitre 2 de la discrétisation d'équations cinétiques en régime diffusif couplées à des équations hydrodynamiques décrivant les interactions entre le transfert radiatif et un fluide compressible non visqueux puis celles entre un polluant dispersé et l'air. Ensuite viennent au chapitre 3 la modélisation et la simulation du phénomène de fluctuation-dissipation par une chaîne d'oscillateurs. Le chapitre 4 est consacré à l'étude numérique d'une équation de diffusion non-linéaire que l'on peut rencontrer dans la description de polymères à leur point de solidification. Enfin, le chapitre 5 regroupe des problèmes ayant trait à la biologie.

Bibliographie personnelle

Thème cinétique

- [k1] **Pauline Godillon-Lafitte** and Thierry Goudon. A coupled model for radiative transfer : Doppler effects, equilibrium, and nonequilibrium diffusion asymptotics. *Multiscale Model. Simul.*, 4(4) :1245–1279 (electronic), 2005.
- [k2] José Antonio Carrillo, Thierry Goudon, **Pauline Lafitte**, and Francesco Vecil. Numerical schemes of diffusion asymptotics and moment closures for kinetic equations. *J. Sci. Comput.*, 36(1) :113–149, 2008.
- [k3] José Antonio Carrillo, Thierry Goudon, and **Pauline Lafitte**. Simulation of fluid and particles flows : asymptotic preserving schemes for bubbling and flowing regimes. *J. Comput. Phys.*, 227(16) :7929–7951, 2008.
- [k4] Laurent Boudin, Benjamin Boutin, Bruno Fornet, Thierry Goudon, **Pauline Lafitte**, Frédéric Lagoutière, and Benoît Merlet. Fluid-particles flows : A thin spray model with energy exchanges. *ESAIM : Proceedings*, 28 :195, 2009.
- [k5] Jean-François Coulombel and **Pauline Lafitte**. Computation of shock profiles in radiative hydrodynamics. *CiCP*, 6 :1118–1136, 2009.
- [k6] Thierry Goudon, **Pauline Lafitte**, and Mathias Rousset. Modeling and simulation of fluid-particles flows. In Ta-Tsien Li, Yue-Jun Peng, and Bopeng Rao, editors, *Some Problems on Nonlinear Hyperbolic Equations and Applications*, volume Series in Contemporary Applied Mathematics. World Scientific, 2010.
- [k7] **Pauline Lafitte** and Giovanni Samaey. Asymptotic-preserving projective integration schemes for kinetic equations in the diffusion limit. Soumis, 2010.
- [k8] Thierry Goudon and **Pauline Lafitte**. Splitting schemes for the simulation of non equilibrium radiative flows. En préparation, 2010.
- [k9] **Pauline Lafitte** and Giovanni Samaey. Kinetic projective integration schemes for conservation laws. En préparation, 2010.
- [k10] Benjamin Boutin, Thierry Goudon, **Pauline Lafitte**, and Frédéric Lagoutière. Fluid-particles flows with energy exchanges. En préparation, 2010.
- [k11] **Pauline Lafitte**. Consistency and stability analysis of a splitting scheme for a kinetic equation with relaxation in the diffusive regime. En préparation, 2010.

Thème mécanique statistique

- [m12] Stephan De Bièvre, **Pauline Lafitte**, and Paul E. Parris. Normal transport at positive temperatures in classical Hamiltonian open systems. In *Adventures in mathematical physics*, volume 447 of *Contemp. Math.*, pages 57–71. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2007.
- [m13] **Pauline Lafitte**, Paul E. Parris, and Stephan De Bièvre. Normal transport properties in a metastable stationary state for a classical particle coupled to a non-Ohmic bath. *J. Stat. Phys.*, 132(5) :863–879, 2008.
- [m14] Bénédicte Aguer, Stephan De Bièvre, **Pauline Lafitte**, and Paul E. Parris. Classical motion in force fields with short range correlations. *Journal of Statistical Physics*, 138 :780, 2010.

Thème diffusion non-linéaire

- [d15] **Pauline Lafitte** and Corrado Mascia. Numerical exploration of a forward–backward diffusion equation. Soumis, 2010.

Thème biologie

- [b16] Anne Devys, Thierry Goudon, and **Pauline Lafitte**. A model describing the growth and the size distribution of multiple metastatic tumors. *DCDS-B*, 12(4) :731–767, 2009.
- [b17] Ralf Blossey, Jean-François Bodart, Anne Devys, Thierry Goudon, and **Pauline Lafitte**. Signal propagation in the MAPK cascade : role of bistability and ultrasensitivity for a mixed problem. Soumis, 2010.
- [b18] Sophie Hautphenne and **Pauline Lafitte**. On partial differential equations in branching processes. En préparation, 2010.
- [b19] **Pauline Lafitte**, Jésus Rosado, and Francesco Vecil. Numerical simulations of multi-dimensional attraction/repulsion collective behavior models. En préparation, 2010.
- [b20] **Pauline Lafitte**, Kilian Raschel, and Viet Chi Tran. A random walk in the quarter plane model for sexual reproduction. En préparation, 2010.

Chapitre 2

Équations cinétiques

L'objectif de ce chapitre est de présenter les méthodes numériques mises en place dans [k1, k2, k3, k4, k7, k8], pour obtenir des simulations dans divers contextes physiques pouvant être modélisés par des équations cinétiques où apparaissent plusieurs échelles de temps. Dans tous ces travaux, on présente des schémas préservant l'asymptotique (AP) au sens de Jin [K36], c'est-à-dire permettant d'obtenir des approximations numériques mésoscopiques qui, à maillage en temps-espace-vitesse fixé, tendent à la limite du petit paramètre vers des approximations des solutions macroscopiques. Les deux types de modèles abordés correspondent à un phénomène de transfert radiatif photons-fluide d'une part et à la pollution atmosphérique d'autre part. Les équations abordées sont de deux types : dans le cadre du transfert radiatif, on s'intéresse à des termes de collision linéaire, ce qui permet une intégration exacte de l'équation homogène en espace, et pour la pollution à des termes de diffusion en vitesse, de type Fokker-Planck, qui rendent compte du mouvement brownien. Pour des raisons d'unité de modélisation, j'ai choisi de présenter également dans ce chapitre les travaux [k5] relevant des simulations numériques macroscopiques d'une asymptotique particulière du système décrivant le système photons-fluide. Enfin je précise que, les schémas ayant été développés dans des cas-modèles à une dimension d'espace, les discrétisations choisies sont des différences finies en temps, en espace et éventuellement en vitesse. La vision de l'équation cinétique comme un système d'équations de transport couplées, à vitesse nécessairement finie, même si la limite considérée mène à une équation diffusive, nous a menés à ne considérer que des schémas explicites, et à privilégier des décentrages amont et aval en espace. Les méthodes décrites peuvent être utilisées en dimension supérieure en choisissant des approximations en espace et en vitesse adaptées. Comme pour des schémas similaires [K39], la condition de stabilité L^2 , appelée de Courant-Friedrichs-Lewy ou CFL, des schémas aux différences finies pour l'équation de diffusion est toujours suffisante, et on peut l'améliorer dans le cas $\varepsilon > 0$. Dans tout ce chapitre, l'espace des vitesses mesuré est appelé (V, μ) et on note

$$\forall h \in L^1(V), \quad \langle h \rangle = \int_V h d\mu(v).$$

Dans toutes les applications considérées, (V, μ) est supposé vérifier

$$\begin{cases} \langle 1 \rangle = 1, \\ \text{pour toute fonction } h \text{ impaire } \mu\text{-intégrable, } \langle h \rangle = 0, \\ \langle \|v\|^2 \rangle = d > 0. \end{cases} \quad (2.1)$$

Par conséquent, l'espace V sera supposé symétrique, et scindé en $V_{\pm} := \{v \in V / \pm v > 0\}$, la vitesse nulle n'étant pas considérée. Après discrétisation de l'espace des vitesses, on définira $p \in \mathbb{N}^*$ comme étant le cardinal de V^{\pm} et on considèrera notamment pour μ la mesure atomique, les distributions f devenant des fonctions vectorielles $f(t, x)$ à valeurs dans \mathbb{R}^{2p} .

2.1 Modélisation et description des équations

2.1.1 Système photons-fluide

Le problème physique qui m'a menée à l'étude des schémas préservant l'asymptotique est celui du transfert radiatif [k1, k8]. On s'intéresse au couplage des radiations avec un fluide et on suppose être en asymptotique diffusive [K24, K25]. Il s'agit de décrire l'évolution des photons, dont on caractérise l'intensité spécifique $f(t, x, \vec{v}) \in \mathbb{R}^+$ où $t > 0$ est le temps, $x \in \mathbb{R}^N$, $N \in \{1, 2, 3\}$, est la position et $\vec{v} \in V = S^{N-1}$ est un vecteur de direction, les photons ayant tous la même célérité $c =$

$3 \cdot 10^8 \text{ms}^{-1}$. On travaille dans l'hypothèse que le modèle est gris, c'est-à-dire moyenné en fréquence. On souhaite modéliser l'interaction avec un fluide compressible, pouvant être représenté par sa densité $n(t, x) \in \mathbb{R}^+$, sa vitesse $\vec{u}(t, x) \in \mathbb{R}^N$ et son énergie totale $E(t, x) \in \mathbb{R}^+$. La température du fluide, que l'on suppose être ici un gaz parfait, est reliée à l'énergie interne $e = E - u^2/2$ par la formule $e = R\theta/(\gamma - 1)$, où $R = 8.314 \text{Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$ est la constante universelle des gaz parfaits et γ est la constante adiabatique du gaz, typiquement $\gamma = 7/5$ pour un gaz diatomique. La pression est donnée par la loi d'état $p = Rn\theta = (\gamma - 1)ne$. Les équations en présence sont donc une équation cinétique couplée ici au système d'Euler compressible¹ :

$$\frac{1}{c} \partial_t f + v \cdot \nabla_x f = Q_{\text{scatt}} + Q_{\text{em/abs}} \quad (2.2)$$

et

$$\begin{cases} \partial_t n + \nabla_x \cdot (nu) = 0, \\ \partial_t (nu) + \nabla_x (nu \otimes u + p) = -\frac{1}{c} \langle v \left(\frac{Q_{\text{scatt}}}{\ell_s} + \frac{Q_{\text{em/abs}}}{\ell_a} \right) \rangle, \\ \partial_t (nE) + \nabla_x \cdot (nEu + pu) = -\langle Q_{\text{scatt}} + Q_{\text{em/abs}} \rangle, \end{cases} \quad (2.3)$$

où ℓ_s et ℓ_a sont des longueurs caractéristiques du libre parcours moyen. Les termes sources rendent compte des phénomènes de scattering (Q_{scatt}), c'est-à-dire la réflexion après collision des photons et des molécules de gaz, et d'absorption et émission d'énergie par rayonnement ($Q_{\text{em/abs}}$). Ces deux termes sources peuvent se voir comme la somme d'un terme de gain et d'un terme de perte. En prenant en compte les corrections Doppler

$$\Lambda : (t, x, v) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{S}^{N-1} \mapsto \frac{1 - v \cdot u(t, x)/c}{\sqrt{1 - \|u(t, x)\|^2/c^2}},$$

qui proviennent du fait que certaines quantités sont exprimées dans un repère mobile, ils prennent la forme

$$\begin{cases} Q_{\text{scatt}}(t, x, v) = \sigma_s \left(\frac{1}{\Lambda(t, x, v)^2} \langle \Lambda f \rangle - \Lambda(t, x, v) f(t, x, v) \right) \\ \text{et} \\ Q_{\text{em/abs}}(t, x, v) = \sigma_a \left(\frac{\sigma \theta^4}{\pi \Lambda^3} - \Lambda f \right), \end{cases}$$

où $\sigma = 5,670\,400 \cdot 10^{-8} \text{JK}^{-4}\text{m}^{-2}\text{s}^{-1}$ est la constante de Stefan-Boltzmann. La propriété fondamentale qui caractérise ce couplage est la conservation de l'énergie globale du système photons-fluide :

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{S}^{N-1}} \frac{f}{c} d\mu(v) dx + \int_{\mathbb{R}^N} nE dx \right) = 0, \quad (2.4)$$

le terme $\langle f/c \rangle$ représentant l'énergie radiative.

Une analyse dimensionnelle exhaustive nous mène ensuite aux équations

$$\begin{cases} \partial_t n + \nabla_x \cdot (nu) = 0, \\ \partial_t (nu) + \nabla_x (nu \otimes u) + \nabla_x p = -\mathcal{P} \left(\frac{1}{\mathcal{L}_s} \langle v Q_{\text{scat}} \rangle + \frac{1}{\mathcal{L}_a} \langle v Q_{\text{em/abs}} \rangle \right), \\ \partial_t (nE) + \nabla_x \cdot (nEu + pu) = -\mathcal{PC} \left(\frac{1}{\mathcal{L}_s} \langle Q_{\text{scat}} \rangle + \frac{1}{\mathcal{L}_a} \langle Q_{\text{em/abs}} \rangle \right), \\ \frac{1}{c} \partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\mathcal{L}_s} Q_{\text{scat}} + \frac{1}{\mathcal{L}_a} Q_{\text{em/abs}}, \end{cases} \quad (2.5)$$

1. suivant le contexte physique, on peut choisir pour le fluide d'autres descriptions, comme les équations de Navier-Stokes [K34]

où trois paramètres sans dimension caractérisent le comportement :

- \mathcal{C} est le rapport de la vitesse de la lumière et de la vitesse caractéristique du fluide,
- $\mathcal{L}_{s,a}$ sont les nombres de Knudsen associés respectivement au scattering et à l'absorption, c'est-à-dire les rapports du libre parcours moyen de chacun des phénomènes et de la longueur caractéristique du système,
- \mathcal{P} est le rapport des énergies caractéristiques des radiations et du fluide.

Nous avons supposé que la vitesse du fluide est très petite devant la lumière, d'où l'apparition d'un petit paramètre $\varepsilon := 1/\mathcal{C}$ et nous nous sommes intéressés particulièrement au cas où le phénomène de scattering est prédominant par rapport au phénomène d'absorption/émission, dans le rapport $\mathcal{L}_a = \varepsilon = 1/\mathcal{L}_s$. Cela conduit à écrire les opérateurs du terme source sous la forme

$$Q_{\text{scat}} = \sigma_s \left(\frac{1}{\Lambda_\varepsilon^3} \langle \Lambda_\varepsilon^2 f \rangle - \Lambda_\varepsilon f \right) \quad \text{et} \quad Q_{\text{em/abs}} = \sigma_a \left(\frac{1}{\Lambda_\varepsilon^3} \theta^4 - \Lambda_\varepsilon f \right),$$

avec

$$\Lambda_\varepsilon(t, x, v) = \frac{1 - \varepsilon u(t, x) \cdot v}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 \|u(t, x)\|^2}}.$$

Sous les hypothèses (2.1), dans l'asymptotique $\varepsilon \rightarrow 0$ qui constitue notre motivation, on peut dériver, à l'aide d'un développement de Hilbert en ε de la distribution f , un système macroscopique de quatre équations ne faisant intervenir, pour les photons, que la densité $\rho(t, x) := \langle f(t, x, v) \rangle$:

$$\partial_t n + \nabla_x \cdot (nu) = 0, \tag{2.6}$$

$$\partial_t (nu) + \nabla_x (nu^2 + p) = -\mathcal{P} \frac{\nabla_x \rho}{3}, \tag{2.7}$$

$$\partial_t (nE) + \nabla_x \cdot (nEu + pu) = -\mathcal{P} \frac{1}{3} u \cdot \nabla_x \rho + \mathcal{P} \sigma_a (\rho - \theta^4), \tag{2.8}$$

$$\partial_t \rho - \frac{1}{3} \nabla_x \cdot \left(\frac{1}{\sigma_s} \nabla_x \rho \right) + \frac{4}{3} \nabla_x \cdot (\rho u) - \frac{1}{3} u \cdot \nabla_x \rho = \sigma_a (\theta^4 - \rho). \tag{2.9}$$

On appelle ce régime *hors-équilibre* en référence au fait qu'il y a deux températures distinctes à la limite, pour le fluide d'une part, et pour les radiations d'autre part, ceci contrairement au cas où l'absorption serait dominante et où restent seulement trois équations. Ce cas d'asymptotique hors équilibre est bien connu des physiciens [K45] et a été étudié par Buet et Després [K27, K28] sous l'angle notamment de fermetures aux moments. L'équation mésoscopique de la distribution mène donc, dans ce régime asymptotique, à l'équation de convection-diffusion en l'intensité macroscopique des radiations ρ (2.9), avec terme source en θ la température du fluide, d'où le nom d'*asymptotique diffusive*. Ce comportement était prévisible car les vitesses caractéristiques de l'équation cinétique du système (2.5) sont en $O(\mathcal{C})$, c'est-à-dire en $O(\varepsilon^{-1})$. Les termes de convection apparaissant dans les équations (2.8)-(2.9) à la vitesse u du fluide sont dus uniquement aux corrections Doppler. Comme dans le cas $\varepsilon > 0$, on note qu'il y a conservation de l'énergie globale

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^N} (\mathcal{P} \rho + nE) dx = 0. \tag{2.10}$$

Les caractéristiques des solutions sont

- la positivité des densités du fluide n , des radiations ρ et de la température ;
- la conservation globale de l'énergie.

Mes travaux traitent de trois cas particuliers de transfert radiatif :

- dans le premier article avec T. Goudon [k1], nous avons restreint le couplage de quatre à deux équations :

$$\begin{cases} \frac{1}{\mathcal{C}} \partial_t f_\varepsilon + v \cdot \nabla_x f_\varepsilon = \mathcal{L}_s \sigma_s \left(\frac{1}{\Lambda_\varepsilon^3} \langle \Lambda_\varepsilon^2 f \rangle - \Lambda_\varepsilon f \right) + \mathcal{L}_a \sigma_a \left(\frac{1}{\Lambda_\varepsilon^3} \theta^4 - \Lambda_\varepsilon f \right), \\ \partial_t \theta + \nabla_x \cdot (u\theta) - \mathcal{D} \Delta \theta \\ = -\mathcal{P} \mathcal{L}_s \left\langle \frac{\Lambda}{\zeta} \left(\frac{\langle \sigma_s \Lambda^2 f \rangle}{\Lambda^3} - \left\langle \frac{\sigma_s}{\Lambda^2} \right\rangle \Lambda f \right) \right\rangle - \mathcal{P} \mathcal{L}_a \left\langle \frac{\Lambda}{\zeta} \sigma_a \left(\frac{\theta^4/\pi}{\Lambda^3} - \Lambda f \right) \right\rangle \end{cases}$$

où $u(t, x)$ est donnée, Λ et ζ sont définis par

$$\Lambda(t, x, v) = \zeta(t, x) \left(1 - \frac{u(t, x) \cdot v}{\mathcal{C}} \right) \quad \text{et} \quad \zeta(t, x) = \frac{1}{\sqrt{1 - \|u(t, x)\|^2/\mathcal{C}^2}}$$

et \mathcal{D} est une constante de diffusion artificielle, système pour lequel nous avons établi la convergence, dans des espaces adaptés, des quantités $\rho_\varepsilon = \langle f_\varepsilon \rangle$ et θ_ε vers ρ et θ respectivement satisfaisant aux équations macroscopiques dérivées à l'aide de développements de Hilbert, à savoir

$$\begin{aligned} \partial_t \rho - \operatorname{div}_x (\mathbb{D} \nabla_x \rho - 3 \langle v \otimes v \rangle u \rho) &= - \left\langle (\mathbb{D}_x u)^T v \cdot v \right\rangle \rho + \langle \sigma_a \rangle (\theta^4/\pi - \rho), \\ \partial_t \theta + \operatorname{div}_x (u\theta) - \Delta \theta &= \langle \sigma_a \rangle (\rho - \theta^4/\pi), \end{aligned}$$

dans le cas hors-équilibre ($\mathcal{L}_a = \varepsilon = 1/\mathcal{L}_s$) où les températures des radiations et du fluide sont distinctes et

$$\begin{aligned} \partial_t (\theta + \rho) + \operatorname{div}_x \left(u(\theta + \langle v \otimes v \rangle \rho) - \nabla_x \theta - \left\langle \frac{v \otimes v}{\sigma_a} \right\rangle \nabla_x \rho \right) \\ = - \left\langle (\mathbb{D}_x u)^T v \cdot v \right\rangle \rho. \end{aligned}$$

dans le régime $\mathcal{L}_s = \varepsilon = 1/\mathcal{L}_a$ où les températures sont à l'équilibre, avec $\rho = \theta^4/\pi$. Ce choix de restriction sur le couplage était lié à notre objectif, qui était d'obtenir une justification rigoureuse et de développer des schémas numériques sur un modèle élémentaire du point de vue fluide, mais enrichi par la présence des termes Doppler.

- le travail mené avec J.-F. Coulombel [k5] faisait suite à la thèse de C. Lin [K42] qui a étudié le modèle

$$\begin{cases} \partial_t n + \nabla_x \cdot (nu) = 0, \\ \partial_t (nu) + \nabla_x (nu \otimes u + p) = 0, \\ \partial_t (nE) + \nabla_x \cdot (nEu + pu) = \rho - \theta^4, \\ -\Delta_x \rho = \theta^4 - \rho. \end{cases} \quad (2.11)$$

Ce système peut être vu comme la limite

$$\mathcal{P} \rightarrow 0, \quad \sigma_a \mathcal{P} = 1, \quad 3\sigma_s \sigma_a = 1$$

du système complet (2.5) dans lequel la correction Doppler est à remplacer par 1; les simulations numériques que nous avons effectuées visaient à compléter la compréhension de la régularité et de la non-monotonie de la température des profils pour les chocs de grande amplitude annoncées par les textes de référence [K49, K52], sachant qu'il existe des théorèmes

montrant l'existence de profils réguliers pour de petites amplitudes [K43, K44]. Les conclusions auxquelles nous sommes parvenus confortent les résultats pour les petites amplitudes, mais contredisent notamment l'existence de profils réguliers pour de grands chocs énoncée par Mihalas et Mihalas [K49] (voir Figure 2.1). Nous avons en particulier montré que, à l'instar du modèle étudié par Kawashima et Nishibata [K38] où le fluide est simplement décrit par une équation de Burgers, il existe un phénomène de seuil en-dessous duquel les profils sont continus et au-delà duquel ils sont clairement discontinus. Les schémas numériques employés reposaient sur le schéma Lagrange-Projection de B. Després et F. Lagoutière [K40, K41] ou le schéma de Godunov pour la partie hydrodynamique et sur les polynômes de Laguerre pour la diffusion inverse, ce qui permet d'obtenir des simulations précises à l'ordre 1 en espace sous la condition CFL hyperbolique $\Delta t = O(\Delta x)$ (voir Figure 2.2);

- dans un article en préparation avec T. Goudon [k8], nous considérons le système complet (2.5) en régime hors-équilibre. Nous nous intéressons particulièrement aux effets de convection dus aux corrections Doppler et aux échanges d'énergies radiative et hydrodynamique, dans le but de comprendre la structure des profils de chocs étudiés numériquement en collaboration avec Jean-François Coulombel.

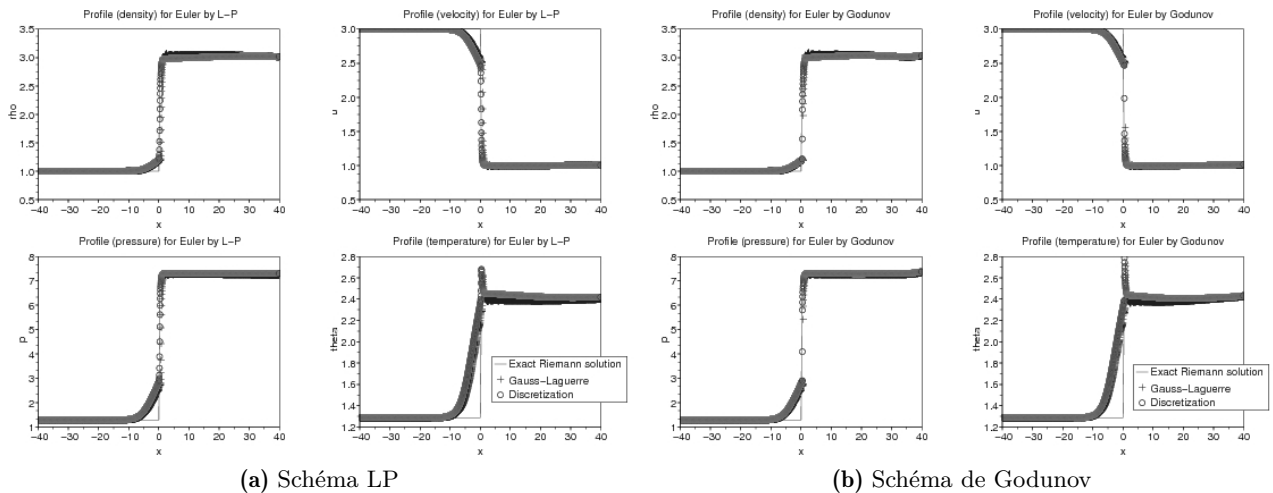


Figure 2.1 – Profils de densité, vitesse, pression et température. Pour un 1-choc stationnaire de grande amplitude, les profils ne sont pas réguliers.

2.1.2 Interaction fluide-particules

Je me suis intéressée à la modélisation de systèmes fluide-particules dans le cadre de la pollution atmosphérique [k3, k4, k10]. Il s'agit cette fois encore d'un couplage de particules avec un gaz parfait que l'on suppose être ici l'air et que l'on décrit à l'aide des équations d'Euler. Cependant, l'équation cinétique n'a plus de terme source collisionnel comme le terme de scattering Q_{scatt} décrit au paragraphe précédent, mais un terme source diffusif en la variable de vitesse $v \in \mathbb{R}^N$ qui décrit le comportement aléatoire des particules dans un fluide. Cette notion est développée au chapitre 3. La différence de concept entre ces deux termes sources repose sur la vision déterministe

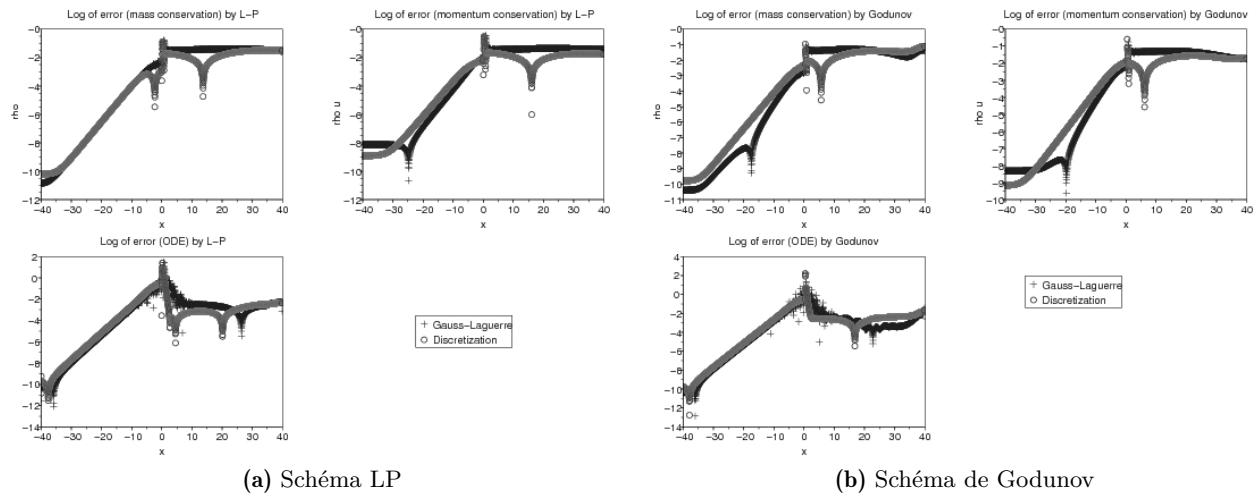


Figure 2.2 – Erreur ponctuelle pour un 1-choc de grande amplitude

« microscopique » du changement de direction post-collisionnelle dans le cas des photons à opposer à la vision qui consiste à « résumer » un fluide, constitué d’obstacles et de zones vides, à un milieu visqueux, exerçant une friction sur les particules, soumises également à des forces aléatoires liées à l’agitation thermique. Il est à souligner que ces équations ont été utilisées pour le développement du code KIVA2 dans les laboratoires de Los Alamos [K21], notamment pour la simulation des moteurs diesel. On pourra trouver une classification de tels modèles diphasiques dans les thèses de C. Baranger [K23] et J. Mathiaud [K46]. Des avancées mathématiques significatives sur l’existence et l’analyse asymptotique ont été obtenues récemment par A. Mellet et A. Vasseur [K47, K48].

À partir d’un modèle proposé par J. A. Carrillo et T. Goudon [K29], on assimile dans ces travaux le mélange air-polluant à une suspension fine, ou spray fin, modélisée à l’aide d’un couplage d’un système macroscopique pour le fluide et mésoscopique pour les particules. On note ρ_f la masse volumique typique de l’air, soit $\rho_f = 1\text{kg}/\text{m}^3$ et ρ_p la concentration massique du polluant, typiquement $\rho_p = 1\mu\text{g}/\text{m}^3$. Pour les particules, assimilées à des sphères dures de même rayon et de même masse $m_p = 10^{-15}\text{kg}$, on écrit une équation de type Vlasov/Fokker-Planck

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = -\eta_p \nabla_x \Phi \cdot \nabla_v f + \varphi \operatorname{div}_v \left((v - u) f + \frac{\kappa \theta}{m_p} \nabla_v f \right) \quad (2.12)$$

où f représente la distribution des particules, θ la température du fluide, φ sa constante de friction. $\eta_p \Phi$ est un potentiel dont dérive la force extérieure, typiquement ici les actions combinées de la gravité et de la force d’Archimède, soit $\Phi = gz$, z variable de hauteur et g constante de gravité, et $\eta_p = 1 - \rho_f/\rho_p$, exprimant le fait qu’une faible concentration implique que la force est dirigée vers le haut et inversement. L’expression de la constante de diffusion en vitesse dérive de la loi de fluctuation-dissipation évoquée au chapitre 3, soit $\varphi \kappa \theta/m_p$. Par ailleurs, l’air est décrit par les

équations d'Euler

$$\begin{cases} \partial_t n + \operatorname{div}_x(nu) = 0, \\ \partial_t(nu) + \operatorname{Div}_x(nu \otimes u) + \nabla_x(Rn\theta) = \mathcal{F} - \eta_f n \nabla_x \Phi, \\ \partial_t \left(n \left(\frac{\|u\|^2}{2} + \frac{R\theta}{\gamma-1} \right) \right) + \operatorname{div}_x \left(\left(\frac{\|u\|^2}{2} + \frac{R\gamma}{\gamma-1} \theta \right) nu \right) = \mathcal{E} - \eta_f nu \cdot \nabla_x \Phi, \end{cases} \quad (2.13)$$

où $\rho_f n$ et u représentent respectivement la densité et la vitesse du fluide et η_f la constante symétrique de η_p pour les particules, soit $\eta_f = 1 - \rho_p/\rho_f$. Étant donné la dépendance en la température de (2.12), on choisit d'exprimer la pression et l'énergie interne en fonction de cette variable.

On introduit de plus les quantités macroscopiques suivantes :

- la densité particulaire $\rho = \langle f \rangle$,
- la vitesse moyenne V à l'aide de la quantité de mouvement $\rho V = \langle vf \rangle$,
- la température particulaire θ_p au moyen de l'énergie des particules $N\theta_p + \rho\|V\|^2/2 = \langle \|v^2\|f \rangle$.

Afin d'assurer que la quantité de mouvement et l'énergie totale du système sont conservées en l'absence de force extérieure, on ferme le système en imposant

$$\mathcal{F}(t, x) = \varphi \frac{\rho_p}{\rho_f} \rho(V - u)(t, x) \quad \text{et} \quad \mathcal{E} = \varphi \frac{\rho_p}{\rho_f} \left(\rho V \cdot (V - u) + N\rho \left(\theta_p - \frac{\kappa}{m_p} \theta \right) \right). \quad (2.14)$$

Dans (2.12), le couplage intervient dans l'opérateur de Fokker-Planck, dans lequel on identifie un terme de friction faisant intervenir la vitesse du fluide u et un terme de diffusion Brownien à température θ . Le terme \mathcal{F} correspond en réaction à la force de friction exercée par les particules sur le fluide. Le terme \mathcal{E} peut être vu comme la somme d'un terme visant à la mise à l'équilibre des températures et d'un terme d'échange d'énergie dû à la puissance de \mathcal{F} .

Le bilan d'énergie du système (2.12)-(2.13)-(2.14) ainsi obtenu, en présence d'une force extérieure, est alors

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\mathbb{R}^N} n E dx + \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{v^2}{2} f dv dx \right) = \int_{\mathbb{R}^N} (\eta_p \rho V - \eta_f nu) \cdot \nabla_x \Phi dx,$$

et on montre de plus que l'entropie totale du système est dissipée

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \left(\int_{\mathbb{R}^N} n S dx + \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} f \ln(f) dv dx \right) \\ &= - \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} \left| \sqrt{\theta} \frac{\nabla_v f}{\sqrt{f}} + \frac{v - V}{\sqrt{\theta}} \sqrt{f} \right|^2 dv dx - \int_{\mathbb{R}^N} \int_{\mathbb{R}^N} f \frac{|V - u|^2}{\theta} dv dx \leq 0, \end{aligned}$$

où

$$S = -\frac{R}{\gamma-1} \ln(pn^{-\gamma}) = -\frac{R}{\gamma-1} \ln\left(R \frac{\theta}{n^{\gamma-1}}\right)$$

est l'entropie du fluide.

Dans le même esprit que pour le transfert radiatif, on s'intéresse à des régimes particuliers de paramètres. Pour T , L , $U = L/T$ et Θ un temps, une longueur, une vitesse et une température caractéristiques, on fait apparaître le temps et la vitesse caractéristiques de sédimentation de Stokes $\mathcal{T}_S = 1/\varphi$, $\mathcal{V}_S = |\eta_p|g\mathcal{T}_S$ et la vitesse moyenne liée à l'agitation thermique du système $\mathcal{V}_{th} =$

$\sqrt{\kappa\Theta/m_p}$. On renormalise les quantités en présence en $t = Tt'$, $(x_1, \dots, x_N) = L(x'_1, \dots, x'_N)$, $\theta = \Theta\theta'$, $v = \mathcal{V}_{th}v'$, $u = Uu'$, et on omet les ' pour plus de lisibilité. En notant

$$\begin{cases} \alpha = \frac{\rho_p}{\rho_f}, & \beta = \frac{\mathcal{V}_{th}}{U} \\ \varepsilon = \frac{T_S}{T}, & \eta = \frac{\mathcal{V}_S}{\varepsilon\mathcal{V}_{th}}, \end{cases}$$

on obtient donc le système adimensionné

$$\begin{cases} \partial_t f + \beta v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\varepsilon} \left(-\text{sgn}(\alpha - 1)\eta\varepsilon\nabla_x\Phi \cdot \nabla_v f + \text{div}_v \left(\left(v - \frac{u}{\beta} \right) f + \theta\nabla_v f \right) \right) \\ \partial_t n + \text{div}_x(nu) = 0, \\ \partial_t(nu) + \text{Div}_x(nu \otimes u) + \nabla_x(Rn\theta) = \frac{\alpha}{\varepsilon} (\rho(\beta V - u) - \text{sgn}(1 - \alpha)\eta\varepsilon\beta n\nabla_x\Phi), \\ \partial_t \left(\frac{n\|u\|^2}{2} + \frac{Rn\theta}{\gamma - 1} \right) + \text{div}_x \left(\left(\frac{\|u\|^2}{2} + \frac{R\gamma\theta}{\gamma - 1} \right) nu \right) = \frac{1}{\varepsilon} (\alpha\beta V \cdot (\beta V - u) + \alpha N\beta^2\rho(\theta_p - \theta) - \text{sgn}(1 - \alpha)\alpha\eta\varepsilon\beta nu \cdot \nabla_x\Phi), \end{cases}$$

Le régime particulier, nommé « bubbling », auquel nous nous sommes intéressés est caractérisé par la limite

$$\varepsilon \rightarrow 0, \quad \beta = \eta = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}, \quad \alpha = \varepsilon,$$

dans laquelle la masse des particules est supposée extrêmement faible. Le système devient donc

$$\begin{cases} \partial_t f + \frac{v}{\sqrt{\varepsilon}} \cdot \nabla_x f = \frac{\eta\varepsilon\nabla_x\Phi \cdot \nabla_v f}{\sqrt{\varepsilon}} + \frac{\text{div}_v \left(\left(v - \frac{u}{\beta} \right) f + \theta\nabla_v f \right)}{\varepsilon} \\ \partial_t n + \text{div}_x(nu) = 0, \\ \partial_t(nu) + \text{Div}_x(nu \otimes u) + \nabla_x(Rn\theta) = \frac{\rho(V - \sqrt{\varepsilon}u)}{\sqrt{\varepsilon}} - n\nabla_x\Phi, \\ \partial_t \left(\frac{n\|u\|^2}{2} + \frac{Rn\theta}{\gamma - 1} \right) + \text{div}_x \left(\left(\frac{\|u\|^2}{2} + \frac{R\gamma\theta}{\gamma - 1} \right) nu \right) = \frac{V \cdot (V - \sqrt{\varepsilon}u) + N\rho(\theta_p - \theta)}{\varepsilon} - nu \cdot \nabla_x\Phi, \end{cases}$$

À la limite $\varepsilon \rightarrow 0$, les deux températures θ_p et θ s'équilibrent et le système comprend notamment deux équations de convection-diffusion, une pour la densité des particules et une pour la température. Plus précisément, à l'aide d'un développement de Hilbert, on peut montrer que, au moins

formellement, le système à la limite s'écrit

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t n + \operatorname{div}_x(nu) = 0, \\ \partial_t \rho + \operatorname{div}_x(\rho u - \nabla_x(\rho\theta)) = -\operatorname{div}_x(\rho \nabla_x \Phi), \\ \partial_t(nu) + \operatorname{Div}_x(nu \otimes u + Rn\theta) = -\nabla_x(\rho\theta) + (\rho - n)\nabla_x \Phi, \\ \partial_t \left(n \left(\frac{\|u\|^2}{2} + N\theta \right) + \frac{N}{2}\rho\theta \right) + \operatorname{div}_x \left(n \left(\frac{\|u\|^2}{2} + (R + N)\theta \right) u + \frac{N + 2}{2}\rho\theta u \right) \\ = \frac{N + 2}{2}\operatorname{div}_x(\theta^2 \nabla_x \rho) + \frac{2(N + 2)}{3}\operatorname{div}_x(\rho\theta \nabla_x \theta) \\ - \frac{N + 2}{2}\operatorname{div}_x(\rho\theta \nabla_x \Phi) + (\rho - n)u \nabla_x \Phi + \rho \|\nabla_x \Phi\|^2 - \nabla_x \Phi \cdot \nabla_x(\rho\theta). \end{array} \right.$$

En collaboration avec José Antonio Carrillo et Thierry Goudon, nous avons étudié [k3] numériquement le cas du système sans équation de température développé dans [K29], en supposant que la pression suivait une loi isotherme ou isentropique. Nous avons traité le régime diffusif « bubbling » décrit ci-dessus ainsi que le régime « flowing », qui mène à une asymptotique hyperbolique. Les calculs précédents pour le cas avec température, ainsi qu'un premier schéma numérique, ont fait l'objet d'un travail au CEMRACS, publié dans les Actes 2008 [k4]. L'année de post-doctorat que Benjamin Boutin, à présent maître de conférences à Rennes, a passée à l'INRIA Lille a été consacrée à l'élaboration de nouvelles techniques plus performantes et plus robustes, le rôle de la température dans le système pour $\varepsilon > 0$ demandant un traitement plus précis que nous ne l'avions cru de prime abord [k10].

Dans le paragraphe qui suit sont présentées les méthodes numériques développées pour traiter spécifiquement les cas d'asymptotique diffusive intervenant dans des systèmes couplés cinétique-Euler.

2.2 Présentation des schémas et résultats numériques

On suppose avoir discrétisé l'espace des vitesses, le temps et l'espace de manière uniforme, les constantes positives Δt , Δx et Δv désignant respectivement les pas de temps, d'espace et de vitesse. Les équations cinétiques sont posées en $2N + 1$ dimensions, et on s'intéresse au comportement macroscopique asymptotique, tout en voulant garder une description mésoscopique, ardue du fait que les vitesses de convection tendent vers l'infini en régime diffusif. L'idée est alors de tenter de comprendre comment se hiérarchisent les phénomènes en fonction de leur temps caractéristique, ce qui amène à considérer différentes fermetures. La notion de consistance du schéma est à comprendre ici dans le sens d'une sensibilité macroscopique aux perturbations et est calculée pour la densité : en effet, on désire avoir la possibilité de passer à la limite de la petite échelle. Une très large littérature a été consacrée depuis une quinzaine d'années aux schémas AP pour l'asymptotique hyperbolique comme pour l'asymptotique diffusive, sous l'égide de R. Caflisch, P. Degond, F. Filbet, S. Jin, A. Klar, R. Natalini, L. Pareschi, G. Russo... Les classes de schémas numériques AP que je vais présenter ici reposent, pour la première, sur une discrétisation de l'équation cinétique avec splitting en temps, pour la deuxième sur des méthodes de fermetures aux moments et, pour la dernière, sur une intégration projective, c'est à dire l'extrapolation sur un pas de temps macroscopique d'itérations en un pas de temps lié à la petite échelle. Le principe sous-jacent de cette dernière approche est de calculer une dérivée en temps sur une petite échelle, ce qui approche une projection sur les états d'équilibre, puis d'extrapoler la solution au temps macroscopique suivant en utilisant

cette pente. Les équations d'Euler sont approchées par le schéma anti-diffusif de type Lagrange-Projection (LP) de B. Després et F. Lagoutière [K40, K41], qui permet d'attribuer le comportement diffusif des simulations au régime des équations cinétiques que l'on veut étudier. Enfin, les conditions au bord sont adaptées à chacune des modélisations.

2.2.1 Équations modèles

Les équations cinétiques que nous avons étudiées prennent la forme

$$\partial_t f_\varepsilon + \frac{v}{\varepsilon} \partial_x f_\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} Q(f_\varepsilon) + S(f_\varepsilon), \quad (2.15)$$

où l'opérateur Q est linéaire, intégral ou différentiel en la variable v , et S est un terme source, Q et S étant d'ordre 0 en ε . Le couplage avec les équations d'Euler peut intervenir dans Q comme dans S . Plaçons-nous dans des cas simplifiés à l'extrême pour chacune des modélisations rencontrées :

– pour le transfert radiatif, l'opérateur Q est de la forme

$$Q(f) = \langle f \rangle - f. \quad (2.16)$$

L'espace V est le segment $[-1, 1]$ et μ est la moitié de la mesure de Lebesgue. Ces équations se rencontrent aussi dans la modélisation du transport de neutrons. Le point crucial est la forme simple des états d'équilibre qui implique une résolution explicite de l'équation (2.15) dans le cas homogène en espace, car la partie du terme source en Q est de moyenne nulle en v ; sous les hypothèses (2.1), les propriétés cruciales de l'opérateur Q sont

1. le caractère borné sur $L^q(V, d\mu)$, $1 \leq q \leq \infty$;
2. la conservativité, c'est-à-dire

$$\forall f \in L^1(V, d\mu), \langle Q(f) \rangle = 0;$$

3. le caractère dissipatif :

$$\forall f \in L^2(V, d\mu), \langle Q(f)f \rangle = - \langle \|f - \langle f \rangle\|^2 \rangle \leq 0;$$

4. le noyau de Q , ou états d'équilibre, est indépendant de v ;
5. et enfin l'inversibilité dans le sens où, pour tout $h \in L^2(V, d\mu)$ tel que $\langle h \rangle = 0$, il existe un unique $f \in L^2(V)$ tel que $Q(f) = h$ et $\langle f \rangle = 0$ d'après l'alternative de Fredholm.

En écrivant un développement de Chapman-Enskog $f_\varepsilon = \langle f_\varepsilon \rangle + \varepsilon g_\varepsilon$, on peut réécrire l'équation (2.15) comme

$$\begin{cases} \partial_t \langle f_\varepsilon \rangle + \langle v \partial_x g_\varepsilon \rangle = 0, \\ \partial_t g_\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon} (v \partial_x g_\varepsilon - \langle v \partial_x g_\varepsilon \rangle) = -\frac{1}{\varepsilon^2} (g_\varepsilon + v \partial_x \langle f_\varepsilon \rangle), \end{cases}$$

ce qui, puisque $g_\varepsilon = -v \partial_x \langle f_\varepsilon \rangle + \varepsilon \{ \langle v \partial_x g_\varepsilon \rangle - v \partial_x g_\varepsilon \} + O(\varepsilon^2)$, mène formellement à l'équation parabolique

$$\partial_t \langle f_\varepsilon \rangle - \langle v^2 \rangle \partial_{xx} \langle f_\varepsilon \rangle = O(\varepsilon^2). \quad (2.17)$$

D'après [K26], la différence $\| \langle f_\varepsilon \rangle - \rho \|_2$ où f_ε est solution de (2.15) et ρ solution de $\partial_t \rho - \langle v^2 \rangle \partial_{xx}^2 \rho = 0$ est au moins d'ordre 1 en ε quand $f_\varepsilon(t=0)$ est une petite perturbation d'un état constant ;

– pour la pollution, on résume Q à l'opérateur de Fokker-Planck avec friction

$$Q(f) = \partial_v(vf + \partial_v f) = \partial_v(e^{-v^2/2}\partial_v(e^{v^2/2}f)),$$

qu'il est plus difficile de traiter explicitement, même si la propriété de conservation de Q est toujours vérifiée et que l'entropie est dissipée. L'espace V est \mathbb{R} et la mesure $d\mu(v) = e^{-v^2/2}dv/\sqrt{2\pi}$.

Dans la suite, on fera souvent référence à des opérateurs de décentrage amont \mathbb{D} et aval $\bar{\mathbb{D}}$ en espace définis par, pour $(\phi_j)_{j \in \mathbb{Z}}$,

$$[\mathbb{D}_j \phi]_i = \begin{cases} -v(\phi_j - \phi_{j-1}) & \text{si } v \in V_+, \\ -v(\phi_{j+1} - \phi_j) & \text{si } v \in V_-, \end{cases} \quad [\bar{\mathbb{D}}_j \phi]_i = \begin{cases} -v(\phi_{j+1} - \phi_j) & \text{si } v \in V_+, \\ -v(\phi_j - \phi_{j-1}) & \text{si } v \in V_-, \end{cases} \quad (2.18)$$

utilisés ici comme discrétisation modèle pour des équations de type transport.

Dans les cas étudiés ici, on s'intéresse au couplage d'équations cinétiques en régime diffusif, c'est-à-dire à vitesses de propagation tendant vers l'infini en $O(1/\varepsilon)$, et d'équations hyperboliques, à vitesses de propagation finie. D'un point de vue numérique, il y a trois conditions CFL à considérer : $\Delta t = O(\Delta x)$, liée aux équations d'Euler, $\Delta t = O(\varepsilon \Delta x)$ due à l'équation cinétique et $\Delta t = O(\Delta x^2)$, CFL naturelle de l'équation de diffusion-limite. Lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, seules restent la première et la troisième conditions. Cependant, la troisième englobant la première, on pourrait être tenté d'adopter uniformément la CFL $O(\Delta x^2)$. L'inconvénient est alors que le très grand nombre d'itérations du schéma LP fait apparaître de la diffusion numérique. Pour pallier ce problème, on fait appel à la technique du sous-cyclage : pour un pas de temps Δt_n de l'ordre de Δx , appelé *pas de temps hyperbolique*, on procède à une itération du schéma LP et à $O(1/\Delta x)$ itérations du schéma pour l'équation cinétique en limite diffusive calculées avec un pas de temps *parabolique* Δt_p de l'ordre de Δx^2 .

2.2.2 Schémas cinétiques discrets (SCD)

Pour le cas de l'opérateur de type relaxation (2.16), nous nous sommes inspirés des schémas cinétiques discrets développés par D. Aregba-Driollet et R. Natalini [K22]. En effet, l'idée est d'utiliser la résolution explicite de l'équation homogène en espace : un schéma de splitting en temps faisant alterner la résolution de l'équation différentielle et la résolution d'une équation de transport paraît alors indiqué. Dans le cas de la convergence vers un régime hyperbolique, on peut traiter le petit paramètre sans autre complication [K22]. Cependant, pour l'asymptotique diffusive se pose le problème de la croissance des vitesses de transport en $O(1/\varepsilon)$. La solution proposée dans [k1] est de faire intervenir les fluctuations $g_\varepsilon = (f_\varepsilon - \langle f_\varepsilon \rangle)/\varepsilon$ comme inconnue et d'utiliser le développement de Chapman-Enskog associé $f_\varepsilon = \langle f_\varepsilon \rangle + \varepsilon g_\varepsilon$ pour transformer la singularité de convection v/ε en v : au lieu de considérer l'équation (2.15), on fait un splitting de Strang sur

$$\partial_t f_\varepsilon + v \partial_x \left(\frac{f - \langle f_\varepsilon \rangle}{\varepsilon} \right) = \frac{Q(f) - v \partial_x \langle f_\varepsilon \rangle}{\varepsilon^2} + S(f_\varepsilon), \quad (2.19)$$

le nouvel opérateur $Q - \varepsilon v \partial \langle f_\varepsilon \rangle$ étant toujours de moyenne nulle, ce qui mène à l'algorithme en f et g

1. résoudre sur un demi-intervalle de temps l'équation de type convection

$$\partial_t f_\varepsilon + v \partial_x g_\varepsilon = S(f_\varepsilon)$$

2. résoudre sur un intervalle de temps l'équation différentielle de type projection sur les états d'équilibre

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} f_\varepsilon = \frac{\langle f_\varepsilon \rangle - f_\varepsilon - \varepsilon v \partial_x \langle f_\varepsilon \rangle}{\varepsilon^2} \\ \frac{d}{dt} g_\varepsilon = \frac{-g_\varepsilon - v \partial_x \langle f_\varepsilon \rangle}{\varepsilon^2} \end{cases}$$

sous la forme d'une combinaison convexe, $\langle f_\varepsilon \rangle$ étant constante dans cette étape,

$$\begin{cases} g_\varepsilon(t + \Delta t) = e^{-\Delta t/\varepsilon^2} g_\varepsilon(t) + (1 - e^{-\Delta t/\varepsilon^2})(-v \partial_x \langle f_\varepsilon(t) \rangle) \\ f_\varepsilon(t + \Delta t) = e^{-\Delta t/\varepsilon^2} f_\varepsilon(t) + (1 - e^{-\Delta t/\varepsilon^2}) \langle f_\varepsilon(t) \rangle + O(\varepsilon) \end{cases} \quad (2.20)$$

3. répéter l'étape 1.

Dans l'étape 1, on choisit la discrétisation amont, afin de respecter au mieux le sens de propagation pour chacune des équations et on utilise une discrétisation aval dans l'étape 2 pour le terme en $\partial_x \langle f_\varepsilon \rangle$ afin de s'assurer qu'on obtienne bien, à la limite $\varepsilon = 0$, le schéma explicite centré pour l'équation de diffusion correspondant à (2.17) pour $S = 0$. L'obtention de cette limite à partir du schéma s'apparente beaucoup à la méthode utilisée pour dériver l'équation de diffusion macroscopique par développement de Hilbert. L'intérêt est la simplicité de mise en œuvre, qui permet de traiter les couplages avec facilité, les termes singuliers en ε se retrouvant seulement dans les coefficients de la combinaison convexe (2.20) en $\exp(-\Delta t/\varepsilon^2)$ qui renferment les échelles en temps en présence, Δt et ε^2 . Cependant, à $\varepsilon > 0$, la positivité de f_ε n'est pas assurée à cause de l'étape de type transport, même si elle est observée dans les faits quand $\varepsilon \rightarrow 0$. Pour le cas de l'équation de Fokker-Planck, la résolution de l'équation homogène en espace reposant sur un noyau de convolution, l'étape de projection ne se résout pas explicitement. Cependant, la limite qui nous intéresse étant à $\Delta t, \Delta x$ fixé et $\varepsilon \rightarrow 0$, les formules données par J.-A. Carrillo et G. Toscani [K30] nous ont permis d'élaborer une stratégie analogue, en considérant le développement limité de la solution de l'équation différentielle en $\exp(-\Delta t/\varepsilon^2)$. La difficulté numérique supplémentaire tient en le traitement des termes différentiels d'ordre 1 en v , provenant de la gravité. Pour l'opérateur de type relaxation, on montre [k11] en faisant une analyse de stabilité à la Von Neumann que la stabilité L^2 du schéma SCD repose sur une condition uniforme en ε de type parabolique et que l'erreur de consistance en ρ est d'ordre 1 en temps et en ε et 2 en espace. Sous la condition CFL uniforme, le schéma est donc uniformément d'ordre 1 en temps et en ε .

2.2.3 Schémas issus de fermetures par minimisation d'entropie (M)

Le but que nous souhaitons atteindre étant de garder une approximation mésoscopique convenable quand $\varepsilon \rightarrow 0$, on pourrait être tenté d'approcher f_ε par $\rho - \varepsilon v \partial_x \rho$, avec ρ solution de l'équation de diffusion limite (3.5), approximation dite \mathbb{P}_1 résultant du développement de Hilbert. Cependant,

pas plus que pour les schémas cinétiques discrets, il n'y a garantie de préservation de la positivité de f_ε qui impliquerait également la propriété de flux limité

$$\left| \left\langle \frac{v}{\varepsilon} f_\varepsilon \right\rangle \right| \leq \frac{\|v\|_{L^\infty(V)}}{\varepsilon} \langle f_\varepsilon \rangle,$$

l'espace discret des vitesses étant supposé fini et les vitesses de propagation également.

Pour assurer la positivité au moyen d'une approximation de type \mathbb{P}_1 ou pour retrouver la vitesse finie de propagation menant à l'équation de diffusion ont été introduites des méthodes faisant apparaître un système d'équations satisfaites par les moments d'ordre 0 à k où on a imposé une fermeture permettant d'exprimer le moment d'ordre $k+1$ en fonction de ces derniers [K32]. On obtient alors des équations macroscopiques, dont on dérive des schémas en introduisant des équations de relaxation [K50, K37]. Je détaille ci-dessous le cas de la fermeture par le premier moment et évoque le résultat pour la fermeture suivante.

Ainsi, la conservation de la masse

$$\partial_t \rho_\varepsilon + \partial_x J_\varepsilon = 0, \quad (2.21)$$

où $\rho_\varepsilon := \langle f_\varepsilon \rangle$ et $J_\varepsilon := \langle v f_\varepsilon \rangle / \varepsilon$, mène à l'équation

$$\partial_t \rho - \partial_x \left(\frac{\rho}{\varepsilon} \mathbb{G} \left(\varepsilon \frac{\partial_x \rho}{\rho} \right) \right) = 0, \quad (2.22)$$

obtenue en développant f_ε comme $f_\varepsilon = \exp(a_0 + \varepsilon a_1 + \dots)$ et en considérant la fonction $\mathbb{F} : \beta \mapsto \langle e^{\beta v} \rangle$ et $\mathbb{G} : \beta \mapsto \mathbb{F}'(\beta) / \mathbb{F}(v)$. Cela permet d'approcher la distribution au moyen de la formule

$$\tilde{f}_\varepsilon(t, x, v) = \frac{\rho(t, x)}{Z(t, x)} \exp \left(-\varepsilon v \frac{\partial_x \rho}{\rho} \right) \quad (2.23)$$

où Z permet de normaliser $\langle f_\varepsilon \rangle$ à ρ . La difficulté inhérente à la discrétisation de (2.22) est le choix de décentrage pour chacune des dérivées en x , le signe des vitesses ayant disparu dans la moyennisation. La méthode développée consiste alors à introduire un système de relaxation

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x J = 0, \\ \partial_t J + \frac{\zeta^2}{\varepsilon^2} \partial_x \rho = -\frac{1}{\alpha} \left[J + \frac{\rho}{\varepsilon} \mathbb{G} \left(\varepsilon \frac{\partial_x \rho}{\rho} \right) \right], \end{cases}$$

où $\alpha, \zeta > 0$ et dont la limite en $\alpha \rightarrow 0$ peut être vue comme étant (2.22). La densité est alors scindée en deux quantités $f_\pm = \rho/2 \pm \varepsilon J/(2\mu)$ solutions exactes d'une équation cinétique à deux vitesses opposées $\pm \zeta$

$$\partial_t f_\pm \pm \frac{\zeta}{\varepsilon} \partial_x f_\pm = \frac{1}{\alpha} \left[\frac{\rho}{2} - f_\pm \mp \frac{\rho}{2\zeta} \mathbb{G} \left(\varepsilon \frac{\partial_x \rho}{\rho} \right) \right].$$

Pour obtenir le schéma numérique, on applique le même principe de splitting que pour SCD en passant à la limite $\alpha = 0$, ce qui donne

$$\rho^{n+1} = \rho^n + \Delta t \left\{ \mathbb{D}_+ \left[\frac{\rho^n}{2\varepsilon\mu} \mathbb{G} \left(\frac{\varepsilon \bar{\mathbb{D}}_+ \rho^n}{\mu \rho^n} \right) \right] + \mathbb{D}_- \left[\frac{\rho^n}{2\varepsilon\mu} \mathbb{G} \left(\frac{\varepsilon \bar{\mathbb{D}}_- \rho^n}{\mu \rho^n} \right) \right] \right\}.$$

Dans la limite $\varepsilon = 0$, ce schéma devient la discrétisation classique de l'équation de diffusion. Intéressons-nous maintenant à une fermeture à deux moments. En adjoignant à (2.21) la conservation de la quantité de mouvement

$$\partial_t J_\varepsilon + \partial_x \mathbb{P}_\varepsilon = 0,$$

avec $\mathbb{P}_\varepsilon := \langle v^2 f_\varepsilon \rangle$, on peut utiliser le principe de fermeture par minimisation d'entropie, dû à D. Levermore (voir les références dans [K32]), et qui consiste à minimiser, à ρ, J donnés, la quantité $\langle f \ln(f) \rangle$ sous les contraintes $\langle (1, v/\varepsilon) f \rangle = (\rho, J)$. Il s'agit du modèle M1, très populaire en transfert radiatif [K33]. En définissant $\psi : u \mapsto (\mathbb{F}''/\mathbb{F}) \circ \mathbb{G}^{-1}(u)$, qui vérifie $\psi(0) = d\langle v^2 \rangle$, on obtient le système

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x J = 0, \\ \partial_t J + \partial_x (\rho \psi(\varepsilon J/\rho)) = -J, \end{cases} \quad (2.24)$$

la distribution approchée étant alors donnée par

$$\tilde{f}_\varepsilon(t, x, v) = \rho(t, x) \frac{\exp(v \mathbb{G}^{-1}(\varepsilon J/\rho(t, x)))}{\mathbb{F} \circ \mathbb{G}^{-1}(\varepsilon J/\rho(t, x))}.$$

Comme pour la fermeture (2.22), on choisit d'introduire un système de relaxation augmenté en considérant une inconnue supplémentaire, des vitesses conjuguées et un petit paramètre α , puis le schéma obtenu est écrit à la limite $\alpha = 0$.

2.2.4 Intégration projective (IP)

L'idée de l'intégration projective vient de méthodes employées pour les grands systèmes en chimie où il peut y avoir couplage entre réactions lentes et rapides, ce qui fait apparaître différentes échelles de temps [K35]. Le principe est de calculer une dérivée en temps petit en faisant un nombre fini K , indépendant de ε , d'itérations du schéma d'Euler explicite pour l'équation cinétique sur un pas de temps δt , puis d'extrapoler la solution approchée sur un pas de temps parabolique Δt grand devant δt . On définit donc

$$S_{\delta t} : f \in \mathbb{R}^{2p} \mapsto f - \frac{\delta t}{\varepsilon} v \mathcal{D}(f) + \frac{\delta t}{\varepsilon^2} (\langle f \rangle - f),$$

où \mathcal{D} désigne l'opérateur centré de discrétisation en espace. L'algorithme est alors le suivant, pour $f^n \in \mathbb{R}^{2p} \times \mathbb{R}^J$, où J désigne le nombre de points de discrétisation :

1. on itère K fois l'opérateur $S_{\delta t}$

$$f^{n,k} = (S_{\delta t})^k f^n, \quad 1 \leq k \leq K,$$

2. on calcule une approximation de la dérivée en temps

$$\delta f = \frac{f^{n,K} - f^{n,K-1}}{\delta t}$$

3. on calcule f^{n+1}

$$f^{n+1} = f^{n,K} + (\Delta t - K\delta t) \frac{\delta f}{\delta t}.$$

Afin que la méthode d'intégration projective soit stable, il faut s'assurer que le spectre de l'opérateur $S_{\delta t}$ est inclus dans la réunion de deux boules disjointes B_0 et B_1 définies par

$$B_0 = B\left(0, \left(\frac{\delta t}{\Delta t}\right)^{1/(K-1)}\right) \quad \text{et} \quad B_1 = B\left(1 - \frac{\delta t}{\Delta t}, \frac{\delta t}{\Delta t}\right)$$

où $B(a, r)$ est le disque du plan complexe de centre a et de rayon $r > 0$. Naturellement, B_0 et B_1 sont incluses dans la région de stabilité $D(0, 1)$ et sont représentatives de la séparation des échelles de temps : B_0 contient les valeurs propres proches de 0 qui sont amorties très rapidement par l'équation cinétique alors que celles contenues dans la boule B_1 correspondent aux modes persistants qui subsistent en temps long. L'analyse de Von Neumann de l'opérateur $S_{\delta t}$ à l'aide des séries de Fourier et de l'étude de la perturbation d'une matrice de projection mène à la conclusion que le schéma IP est L^2 stable sous la condition CFL parabolique $\delta t = \varepsilon^2$ et $d\Delta t/\Delta x^2 \leq 1/4$ où $d = \langle v^2 \rangle$. De plus, il suffit de $K = 4$ pour assurer la séparation entre B_0 et B_1 . Il est à noter que, avec ce choix $\delta t = \varepsilon^2$, la première étape s'apparente, comme pour SCD, à une projection sur les états d'équilibre car $S_{\varepsilon^2}(f) = \langle f \rangle - \varepsilon v \mathcal{D}(f)$. L'analyse de consistance sur $\langle f \rangle$ conclut à l'ordre 1 en temps, 2 en espace et 2 en ε , d'où un ordre de convergence sous CFL de 2 en espace et 2 en ε . Nous travaillons actuellement à l'élaboration de schémas IP pour des équations cinétiques dont la limite mène à des systèmes hyperboliques de lois de conservation non linéaires, dans l'esprit des travaux de D. Aregba-Driollet et R. Natalini [K22], mais dans l'optique de prouver que, contrairement aux schémas impliquant une méthode de splitting et ne pouvant donc être portés à plus que deux en ordre en temps sans faire apparaître des coefficients négatifs, l'intégration projective permet d'obtenir des approximations beaucoup plus précises sans ces restrictions.

2.3 Comparaison

Les tests menés pour les schémas SCD, M et IP ont été de deux sortes : on a considéré d'une part la résolution d'un problème de Cauchy avec différentes conditions initiales et d'autre part le problème de Su et Olson, introduit comme modèle de base en transfert radiatif [K51].

2.3.1 Equation cinétique

Afin d'illustrer la différence dans la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ entre un schéma bien adapté à une équation cinétique sans petit paramètre et SCD, nous avons procédé à des simulations numériques d'un schéma semi-lagrangien à oscillations contrôlées (SL-WENO), développé pour des équations de type Vlasov par J. A. Carrillo et F. Vecil [K31], et qui consiste à faire un splitting en temps en interpolant d'une part par des méthodes de type WENO les projections des caractéristiques rétrogrades sur le maillage des équations de transport libre et, d'autre part, en résolvant exactement l'équation différentielle

$$\frac{d}{dt} f_\varepsilon = \frac{\langle f_\varepsilon \rangle - f_\varepsilon}{\varepsilon}.$$

Le premier résultat visible sur la Figure 2.3

montre la comparaison entre la résolution par SL-WENO et deux versions du schéma SCD, *no update* représentant celle exposée au paragraphe 2.2.2 et *update* correspondant à une mise à jour des fluctuations $g^{n+1} = (\rho^{n+1/2} - f^{n+1/2})/\varepsilon$, qui, bien que paraissant naturelle, engendre

des oscillations et est moins performante. Les domaines de validité de SL-WENO d'une part (au-dessus de $\varepsilon \sim 0.026$) et de SCD apparaissent clairement sur cette figure. L'explosion de l'erreur de SL-WENO pour ε petit résulte de l'utilisation des caractéristiques alors que les vitesses de propagation sont en $O(\varepsilon^{-1})$, d'où la perte d'information, le maillage en espace étant fixé. Les ordres de convergence en ε pour ρ qui ressortent des simulations effectuées pour des données initiales dissymétriques (voir Figure 2.4) et symétriques en vitesse sont 1.3 pour SCD et M, et 2 pour IP ce qui est cohérent avec le résultat continu énoncé dans [K26] et avec les résultats de consistance exposés dans [k7, k11]. L'erreur devient constante quand ε est trop petit du fait de l'estimation de consistance en Δx^2 du schéma à la limite.

2.3.2 Problème de Su et Olson

Il s'agit de coupler l'équation cinétique pour les photons à une équation différentielle pour la température du fluide ($\Theta = T^4$) par un terme d'absorption/émission

$$\begin{cases} \partial_t f_\varepsilon + \frac{v}{\varepsilon} f_\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} (\langle f_\varepsilon \rangle - f_\varepsilon) + \sigma_a (\Theta_\varepsilon - \langle f_\varepsilon \rangle) + S, \\ \partial_t \Theta_\varepsilon = \sigma_a (\langle f_\varepsilon \rangle - \Theta_\varepsilon), \end{cases}$$

S étant un terme source ne dépendant que de la variable d'espace. Au temps initial $t = 0$, le système est à l'équilibre thermique, c'est-à-dire $f_\varepsilon(t = 0) = \Theta(t = 0) = 10^{-10}$.

On termine ce chapitre par les résultats à $t = 1$ pour la densité des radiations ρ , la fonction Θ et le rapport $\varepsilon J/\rho$, montrant la propriété de flux limité (Figure 2.5). Les échelles sont légèrement différentes du fait du terme source S , qui n'est pas le même dans les deux cas. Cependant, on observe la similarité des profils pour ρ et Θ , la propriété de flux limité de IP étant comparable à celles obtenues pour les autres schémas AP proposés.

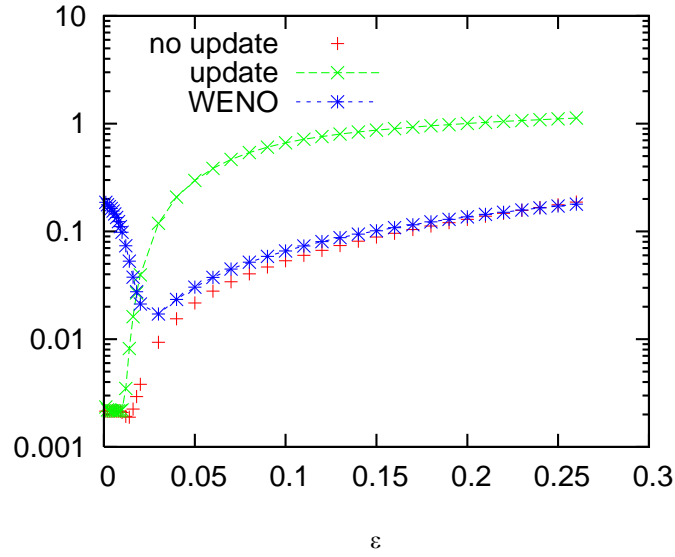


Figure 2.3 – Erreur en norme $L^2_{t,x,v}$ de la distribution f par rapport à la solution de l'équation de la chaleur avec condition initiale symétrique en x et en v , $f^0(x, v) = 2$ si $-0.5 \leq x \leq 0.5$ et $-0.5 \leq v \leq 0.5$, et $f^0(x, v) = 1$ sinon, sur un maillage 100×100 en (x, v) .

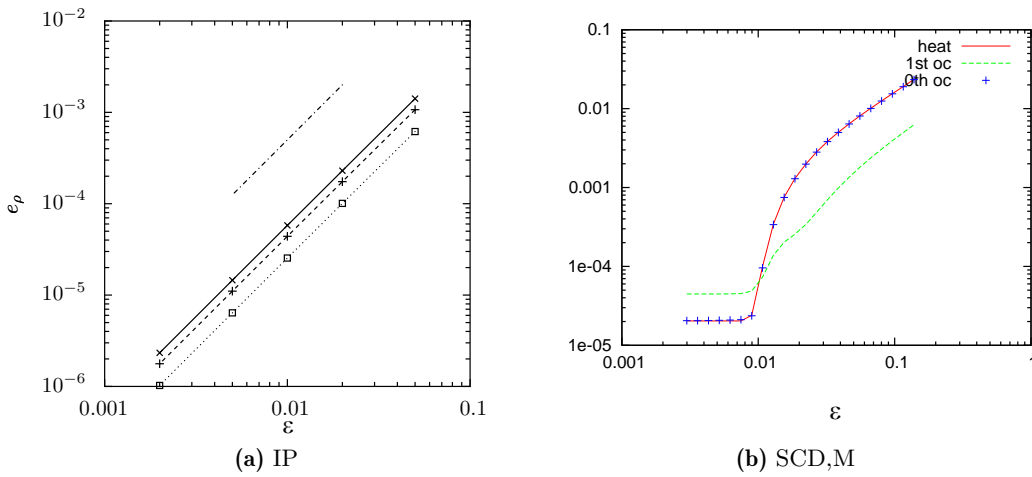
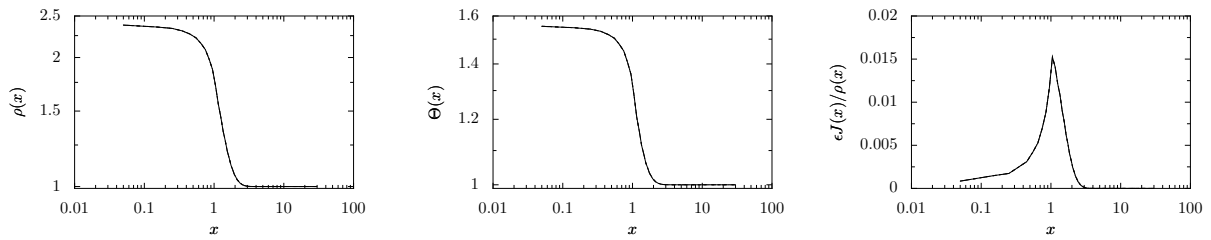
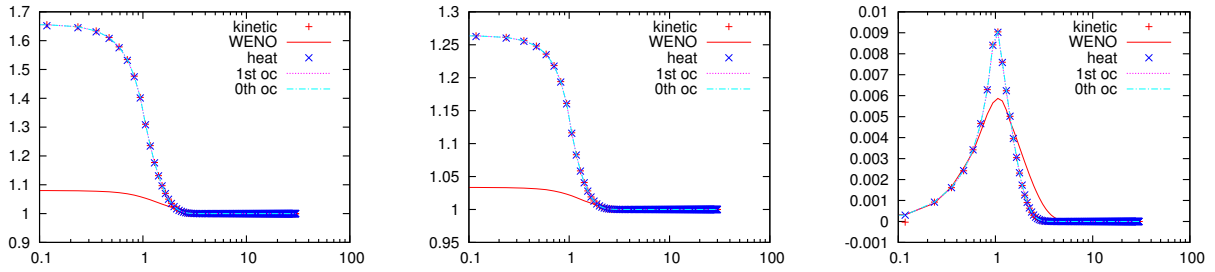


Figure 2.4 – Comparaison des ordres en ε sur ρ des schémas SCD, M et IP pour des données asymétriques en vitesse, les courbes pour IP représentant les erreurs obtenues pour différents temps finaux.



(a) IP



(e) SCD,M

Figure 2.5 – Comparaison à $t = 1$ des solutions pour SCD, M et IP (problème de Su-Olson) pour une donnée initiale $\rho = \Theta = 1e - 10$ et $\varepsilon = 0.05$.

Équations cinétiques

- [K21] A. Amsden, J. Ramshaw, P. O'Rourke, and J. Dukowicz. Kiva : a computer program for two- and three-dimensional fluid flows with chemical reactions and fuel sprays. Technical report, Los Alamos National Laboratory, 1985.
- [K22] D. Aregba-Driollet and R. Natalini. Discrete kinetic schemes for multidimensional systems of conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.*, 37(6) :1973–2004 (electronic), 2000.
- [K23] C. Baranger. Modélisation, étude mathématique et simulation des collisions dans les fluides complexes. *Thèse de doctorat*, ENS Cachan, 2004.
- [K24] C. Bardos, F. Golse, and B. Perthame. The Rosseland approximation for the radiative transfer equations. *Comm. Pure Appl. Math.*, 40(6) :691–721, 1987.
- [K25] C. Bardos, F. Golse, B. Perthame, and R. Sentis. The nonaccretive radiative transfer equations : existence of solutions and Rosseland approximation. *J. Funct. Anal.*, 77(2) :434–460, 1988.
- [K26] C. Bardos, R. Santos, and R. Sentis. Diffusion approximation and computation of the critical size. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 284(2) :617–649, 1984.
- [K27] C. Buet and B. Després. Asymptotic analysis of fluid models for the coupling of radiation and hydrodynamics. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 85 :385–418, 2004.
- [K28] C. Buet and B. Després. Asymptotic preserving and positive schemes for radiation hydrodynamics. *JCP*, 215(2) :717–740, 2006.
- [K29] J. A. Carrillo and T. Goudon. Stability and asymptotic analysis of a fluid–particles interaction model. *Comm. PDE*, 31 :1349–1379, 2008.
- [K30] J. A. Carrillo and G. Toscani. Exponential convergence toward equilibrium for homogeneous Fokker-Planck-type equations. *Math. Methods Appl. Sci.*, 21(13) :1269–1286, 1998.
- [K31] J. A. Carrillo and F. Vecil. Nonoscillatory interpolation methods applied to Vlasov-based models. *SIAM J. Sci. Comput.*, 29(3) :1179–1206 (electronic), 2007.
- [K32] J.-F. Coulombel, F. Golse, and T. Goudon. Diffusion approximation and entropy-based moment closure for kinetic equations. *Asymptot. Anal.*, 45 :1–39, 2005.
- [K33] B. Dubroca and J.-L. Feugeas. Étude théorique et numérique d'une hiérarchie de modèles aux moments pour le transfert radiatif. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 329(10) :915–920, 1999.
- [K34] B. Dubroca, M. Seaid, and I. Teleaga. A consistent approach for the coupling of radiation and hydrodynamics at low Mach number. *J. Comput. Phys.*, 225(1) :1039–1065, 2007.
- [K35] C. Gear and I. Kevrekidis. Projective methods for stiff differential equations : Problems with gaps in their eigenvalue spectrum. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 24(4) :1091–1106, 2003.
- [K36] S. Jin. Efficient asymptotic-preserving (AP) schemes for some multiscale kinetic equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(2) :441–454, 1999.
- [K37] S. Jin and Z. P. Xin. The relaxation schemes for systems of conservation laws in arbitrary space dimensions. *Comm. Pure Appl. Math.*, 48(3) :235–276, 1995.

- [K38] S. Kawashima and S. Nishibata. Shock waves for a model system of the radiating gas. *SIAM Journal On Mathematical Analysis*, 30(1) :95–117, OCT 1998.
- [K39] A. Klar and A. Unterreiter. Uniform stability of a finite difference scheme for transport equations in diffusive regimes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 40(3) :891–913 (electronic), 2002.
- [K40] F. Lagoutière. Modélisation mathématique et résolution numérique de problèmes de fluides compressibles à plusieurs constituants. *Thèse de doctorat*, Université Pierre et Marie Curie, 2000.
- [K41] F. Lagoutière. Analyse et approximation d'équations aux dérivées partielles en rapport avec la mécanique des fluides. *Habilitation à diriger des recherches*, Université Paris Diderot, 2008.
- [K42] C. Lin. Modèles mathématiques de la théorie du transfert radiatif. *Thèse de doctorat*, Université Lille 1, 2007.
- [K43] C. Lin, J.-F. Coulombel, and T. Goudon. Shock profiles for non-equilibrium radiating gases. *Phys. D*, 218(1) :83–94, 2006.
- [K44] C. Lin, J.-F. Coulombel, and T. Goudon. Asymptotic stability of shock profiles in radiative hydrodynamics. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 345(11) :625–628, 2007.
- [K45] R. Lowrie, J. Morel, and J. Hittinger. The coupling of radiation and hydrodynamics. *Astrophysical Journal*, 521(1) :432–450, Part 1 AUG 1999.
- [K46] J. Mathiaud. Étude de systèmes de type gaz-particules. *Thèse de doctorat*, ENS Cachan, 2007.
- [K47] A. Mellet and A. Vasseur. Global weak solutions for a Vlasov-Fokker-Planck/Navier-Stokes system of equations. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 17(7) :1039–1063, 2007.
- [K48] A. Mellet and A. Vasseur. Asymptotic analysis for a Vlasov-Fokker-Planck/compressible Navier-Stokes system of equations. *Comm. Math. Phys.*, 281(3) :573–596, 2008.
- [K49] D. Mihalas and B. Mihalas. *Foundations of Radiation Hydrodynamics*. Oxford University Press, 1984.
- [K50] G. Naldi, L. Pareschi, and G. Toscani. Relaxation schemes for partial differential equations and applications to degenerate diffusion problems. *Surveys Math. Indust.*, 10(4) :315–343, 2002.
- [K51] B. Su and G. L. Olson. An analytical benchmark for non-equilibrium radiative transfer in an isotropically scattering medium. *Annals of Nuclear Energy*, 24(13) :1035 – 1055, 1997.
- [K52] Y. B. Zeldovich and Y. P. Raizer. *Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena*. Academic Press, Mineola, N.Y., 1966.

Chapitre 3

Phénomènes de transport en mécanique statistique

Dans ce chapitre sont décrits les travaux menés en collaboration avec Stephan de Bièvre, Paul Parris et Bénédicte Aguer, dont j'ai coencadré la thèse avec S. De Bièvre à l'Université Lille 1 [m12, m13, m14]. Il s'agit d'étudier numériquement les propriétés de transport de modèles hamiltoniens classiques décrivant la trajectoire d'une particule non confinée couplée à une infinité d'oscillateurs à température strictement positive.

3.1 Modèle physique

On considère le mouvement d'un ensemble de particules dans \mathbb{R}^N soumises à une force extérieure uniforme dérivant d'un potentiel dans un milieu ambiant, que l'on suppose être à température T , ce qui signifie que l'énergie cinétique moyenne microscopique des constituants du milieu (molécules pour un fluide, oscillateurs, etc.) est de l'ordre de $\kappa_B T$, où $\kappa_B = 1,3806504 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$, est la constante de Boltzmann. La variation de l'énergie de la particule lorsqu'elle traverse le milieu est la somme de deux contributions : une partie est dissipée lors des interactions microscopiques, par transfert d'énergie cinétique de la particule aux constituants, et l'autre partie fluctue du fait de l'agitation thermique interne du milieu. On parle alors de phénomène de fluctuation-dissipation. Si on considère que l'énergie caractéristique de la particule est très grande devant $\kappa_B T = 1/\beta$, le mouvement peut être décrit par l'équation différentielle déterministe

$$\ddot{q} + \varphi \dot{q} = -\nabla_q V(q), \quad t > 0, \quad (3.1)$$

où t est le temps, $q : t \mapsto q(t)$ la position de la particule, V le potentiel par unité de masse dont dérive la force et $\dot{\cdot}$ est la dérivée par rapport au temps. Les conditions initiales sont données par q^0 et $v^0 = \dot{q}(0)$. La constante φ « résume » les propriétés de dissipation du milieu, représentées par une force de friction opposée au mouvement et qui tend à ralentir la particule. Cette constante φ n'est a priori pas connue ni calculable. Cependant, pour $V(q) = -F \cdot q$ où F est un vecteur constant donné, la vitesse \dot{q} tend vers une constante $v_\infty = F/\varphi = \mu F$ où μ est appelée *mobilité*. On parle alors de *réponse linéaire* de la particule. Pour atteindre cette limite, la particule doit accélérer ou décélérer. Notons qu'une description mésoscopique naïve, à l'aide de la fonction de distribution f , peut être écrite ici sous la forme d'une équation cinétique conservative de type Vlasov en q variable d'espace et v variable de vitesse

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_q f = -\text{div}_v ((\nabla_q V - \varphi v) f) \quad (3.2)$$

non collisionnelle et dont les caractéristiques définissent les solutions de (3.1). Cependant, la description précédente n'est plus valide lorsque les particules sont à l'équilibre thermique avec le milieu, c'est à dire que la distribution du module de leurs vitesses suit la loi de densité (S_N surface de la sphère en dimension N)

$$(\beta/2\pi)^{N/2} S_N \|v\|^2 \exp(-\beta \|v\|^2/2),$$

dite distribution thermique de Maxwell-Boltzmann : on ne peut plus négliger la partie fluctuante de la force totale s'exerçant sur les particules. On décrit alors le mouvement microscopique au moyen de l'équation de Langevin

$$\ddot{q} + \varphi \dot{q} = F + \xi(t), \quad t > 0, \quad (3.3)$$

où $q^0, v^0 = \dot{q}(0)$ sont donnés et où ξ est une force aléatoire, d'espérance nulle et décorrélée en temps c'est à dire $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = C\delta(t-t')$ où $\langle \cdot \rangle$ représente la moyenne par rapport aux réalisations de ξ

et où C vaut $(\beta\mu)^{-1}$ (voir le calcul de Briels [M55] dans le cas de particules colloïdales dans un fluide). On en tire la relation d'Einstein, qui est une forme de théorème de fluctuation-dissipation, et qui relie la mobilité μ du milieu à la température T et à la constante de diffusion D :

$$\mu = \beta D. \quad (3.4)$$

Ici, la constante D est définie par la relation

$$\left\langle \|q(t) - q_0\|^2 \right\rangle_{t \rightarrow \infty} \sim 2Dt. \quad (3.5)$$

En effet, du fait des collisions auxquelles sont soumises les particules, le milieu devient diffusif, phénomène dit du mouvement Brownien, d'après les études menées par R. Brown, biologiste, sur la trajectoire de particules de pollen dans l'eau. L'équation cinétique correspondante est de type Vlasov/Fokker-Planck

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f - \nabla_x V \cdot \nabla_v f = \Delta_v Df + \varphi \operatorname{div}_v(vf) \quad (3.6)$$

(voir la dérivation dans le livre de Risken [M58], déjà rencontrée au chapitre précédent dans la modélisation de la pollution atmosphérique).

On s'intéresse au modèle dit du gaz de Lorentz, c'est à dire un système de particules supposées sans interaction entre elles mais soumises à des forces localisées dans des boules à supports disjoints.

3.2 Étude de la mobilité en dimension 1

Le gaz de Lorentz étudié ici est supposé dissipatif, car la particule influe sur le milieu. Les diffuseurs en présence sont des oscillateurs harmoniques. La force extérieure est constante égale à F et les forces d'interaction entre la particule et les oscillateurs sont localisées au voisinage de la particule et proportionnelles au déplacement de l'oscillateur affecté. Le temps est adimensionné de sorte que les particules soient de masse 1.

Le système peut alors être décrit par le hamiltonien

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}p^2 - F \cdot q + \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{1}{2}(\pi_k^2 + \omega^2 \phi_k^2) + \alpha \sum_{k \in \mathbb{Z}} \phi_k \chi_{[-\sigma, \sigma]}(q - ka) \quad (3.7)$$

où ϕ_k, π_k (resp. q, p) sont la position et le moment du k -ième oscillateur situé en $q_k = ka$ (resp. de la particule) et les constantes a et σ sont définies sur la Figure 3.1. La constante α mesure la force d'interaction, dans le sens où la position d'équilibre de l'oscillateur « descend » de $\phi_0 = 0$ à $\phi_\alpha = -\alpha/\omega^2$ quand il y a interaction, et χ_I est la fonction indicatrice de l'intervalle I (voir Figure 3.1). Entre deux oscillateurs, la particule n'est soumise qu'à la force F et est donc accélérée uniformément.

Les oscillateurs sont supposés de même fréquence ω , ce qui rend le « bain » monochromatique. L'énergie de couplage, qui correspond à l'énergie du système au repos, notée $-E_B = -\alpha^2/(2\omega^2)$, est obtenue quand la particule est au repos dans un oscillateur, dans sa position d'équilibre par conséquent abaissée, et tous les autres oscillateurs sont au repos $\phi_k = \pi_k = 0$.

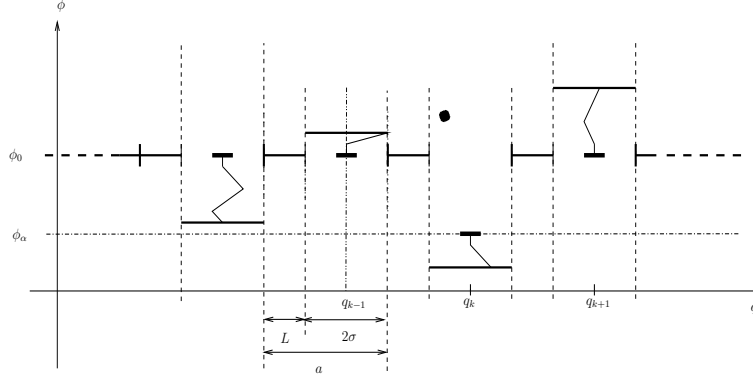


Figure 3.1 – Modèle couplé particule-oscillateurs

D'après certains travaux, il était impossible qu'une telle répartition de fréquences puisse mener à un *transport normal*, montrant un phénomène de diffusion classique. Cependant, pour ce gaz de Lorentz, S. De Bièvre, P. Parris et A. Silvius avaient déjà prouvé [M59] qu'en temps long il y a bien diffusion, la constante D se comportant comme une puissance de la température T suivant la grandeur de celle-ci : $D \underset{T \rightarrow 0}{\sim} T^{3/4}$ et $D \underset{T \rightarrow +\infty}{\sim} T^{5/2}$. Dans la continuité de ces travaux, nous avons montré numériquement et théoriquement que, sous l'influence d'une force extérieure, les particules ont asymptotiquement une vitesse limite linéaire en cette force, d'où la possibilité de définition d'une mobilité μ . De plus, la comparaison de μ et de βD nous a permis de conclure que ce gaz de Lorentz répond à une loi de type fluctuation-dissipation (3.4).

L'étude théorique de ce modèle repose sur l'analyse d'une marche aléatoire. Cependant, suivant la gamme de température dans laquelle se trouve le gaz de Lorentz, le comportement de la particule est très différent. À haute température, le moment caractéristique $p \sim \beta^{-1/2}$ des particules devient si grand que le temps mis à traverser un oscillateur est faible devant la période d'oscillation, ce qui a pour effet que la particule à haute vitesse initiale peut traverser un grand nombre d'obstacles sans rencontrer de barrière énergétique qui l'emprisonnerait dans un oscillateur ou la ferait retourner en arrière. Cependant, en traversant les oscillateurs, elle perd de l'énergie, ce qui correspond à la friction, et sa vitesse diminue, ce qui augmente la probabilité de se trouver face à une barrière énergétique comparable à son énergie cinétique. Dans le cas de basses températures, le mécanisme microscopique est différent : la particule subit de nombreuses réflexions et peut aussi rester enfermée longtemps dans un oscillateur. La constante de diffusion dépend de la probabilité de sortie d'un obstacle. Dans ces deux cas, nous fournissons donc une explication du comportement asymptotique à l'aide d'une marche aléatoire, inspirée du comportement microscopique de la mécanique hamiltonienne sous-jacente.

Pour les mêmes gammes de températures que celles ayant fourni des résultats quantitatifs sur la constante de diffusion dans [M59], il s'agit dans [m12, m13] d'appliquer une force extérieure uniforme non nulle mais destinée à tendre vers 0 afin de trouver la constante de mobilité μ du gaz de Lorentz définie comme limite du quotient de la vitesse asymptotique par la force, et de la relier à un théorème de fluctuation-dissipation (3.4). Dans les paragraphes suivants sont détaillés les raisonnements numériques et analytiques y ayant abouti.

3.3 Investigations numériques

Afin d'évaluer quantitativement le comportement statistique des particules, on tire aléatoirement leur vitesse initiale et les couples amplitude-phase des oscillateurs, au fur et à mesure des interactions, suivant la distribution thermique d'équilibre de Boltzmann à température T , c'est à dire la loi Gaussienne centrée de variance $1/\beta$ pour les vitesses des particules et la loi exponentielle de paramètre β pour l'énergie $E = \pi^2 + \omega^2 \phi^2$ des oscillateurs. Dans le cas d'une force extérieure F non nulle, on constate que, pour calculer explicitement la trajectoire d'une particule, il faut distinguer deux types de situations :

1. si la particule se trouve entre deux oscillateurs ($\exists k \in \mathbb{Z}/|q - ka| > \sigma$) ou à l'intérieur d'un oscillateur ($\exists k \in \mathbb{Z}/|q - ka| < \sigma$), son accélération est constante et vaut F ; les oscillateurs, quant à eux, évoluent selon leur propre période;
2. si la particule rencontre le bord d'un oscillateur ($\exists k \in \mathbb{Z}, \exists \varepsilon \in \{-1, 1\}/q - ka = \varepsilon\sigma$), elle est confrontée à une barrière énergétique de grandeur $|\alpha\phi_k|$ qui la fait retourner en arrière de manière élastique ou la laisse passer en modifiant son moment p . L'effet de l'interaction sur l'oscillateur est alors un changement de sa phase et de son amplitude.

L'intégration des équations du mouvement est donc très simple. Cependant, on s'intéresse au comportement en temps très long (entre 10^6 et 10^7 périodes d'oscillateurs), pour un nombre très important de trajectoires (entre 10^3 et 10^5) et cela pour des variations de F et des paramètres sans dimension $\beta E_B =: c_1$, $E_B/E_0 =: c_2$ et $2\sigma/L =: c_3$, où $E_0 := \sigma^2\omega^2$ représente l'énergie cinétique d'une particule traversant un oscillateur en exactement une période. Le défi numérique est de trouver un moyen raisonnable d'obtenir et de traiter ces données. Pour ce qui est de la programmation, les codes ont été réalisés en Fortran 90, puis lancés en parallèle sur environ 500 processeurs de la grille expérimentale Grid'5000 dont Lille est un site. Le temps requis pour obtenir des résultats a varié entre 10 minutes et une semaine. La première étape a été de retrouver le comportement diffusif exhibé dans [M59], afin de valider le code et de pouvoir être par la suite capable de calculer les constantes de diffusion nécessaires à l'étude de la relation d'Einstein (3.4). Ensuite, nous nous sommes intéressés au système en présence de force extérieures de faible intensité. Le déplacement linéaire des particules en temps long indique l'existence d'une vitesse asymptotique v_F dépendant de la force F (voir Figure 3.2). L'étude de cette vitesse (voir Figure 3.3) montre une dépendance linéaire en F pour des forces assez petites, ce qui permet de calculer la mobilité comme limite $\mu = \lim_{F \rightarrow 0} v_F/F$, qui est représentée en fonction de la température βE_B dans les Figures 3.4 (hautes températures) et 3.5 (basses températures).

En ce qui concerne les hautes températures, un modèle de marche aléatoire avec biais rend compte des résultats observés : en effet, l'énergie cinétique d'une particule, en moyenne β^{-1} , étant beaucoup plus élevée que les barrières énergétiques rencontrées, d'ordre $\sqrt{E_B\beta^{-1}}$, la plupart des particules ne subiront que très peu de réflexions. À travers une cellule de taille a , contenant un oscillateur et une zone vide, pour une vitesse v , elles traverseront les oscillateurs en moyenne en un temps $2\sigma/v$ faible devant la période $2\pi/\omega$ abandonnant ainsi une partie $\Delta E = -4E_B E_0/v^2$ de leur énergie à l'oscillateur et gagnant, si $v > 0$, ou perdant, si $v < 0$, une énergie Fa . La différence de vitesse lors du passage à travers une cellule de taille a est donc

$$\Delta v = -\frac{4E_B E_0}{v^3} + \frac{1}{|v|} F a. \quad (3.8)$$

La conséquence est qu'au-delà d'un seuil critique de la force F les particules sont accélérées indéfiniment et il n'y a pas de vitesse limite. Dans le cas contraire, elles perdent de la vitesse, au

point de recevoir aléatoirement une haute énergie d'un des oscillateurs, mécanisme dont on peut supposer qu'il rétablit une distribution thermique pour les particules. En calculant alors la distance moyenne parcourue par la particule avant de ralentir et le temps caractéristique associé, on trouve une vitesse limite, quotient de ces deux quantités, et qui est linéaire en F . On en tire une prédiction de la mobilité compatible avec les résultats montrés dans la Figure 3.4.

$$\mu = \frac{15}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{E_B}{E_0^2} (\beta E_B)^{-3/2}.$$

Pour ce qui est des basses températures, le problème de la faible fraction de particules qui sort du premier oscillateur et le fait que la probabilité d'être dans une zone sans oscillateur est proportionnelle à $\exp(-\beta E_B)$ [M59] compliquent la tâche numérique. En particulier, une particule emprisonnée ne contribuant pas à la mobilité, on ne calcule pas sa trajectoire. Ces cas sont écartés par un test immédiat déduit d'une analyse tirée de [M54] : en effet, pour $(q, p, \phi, \pi) \in [0, 2\sigma] \times \mathbb{R}^3$, l'énergie totale du système particule-oscillateur s'écrit

$$E = \frac{1}{2}p^2 - F(q - 2\sigma) + \frac{1}{2}(\pi^2 + (\phi + \alpha)^2) - E_B - 2F\sigma,$$

et les conditions nécessaires et suffisantes pour qu'une particule puisse quitter un oscillateur sont

$$2E_B - \frac{1}{2}p^2 - F(q - 2\sigma) \geq \frac{1}{2}(\pi^2 + (\phi + \alpha)^2) \geq \frac{1}{4E_B} \left(\frac{1}{2}(\pi^2 + (\phi + \alpha)^2) - 2E_B \right)^2.$$

Pour analyser la dépendance de la mobilité en la température, on raisonne à l'aide de la théorie de la réponse linéaire due à Kubo [M56]. En définissant $\langle q(t, F) - q^0 \rangle$ comme le déplacement moyen d'une particule au temps t par rapport à sa position initiale, on s'intéresse aux quotients

$$v_F : t \mapsto \frac{\langle q(t, F) - q^0 \rangle}{t} \text{ et } \mu_F : t \mapsto \frac{v_F(t)}{F}.$$

En utilisant la théorie des perturbations au premier ordre et en introduisant

$$D : t \mapsto \frac{\langle q(t, 0) - q^0 \rangle^2}{2t},$$

on obtient une version en temps fini de la relation d'Einstein

$$\mu_F(t) = \beta D(t) + O(F)$$

On ne peut espérer que le terme d'erreur en $O(F)$ va rester uniformément petit en temps long. Cependant, les expériences numériques [M59] montrent que le régime diffusif est atteint en temps assez court, c'est à dire $D(t) \sim_{t \rightarrow \infty} D$ et, en prenant F assez petit à t fixé, on obtient l'équivalence

$$\mu_F(t) \underset{F \rightarrow 0}{\sim} \beta D.$$

Cette équivalence est illustrée sur la Figure 3.6.

Toutefois, au-delà d'un certain seuil de la force, l'aspect transitoire de la vitesse v_F paraît dans les expériences numériques : en effet, on voit les particules accélérer brutalement à partir d'un temps critique $t_c(F)$ (voir Figure 3.7). D'après la formule (3.8), on considère une vitesse critique $v_c(F) = \lambda \sqrt{4E_B E_0 / (Fa)}$, où λ est un paramètre sans dimension, au-delà de laquelle les particules

accélèrent indéfiniment. Plus la force F est grande, plus la vitesse moyenne des particules sera comparable à $v_c(F)$. La fraction de particules de vitesse plus grande que $v_c(F)$ est donnée par

$$\rho_F \equiv \left(\frac{\beta}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{v_c(F)}^{+\infty} e^{-\frac{\beta v^2}{2}} dv \underset{F \rightarrow 0}{\sim} (8\pi\beta E_B E_0 / Fa)^{-1/2} \exp(-2\beta E_B E_0 / Fa).$$

Cette quantité étant exponentiellement petite en F^{-1} , pour F assez petit, les particules ont pour la plupart une vitesse strictement plus petite que $v_c(F)$ et atteignent la vitesse limite v_F . La vitesse moyenne est par conséquent de l'ordre de

$$\langle v(t) \rangle \underset{F \rightarrow 0}{\sim} v_F + (Fa)^{3/2} \frac{t}{a} \frac{e^{-\beta \frac{2E_B E_0}{Fa}}}{\sqrt{8\beta E_b E_0 \pi}},$$

ce qui, par comparaison des deux termes, permet de conclure à l'existence d'un courant constant observable tant que les particules de haute vitesse, qui sont moins nombreuses, ne dominent pas le courant macroscopique. On définit le temps critique comme l'instant où les deux termes deviennent comparables :

$$t_c(F) = v_F a \sqrt{\frac{8\lambda^2 \beta E_B E_0 \pi}{F^3 a^3}} e^{\frac{2\beta \lambda^2 E_b E_0}{Fa}}. \quad (3.9)$$

La dépendance numérique de t_c en fonction de F est illustrée dans la Figure 3.8.

La conclusion de cette étude est que la double limite

$$\mu := \lim_{t \rightarrow +\infty} \lim_{F \rightarrow 0} \mu_F(t) = \beta D$$

existe, mais que, du fait de la présence inévitable de particules indéfiniment accélérées, les deux limites ne sont pas interchangeables, même si on peut donner le développement suivant

$$\mu_F(t) = \frac{v_F(t)}{F} = \beta D + O(F) + O(1/t)$$

où l'erreur en F est uniforme en temps tel que $\mu \ll t \ll t_c(F)$.

3.4 Résultats en dimension 2

Nous avons étudié dans le cas de la dimension 2 le comportement asymptotique de l'énergie cinétique moyenne et de la variance du déplacement de particules dans un gaz de Lorentz inélastique, non dissipatif et aléatoire, c'est à dire des particules en mouvement soumises à un champ de forces dont le support est contenu dans une union dénombrable de boules disjointes, appelées diffuseurs, disposées aléatoirement ou sur un réseau, et qui sont elles-mêmes le support de forces locales dérivant ou non d'un potentiel dont on suppose la dépendance en temps connue. Il n'y a pas de force extérieure. Comme dans le cas exposé ci-dessus, les résultats théoriques ont nécessité l'introduction d'une marche aléatoire, qui a confirmé le comportement asymptotique numérique observé en

$$\langle \|p(t)\|^2 \rangle \sim t^{2/5} \quad \text{et} \quad \langle \|q(t)\|^2 \rangle \sim t^{2/3}$$

quand les forces locales dérivent d'un potentiel et

$$\langle \|p(t)\|^2 \rangle \sim t^2 \quad \text{et} \quad \langle \|q(t)\|^2 \rangle \sim t^{8/3}$$

sinon. Ce type de modèle a été proposé par Lorentz [M57] pour étudier les phénomènes de conductivité des métaux par la compréhension du mouvement des électrons et sert dans de multiples contextes physiques à dériver des lois macroscopiques à partir de phénomènes microscopiques. On trouvera dans la thèse [M53] de Bénédicte Aguer une revue exhaustive des résultats sur les gaz de Lorentz.

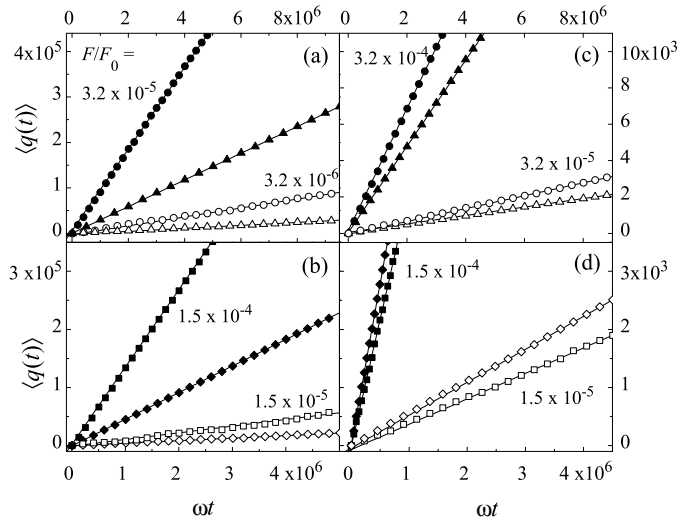


Figure 3.2 – Déplacement moyenné des particules en fonction de ωt pour différents jeux de paramètres et de forces ($F_0 = a\omega^2$). Dans les sous-figures (a) (où $c_1 = 1,5 \cdot 10^{-2}$ et $c_3 = 0,5$) et (c) (où $c_1 = 0,5$ et $c_3 = 0,5$), les triangles sont associés à $c_2 = 0,5$ et les cercles à $c_2 = 5$. Dans les sous-figures (b) (où $c_1 = 2 \cdot 10^{-3}$ et $c_3 = 2$) et (d) (où $c_1 = 7 \cdot 10^{-2}$ et $c_3 = 2$), les losanges sont associés à $c_2 = 0,5$ et les carrés à $c_2 = 5$. Chaque courbe est une moyenne de 10^3 à 10^5 trajectoires. Les lignes en trait plein sont des régressions linéaires.

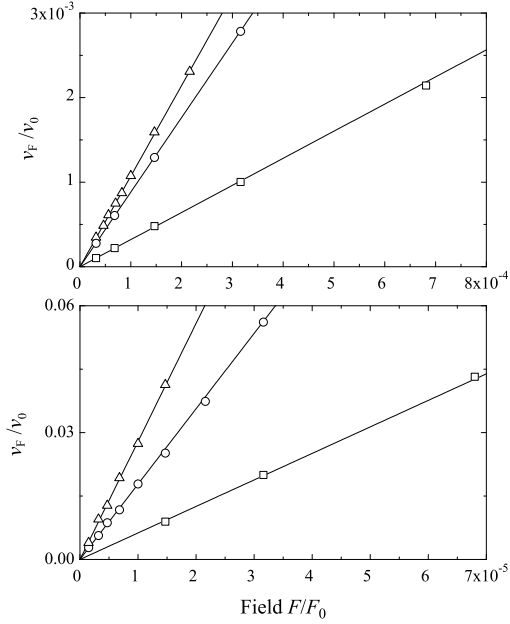


Figure 3.3 – Vitesse asymptotique v_F en fonction de F . Les lignes en trait plein sont des régressions linéaires. Ici, $c_2 = 5$, $v_0 = a\omega$ et $F_0 = a\omega^2$. En haut (resp. en bas), les triangles sont associés à $c_1 = 0,5$ (resp à $c_1 = 1,5 \cdot 10^{-2}$) et $c_3 = 0,5$; les carrés à $c_1 = 0,9$ (resp à $c_1 = 3 \cdot 10^{-2}$) et $c_3 = 1$; les cercles à $c_1 = 0,7$ (resp à $c_1 = 2 \cdot 10^{-2}$) et $c_3 = 2$.

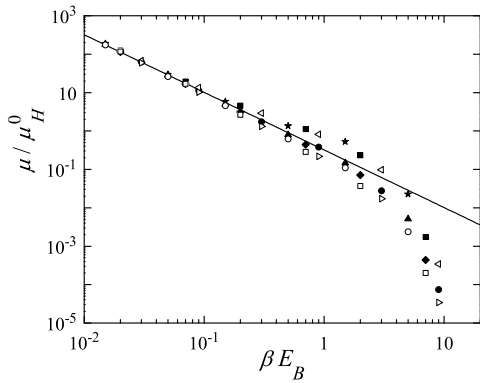


Figure 3.4 – Mobilités numériques en fonction de βE_B (échelle log-log) et pour neuf jeux de paramètres, représentés par différents symboles. Pour chaque jeu de paramètres, la mobilité est montrée pour six différentes températures. La ligne en trait plein correspond à $0,32(\beta E_B)^{-3/2}$.

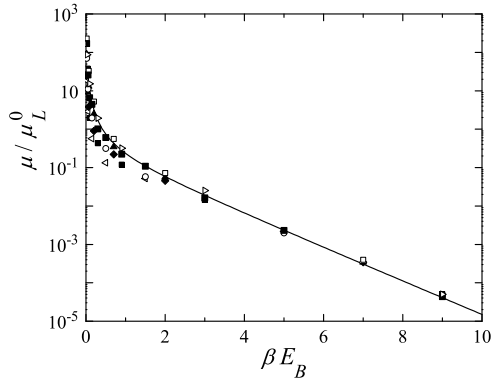


Figure 3.5 – Mobilités numériques en fonction de βE_B (échelle lin-log) et pour les mêmes jeux de paramètres que pour la figure 3.4. La courbe en trait plein correspond à la fonction $x \mapsto 0,14(x^{1/2} + 1,5x^{-3/2})e^{-x}$.

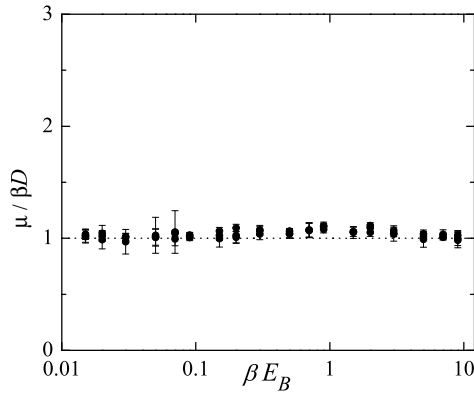


Figure 3.6 – Quotient $\mu/(\beta D)$ en fonction de βE_B pour les neuf systèmes testés précédemment avec intervalle de confiance. On représente six températures par système.

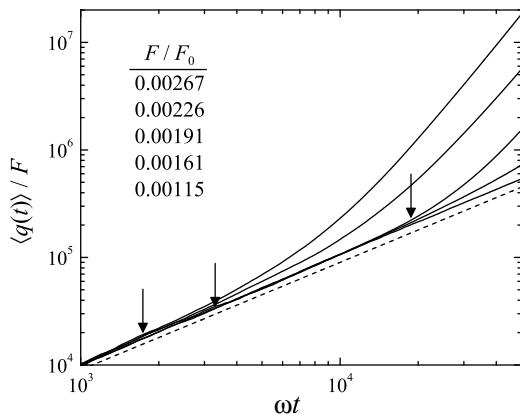


Figure 3.7 – Quotient $\langle q(t, F) \rangle / F$ en fonction de ωt pour plusieurs valeurs de F/F_0 et pour les paramètres $\beta E_B = 0,5$, $E_B/0 = 5$, $2\sigma/L = 0,5$ et $F_0 = a\omega^2$. L'ordonnée à l'origine témoigne du fait de la mobilité commune à toutes les forces, mais chaque courbe diverge à certain point de la droite.

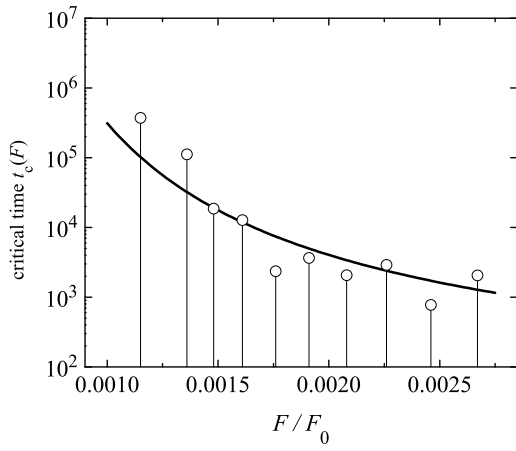


Figure 3.8 – Temps critique en fonction de F (échelle log-log). Les paramètres sont $\beta E_B = 0,5$, $E_B/0 = 5$, $2\sigma/L = 0,5$. Les temps numériques sont représentés par des cercles et la courbe en trait plein est celle de t_c pour $\lambda = 0,6$.

Mécanique Statistique

- [M53] B. Aguer. Comportements asymptotiques dans des gaz de lorentz inélastiques. Thèse de doctorat, Université Lille 1, 2010.
- [M54] S. D. Bièvre, P. E. Parris, and A. Silvius. Chaotic dynamics of a free particle interacting linearly with a harmonic oscillator. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 208 :96 – 114, 2005.
- [M55] W. J. Briels. Theory of polymer dynamics, 1992.
- [M56] R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume. *Statistical physics. II*, volume 31 of *Springer Series in Solid-State Sciences*. Springer-Verlag, Berlin, second edition, 1991. Nonequilibrium statistical mechanics.
- [M57] H. K. Lorentz. The motion of electrons in metallic bodies I. *Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen Proceedings Series B Physical Sciences*, 7 :438–454, 1904.
- [M58] H. Risken. *The Fokker-Planck equation*, volume 18 of *Springer Series in Synergetics*. Springer-Verlag, Berlin, 1989. Methods of solution and applications.
- [M59] A. A. Silvius, P. E. Parris, and S. De Bièvre. Adiabatic-nonadiabatic transition in the diffusive hamiltonian dynamics of a classical Holstein polaron. *Phys. Rev. B*, 73(1) :014304, Jan 2006.

Chapitre 4

Transition de phase

Ce chapitre présente les travaux [d15] réalisés en collaboration avec Corrado Mascia. Il s’agit de l’étude numérique d’une équation de type diffusion non linéaire modélisant dans les polymères au point de vitrification la phase solide et la phase liquide, représentées par des domaines de valeur de la solution, d’après un modèle introduit par J. Jäckle et H. Frisch [D61, D62]. Chacune des phases est affectée d’une fonction de diffusion à dérivée positive, ce qui assure le caractère bien posé du problème de Cauchy quand les valeurs de la condition initiale sont entièrement contenues dans l’une ou dans l’autre. La jonction entre les deux fonctions de diffusion est une fonction à dérivée strictement négative, ce qui a pour effet d’introduire une zone instable où la solution ne peut pas prendre de valeur, le problème de Cauchy y étant alors mal posé. On s’intéresse au mouvement d’interfaces, modélisées par la position des sauts de la solution, en cas de condition initiale multiphasique.

4.1 Modèle

L’équation non linéaire étudiée, ici en une dimension d’espace, est

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 \phi(u)}{\partial x^2} \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times (0, +\infty), \quad u(x, t) \in \mathbb{R}, \quad (4.1)$$

où la fonction de diffusion est de type cubique à trois zéros distincts, c’est à dire croissante sur $] - \infty, b] \cup [a, +\infty[$ et décroissante sur $[b, a]$, avec $b < a$. La droite réelle se divise alors en trois intervalles : deux régions stables $\mathcal{S}^- :=] - \infty, b]$ et $\mathcal{S}^+ := [a, +\infty[$ et une région instable $\mathcal{U} :=]b, a[$. On peut obtenir (4.1) comme limite singulière de l’équation pseudo-parabolique

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\phi(u) + \varepsilon \frac{\partial u}{\partial t} \right) \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \quad (4.2)$$

introduite et étudiée par A. Novick-Cohen et R. Pego [D65]. Le problème de Cauchy pour l’équation (4.2) est bien posé [D65] et exhibe des oscillations lorsque la solution prend des valeurs dans \mathcal{U} , pour ε tendant vers 0 [D60]. Les solutions généralisées de (4.1), que nous nommerons *diphoniques*, à considérer sont régulières par morceaux et satisfont à des conditions d’entropie [D64]. Ici, nous nous penchons sur le cas d’une fonction continue, affine par morceaux, qui exhibe la même allure générale, comme représenté sur la figure 4.1.

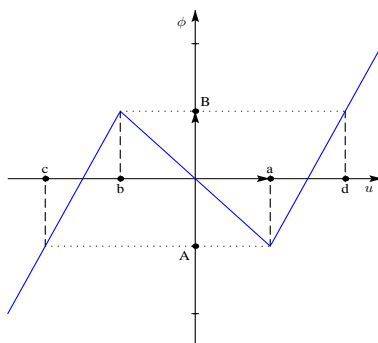


Figure 4.1 – La fonction de diffusion affine par morceaux ϕ .

Notre but a été d'analyser une discrétisation aux différences finies pour (4.2), avec $\varepsilon \rightarrow 0$, et pour (4.1) et de proposer un schéma spécifique utilisant les conditions d'entropie. Les conditions initiales auxquelles nous nous sommes intéressés sont des problèmes de Riemann, pour lesquels nous donnons une solution explicite et qui nous fournissent donc un élément de validation des schémas numériques.

4.2 Solutions diphasiques

La première description de solution pour (4.1) reposait sur la notion de mesure de Young [D66, D67]. L'idée était que la limite singulière de la famille de solutions u^ε de (4.2) se décompose suivant les trois phases en une combinaison convexe

$$u = \lambda^-(\phi^-)^{-1}(v) + \lambda^u(\phi^u)^{-1}(v) + \lambda^+(\phi^+)^{-1}(v) \quad (4.3)$$

où λ^u, λ^\pm et v sont des fonctions bornées et ϕ^-, ϕ^u, ϕ^+ représentent les restrictions de ϕ à $\mathcal{S}^-, \mathcal{U}$ and \mathcal{S}^+ , respectivement. Les fonctions λ sont positives et satisfont à

$$\lambda^-(x, t) + \lambda^u(x, t) + \lambda^+(x, t) = 1 \quad \text{et} \quad \begin{cases} \lambda^-(x, t) = 1 & \text{si } v(x, t) < A, \\ \lambda^+(x, t) = 1 & \text{si } v(x, t) > B. \end{cases}$$

Pour toute fonction $g \in C^1(\mathbb{R})$ croissante, si v est définie en (4.3) pour u solution de (4.1), si on pose $G := s \mapsto \int_0^s g(\phi(\sigma))d\sigma$ et $G^*(v) := \lambda^-G((\phi^-)^{-1}(v)) + \lambda^uG((\phi^u)^{-1}(v)) + \lambda^+G((\phi^+)^{-1}(v))$, l'inégalité

$$\frac{\partial G^*(v)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(g(v) \frac{\partial v}{\partial x} \right) + g'(v) \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \leq 0 \quad (4.4)$$

est vérifiée au sens des distributions. Cette inégalité peut être interprétée comme une inégalité d'entropie, qui garde la mémoire de l'irréversibilité du passage à la limite.

En linéarisant autour d'un état constant dans \mathcal{U} , on est confronté à l'échappée exponentiellement rapide de la solution de \mathcal{U} vers les zones stables. À la limite $\varepsilon \rightarrow 0$, la sortie de l'état instable est instantanée et les valeurs prises par les coefficients de la combinaison convexe sont donc $\lambda^u = 0$ et $\lambda^\pm \in \{0, 1\}$.

En supposant que la frontière entre les deux états stables, que nous appellerons désormais *interface*, est régulière, Evans et Portilheiro ont utilisé la condition d'entropie (4.4) pour déterminer des conditions ponctuelles vérifiées le long de cette interface par une solution régulière par morceaux, définissant ainsi un concept de solution faible. Voici le cadre adapté : pour $T > 0$, on note $\gamma := \{(\xi(t), t), t \in [0, T]\}$ une courbe régulière et $R^\pm := \{(x, t)/t \in [0, T], \pm(x - \xi(t)) > 0\}$. On suppose la solution u régulière en dehors de γ et telle que, pour tout $t \in [0, T]$, $u(R^-) \subset]-\infty, b]$ et $u(R^+) \subset [a, +\infty[$. Enfin, on suppose l'existence de limites

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} (u, \partial_x u)(\xi(t) \pm \eta, t) =: (u, \partial_x u)(\xi(t)^\pm, t).$$

La condition (4.4) permet alors de caractériser complètement des solutions diphasiques.

Proposition 1 ([D60]). *Une solution faible régulière par morceaux u dont la structure est décrite ci-dessus vérifie la condition d'entropie (4.4) si et seulement si :*

- i. la fonction u est une solution classique de (4.1) en dehors de la courbe γ ;
 ii. le long de la courbe γ , on a les égalités suivantes :

$$[\phi(u)]_\gamma = 0, \quad \xi'(t) [u]_\gamma + \left[\frac{\partial \phi(u)}{\partial x} \right]_\gamma = 0 \quad (4.5)$$

où $[f]_\gamma := f(\xi(t)^+, t) - f(\xi(t)^-, t)$ est le saut de f le long de γ .

- iii. le long de la courbe γ , on a les conditions d'entropie suivantes

$$\begin{cases} \xi'(t) \geq 0 & \text{si } \phi(u)(\xi(t), t) = A, \\ \xi'(t) \leq 0 & \text{si } \phi(u)(\xi(t), t) = B, \\ \xi'(t) = 0 & \text{si } \phi(u)(\xi(t), t) \in (A, B). \end{cases} \quad (4.6)$$

Ceci signifie qu'il y a deux cas de figure :

Interface immobile : soit $\phi(u)(\xi(t), t) \in]A, B[$. Alors l'interface γ ne bouge pas et les conditions de transmission sont simplement

$$[\phi(u)]_\gamma = 0, \quad \left[\frac{\partial \phi(u)}{\partial x} \right]_\gamma = 0. \quad (4.7)$$

Le problème se résout alors en calculant les solutions de deux équations de diffusion classiques et en connectant ces solutions à l'interface grâce à (4.7).

Interface mobile : soit $\phi(u)(\xi(t), t) \in \{A, B\}$ et l'interface γ bouge, devenant une frontière libre dont la direction de propagation dépend de la valeur de $\phi(u)(\xi(t), t)$. La première condition de (4.6) donne les valeurs à gauche et à droite de $u(\xi(t), t)$, c'est à dire $u(\xi(t)^-, t) = c$ (resp. $= b$) et $u(\xi(t)^+, t) = a$ (resp. $= d$) si $\phi(u)(\xi(t), t) = A$ (resp. $= B$). La deuxième condition permet de déterminer la vitesse $\xi'(t)$.

C. Mascia, A. Terracina et A. Tesei ont montré [D64] l'existence locale et l'unicité de ces solutions diphasiques.

Il est à noter que, grâce aux conditions d'entropie (4.6), il est possible de calculer explicitement la solution d'un problème de Riemann de donnée initiale

$$u^0 : x \mapsto \begin{cases} u^-, & x < 0 \\ u^+, & x > 0 \end{cases}, \quad (4.8)$$

où u^\pm sont données. En effet, l'invariance par le changement d'échelle $(x, t) \rightarrow (\lambda x, \lambda^2 t)$ pour $\lambda > 0$ permet d'affirmer que la solution (4.1)-(4.8) est de la forme

$$u(x, t) = f(\xi) \quad \text{avec} \quad \xi := \frac{x}{\sqrt{t}} \quad (4.9)$$

où f est telle que $f(\pm\infty) = u^\pm$. Les courbes de discontinuité, c'est à dire les interfaces, sont de la forme $x = \bar{\xi}\sqrt{t}$ où $\bar{\xi}$ est un réel à déterminer. Pour $\xi \neq \bar{\xi}$, la fonction f est solution de l'équation différentielle ordinaire du second ordre

$$\phi(f)'' + \frac{1}{2} \xi f' = 0. \quad (4.10)$$

Aux points de discontinuité $\bar{\xi}$, les égalités suivantes, dérivées de (4.5), doivent être vérifiées :

$$[\phi(f)]_{\bar{\xi}} = 0, \quad [\phi(f)']_{\bar{\xi}} + \frac{1}{2} \bar{\xi} [f]_{\bar{\xi}} = 0. \quad (4.11)$$

En précisant la fonction de diffusion ϕ

$$\begin{aligned}\phi(u) &= \phi^-(u) := m^- u + q^- \quad \text{pour } u \leq b, \\ \phi(u) &= \phi^+(u) := m^+ u + q^+ \quad \text{pour } u \geq a,\end{aligned}$$

avec $m^\pm > 0$ et $q^\pm \in \mathbb{R}$, en se restreignant au cas où $u^\pm \in \mathcal{S}^\pm$ et en introduisant, pour $m > 0$, les fonctions

$$E_m^-(\xi) := \frac{1}{\sqrt{4\pi m}} \int_{-\infty}^{\xi} e^{-y^2/4m} dy, \quad E_m^+(\xi) := \frac{1}{\sqrt{4\pi m}} \int_{\xi}^{+\infty} e^{-y^2/4m} dy = 1 - E_m^-(\xi),$$

nous avons montré la proposition suivante :

Proposition 2 ([d15]). **Interface immobile** *Le problème de Riemann (4.1)-(4.8) a une solution diphasique d'interface immobile si et seulement si*

$$\frac{\sqrt{m^+}}{\sqrt{m^+} + \sqrt{m^-}} \phi(u^-) + \frac{\sqrt{m^-}}{\sqrt{m^+} + \sqrt{m^-}} \phi(u^+) \in [A, B], \quad (4.12)$$

Dans ce cas, la solution est de la forme (4.9) où

$$f(\xi) := \begin{cases} (\phi^-)^{-1}(g(\xi)) & \xi < 0, \\ (\phi^+)^{-1}(g(\xi)) & \xi > 0, \end{cases}$$

et

$$g(\xi) := \begin{cases} \phi(u^-) E_{m^-}^+(\xi) + \phi(u^+) E_{m^-}^-(\xi) - \frac{\sqrt{m^+} - \sqrt{m^-}}{\sqrt{m^+} + \sqrt{m^-}} [\phi] E_{m^-}^-(\xi) & \xi < 0, \\ \phi(u^-) E_{m^+}^+(\xi) + \phi(u^+) E_{m^+}^-(\xi) - \frac{\sqrt{m^+} - \sqrt{m^-}}{\sqrt{m^+} + \sqrt{m^-}} [\phi] E_{m^+}^+(\xi) & \xi > 0. \end{cases} \quad (4.13)$$

Interface mobile *Si (4.12) n'est pas satisfaite, l'interface bouge. Dans le cas simplifié où $m^\pm = m$, (4.12) est équivalente à*

$$\frac{1}{2}(\phi(u^-) + \phi(u^+)) \in [A, B].$$

Si $\phi(u^-) + \phi(u^+) > 2B$ (resp. $< 2A$), la relation $\phi(f(\bar{\xi})) = B$ (resp. $= A$) est implicite et l'interface a pour équation $x = \xi(t) = \bar{\xi}\sqrt{t}$.

4.3 Schéma aux différences finies

La première idée est d'obtenir un schéma pour (4.1) en passant à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ dans un schéma pour (4.2). On se place sur l'intervalle borné $[0, 1]$ et on suppose que les conditions aux limites sont de type Neumann

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x \in \{0,1\}} = 0. \quad (4.14)$$

Soient $J \geq 5$ et $x_j := j\Delta x$ avec $\Delta x = 1/(J-1)$ une discrétisation uniforme de $[0, 1]$. En considérant la discrétisation centrée usuelle de l'opérateur Laplacien en une dimension, on obtient le système semi-discret en espace suivant :

$$\left(\Delta x^2 \mathbb{I} + \varepsilon \mathcal{A} \right) \frac{dU}{dt} = -\mathcal{A} \phi(U),$$

où $U = (U_1, \dots, U_J)^T : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^J$, $\mathbb{I} \in \mathbb{R}^{J \times J}$ est la matrice identité et

$$\mathcal{A} := \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \ddots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \ddots & \ddots & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \ddots & \ddots & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \ddots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{J \times J} \quad (4.15)$$

ce qui donne, le spectre de la matrice \mathcal{A} étant positif et la matrice $\Delta x^2 \mathbb{I} + \varepsilon \mathcal{A}$ inversible, le schéma

$$\frac{dU}{dt} = - \left(\Delta x^2 \mathbb{I} + \varepsilon \mathcal{A} \right)^{-1} \mathcal{A} \phi(U) =: -\mathcal{A}_{\Delta x^2, \varepsilon} \phi(U). \quad (4.16)$$

La notion de limite qui nous intéresse ici est celle qui préserve l'asymptotique, au sens de Jin [D63], quand $\varepsilon \rightarrow 0$ à Δx fixé. On constate que la présence du terme $(\Delta x^2 \mathbb{I} + \varepsilon \mathcal{A})^{-1}$ agit comme un filtre passe-bas $R : x \mapsto x/(1+x)$ sur les valeurs propres de la matrice $\Delta x^{-2} \mathcal{A}$, et que le spectre de $\mathcal{A}_{\Delta x^2, \varepsilon}$ s'en trouve contenu dans l'intervalle $[0, \min(1/\varepsilon, 4/\Delta x^2)]$.

La limite en $\varepsilon = 0$ de la matrice $\mathcal{A}_{\Delta x^2, \varepsilon}$ étant régulière, on étudie maintenant le schéma semi-discret

$$\frac{dU}{d\tau} = -\mathcal{A} \phi(U), \quad (4.17)$$

où $\tau = t/\Delta x^2$. Le problème de Cauchy associé à cette équation admet une solution globale de classe C^1 .

La fonction ϕ ayant été supposée continue affine par morceaux, le système (4.17), non-linéaire et autonome, peut en fait être vu comme un système linéaire dépendant du temps de la forme

$$\frac{dU}{d\tau}(\tau) = -M(\tau)U(\tau) + W(\tau), \quad (4.18)$$

où $M : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^{J \times J}$ et $W : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^J$ sont des fonctions constantes par morceaux, les discontinuités se produisant lorsqu'une composante U_j passe d'une zone stable à une zone instable, c'est à dire quand l'interface bouge.

Remarque 1. On se place désormais dans le cas symétrique où $\phi^\pm(s) = 2s \mp 3$, $a = -b = 1$, $d = -c = 2$ et $B = -A = 1$. La condition (4.12) devient alors $u^- + u^+ \in [-1, 1]$. L'analyse numérique repose sur les propriétés spectrales remarquables de la matrice \mathcal{A} . Si ϕ a des pentes $m^+ \neq m^-$ différentes à gauche et à droite, l'analyse qui suit reste valable en remplaçant la matrice \mathcal{A} par $\mathcal{D}\mathcal{A}$ où $\mathcal{D} = \text{diag}(m^-, \dots, m^-, m^+, \dots, m^+)$, qui conserve les mêmes propriétés.

En accord avec la Proposition 2, nous examinons les deux cas de données initiales à considérer.

On note $U^0 = (U_j^0)_{1 \leq j \leq J}$ le vecteur colonne de donnée initiale. On le suppose de la forme

$$U_j^0 = u^- \quad \text{si } j \leq K, \quad U_j^0 = u^+ \quad \text{si } j \geq K+1$$

pour $K \in \{2, \dots, J-1\}$. Si u^- et u^+ n'appartiennent pas à la même phase stable, il y a une interface, située initialement entre x_K et x_{K+1} . On se place dans le cas où $u^\pm \in \mathcal{S}^\pm$.

Interface immobile

En supposant que $u^- + u^+ \in [-1, 1]$, la proposition 2 assure que l'interface ne bouge pas. On prouve que les composantes U_j , pour $j \leq K$ d'une part et pour $j \geq K + 1$ d'autre part, ne changent pas de phase et que la matrice $M(\tau)$ est constante égale à $-\mathcal{A}$. Ceci est dû au fait que la fonction vectorielle $V = (\phi(U_1), \dots, \phi(U_J))^T$ satisfait au système

$$\frac{dV}{d\tau} = -2\mathcal{A}V.$$

En effet, pour $s \geq 0$, la matrice $\exp(-2\tau\mathcal{A})$ est à coefficients positifs et de norme infinie plus petite que 1. Si $V_j(0) \in [-1, 1]$, $V_j(s) \in [-1, 1]$ pour tout $s \geq 0$. Si $V_j(0) \notin [-1, 1]$, on se ramène à ce cas par homothétie de la condition initiale.

L'analyse spectrale de la matrice \mathcal{A} conduit au calcul de la limite en $+\infty$ de $V : \mathcal{A}$ ayant 0 comme valeur propre simple associée au vecteur propre $(1, \dots, 1)^T$ et ses autres valeurs propres étant strictement positives, on trouve, pour tout $j \in \{1, \dots, J\}$,

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} V_j(t/h^2) = \frac{\phi(u^+) + \phi(u^-)}{2} = v^\infty, \quad (4.19)$$

ce qui implique

$$U_j^\infty = \begin{cases} (\phi^-)^{-1}(v^\infty) & \text{si } j \leq K, \\ (\phi^+)^{-1}(v^\infty) & \text{si } j \geq K + 1. \end{cases} \quad (4.20)$$

La vitesse de convergence vers cette fonction en escalier est, d'après l'étude spectrale de \mathcal{A} ,

$$\frac{8}{\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{\pi}{2J}\right) \underset{J \rightarrow +\infty}{\sim} 2\pi^2. \quad (4.21)$$

Interface mobile

Dans le cas où $u^+ + u^- \notin [-1, 1]$, il faut effectuer une analyse locale en temps : l'opérateur de diffusion discrétisé tendant à diminuer la valeur de U_{L+1} et à augmenter la valeur de U_L , on se ramène à l'étude de la condition initiale modèle

$$U^0 = (b, \dots, b, d, d + \delta)^T,$$

où δ est un réel strictement positif. C'est une configuration dans laquelle on sait que l'interface va bouger vers la gauche. Le développement limité de la solution U au voisinage de $\tau = 0$ montre que la matrice $M(\tau)$ vaut, au moins localement en temps, $-2\mathcal{A}\mathcal{D}$ avec $\mathcal{D} = \text{diag}(1, \dots, 1, -1/2, 1, \dots, 1)$, où le coefficient $-1/2$ est situé en $j = L + 1$, et que $(U_j)_{j \leq L-1}$ (resp. $(U_j)_{j \geq L+1}$) reste dans la phase stable \mathcal{S}^- (resp. dans \mathcal{S}^+). C'est le coefficient U_L qui va « traverser » la phase instable \mathcal{U} , décalant ainsi l'interface vers la gauche. Comme dans le cas continu, la sortie de U_L de la phase \mathcal{U} se fait exponentiellement rapidement, du fait que la matrice $\mathcal{D}\mathcal{A}$ a un spectre comprenant une valeur propre nulle, une valeur propre strictement positive, les $J - 2$ autres valeurs propres étant strictement négatives. Dès lors que U_L est sorti de \mathcal{U} , la matrice $M(\tau)$ change de valeur et devient $-2\mathcal{A}$, comme dans le cas d'une interface immobile, ce qui signifie que deux problèmes de diffusion linéaires sont résolus et connectés. Cependant, si δ est grand, U_{L+1} va à son tour être strictement plus grand que 1 et la configuration va de nouveau être celle d'une interface mobile. En conclusion, pour un problème de Riemann tel que $|u^+ + u^-| > 1$, le mécanisme est le suivant :

1. les coefficients U_L, U_{L+1} vont converger exponentiellement rapidement vers les valeurs-frontières « les plus proches » prédites par la condition d'entropie (4.6), c'est à dire que $(U_L, U_{L+1}) \rightarrow (-2, 1)$ (resp. $(U_L, U_{L+1}) \rightarrow (-1, 2)$) $u^+ + u^- < -1$ (resp. si $u^+ + u^- > 1$);
2. seul le point U_{L+1} (resp. U_L) traverse la zone instable et l'interface se déplace alors vers la droite (resp. la gauche);
3. si la différence $U_{L+2} - U_{L+1}$ (resp. $U_L - U_{L-1}$) est faible, l'interface ne bouge plus; sinon, le processus est réitéré.

Schéma discret

On considère une discrétisation uniforme du temps $t^n = n\Delta t$, $n \in \mathbb{N}^*$ avec $\Delta t > 0$. Afin de valider les schémas numériques, on utilise les formules explicites (4.13) de la solution des problèmes de Riemann. Dans le cas d'une interface immobile, le système étant linéaire tridiagonal, il est indiqué d'utiliser un schéma implicite, ne requérant pas de condition CFL pour les stabilités L^∞ et L^2 . Il n'est pas judicieux de choisir un schéma de Crank-Nicolson, car la discontinuité de la condition initiale limite de toute façon l'ordre de convergence du schéma, estimée ici numériquement à 0,5 en temps et 1 en espace. Dans le cas du schéma complètement explicite, dont le temps d'exécution est beaucoup plus élevé du fait de la condition CFL $4\Delta t/\Delta x^2 \leq 1$, l'erreur en espace est d'ordre 1. En temps petit, comme prédit par les formules (4.13), la solution discontinue a un profil exponentiel de part et d'autre de l'interface; il n'y a pas de changement de phase (voir Figure 4.2). Pour le cas

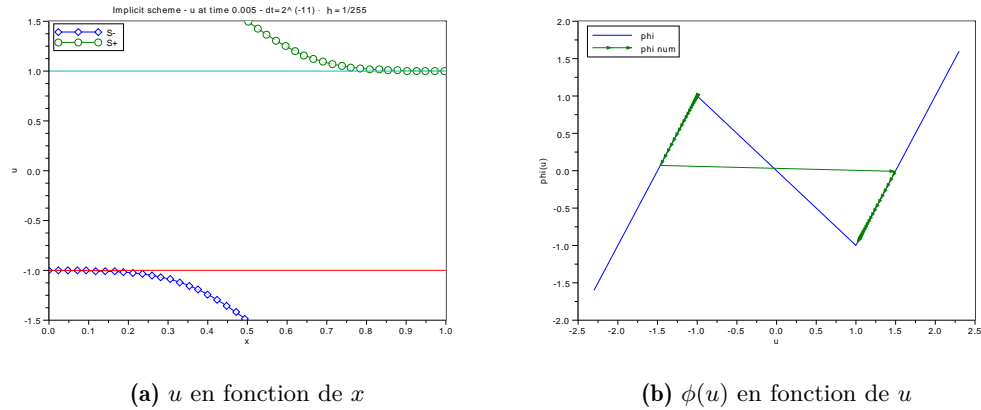
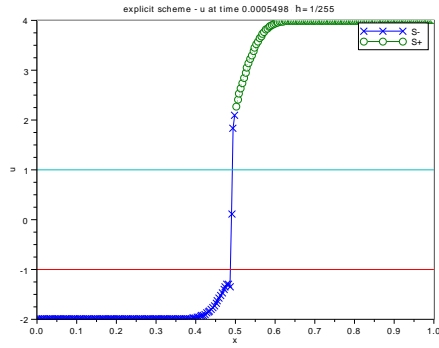
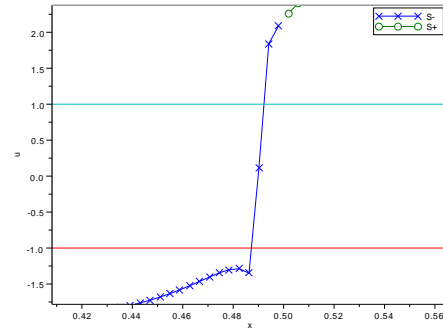


Figure 4.2 – Solution numérique par le schéma implicite au temps $T = 0.05$

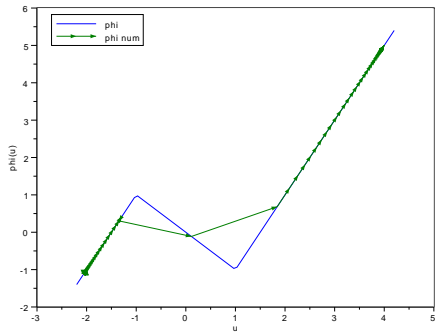
d'une interface mobile, le schéma choisi est le schéma explicite centré classique, le schéma implicite nécessitant la connaissance précise des temps de changement de phase. L'aspect non physique de ces simulations est la présence inévitable, lors de la transition, de coefficients appartenant à la zone instable (voir Figure 4.3). Le mouvement de l'interface est bien restitué: il s'agit d'un profil parabolique, comme prédit par la proposition 2 (voir Figure 4.4). Cependant, des oscillations apparaissent.



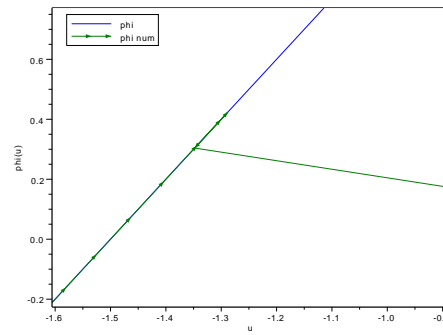
(a) u fonction de x



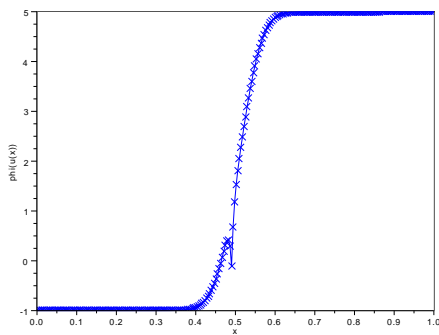
(b) zoom de u au voisinage de l'interface



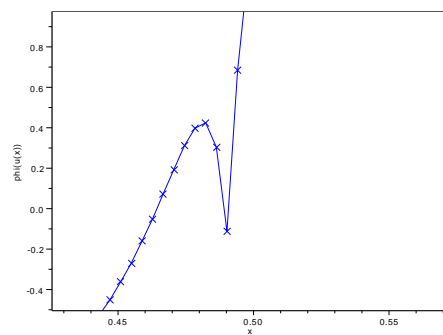
(c) $\phi(u)$ fonction de u



(d) zoom de $\phi(u)$ au voisinage de l'interface



(e) $\phi(u)$ fonction de x



(f) zoom de $\phi(u)$ au voisinage de l'interface

Figure 4.3 – Évolution en temps petit pour les données $(u^-, u^+) = (-2, 4)$. Les graphes de droite représentent la solution dans l'espace $(u, \phi(u))$, où on voit clairement un point dans la région non physique.

4.4 Schéma diphasique

Pour pallier l'apparition de points non physiques et les oscillations, on implémente un schéma utilisant les conditions d'entropie (4.11), qui découple dans un premier temps les problèmes de

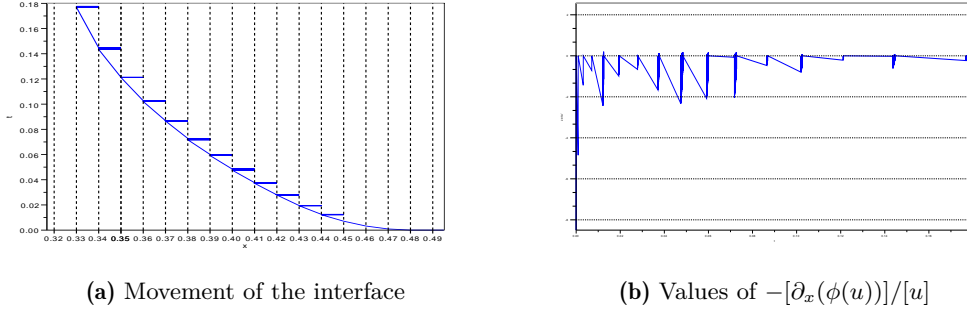


Figure 4.4 – Données de Riemann $u^- = -2$, $u^+ = 4$ avec $\Delta x = 0.01$.

diffusion dans chaque phase pour les connecter ensuite à l'aide des conditions de transmission. Pour cela, on introduit la matrice de projection

$$\Pi_j := \begin{pmatrix} \mathbb{O}_{j-1} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbb{I}^2 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbb{O}_{J-j-1} \end{pmatrix},$$

où \mathbb{O}_j et \mathbb{I}_j représentent respectivement la matrice nulle et la matrice identité de taille $j \times j$ et la fonction de troncature définie par $T : U \mapsto \max\{A, \min\{U, B\}\}$.

L'algorithme est le suivant : soient $U \in \mathbb{R}^J$ et $j_* \in \{1, \dots, J\}$ un vecteur donné et la position de l'interface. Posons $C := C(U, j_*)$ la valeur de transition suggérée par (4.19) :

$$C = C(U, j_*) := \frac{1}{2} \left(\phi^-(U_{j_*-1}) + \phi^+(U_{j_*+2}) \right). \quad (4.22)$$

Deux cas se présentent :

- si $|C| > 1$, on utilise la fonction de troncature T pour rendre la valeur admissible au sens de (4.6) : si $C > 1$ (resp. $C < -1$), $T(C) = 1$ (resp. $T(C) = -1$) et on pose alors $U_{j_*} = -1$ et $U_{j_*+1} = 2$ (resp. $U_{j_*} = -2$ et $U_{j_*+1} = 1$) ;
- si $|C| \leq 1$, les équations (4.5) sont alors satisfaites et les nouvelles valeurs U_{j_*} et U_{j_*+1} sont données par

$$\phi(U_{j_*}) = \phi(U_{j_*+1}) = \frac{1}{2} \left(\phi(U_{j_*-1}) + \phi(U_{j_*+2}) \right) = C(U, j_*). \quad (4.23)$$

La fonction de troncature T permet ainsi que $(\phi^-)^{-1}(T(C))$ et $(\phi^+)^{-1}(T(C))$ soient respectivement dans \mathcal{S}^- et \mathcal{S}^+ .

Posons

$$\mathbb{F}(U, j_*) := (0, \dots, 0, \underbrace{(\phi^-)^{-1}(T(C)), (\phi^+)^{-1}(T(C))}_{j_*\text{ème élément}}, 0, \dots, 0). \quad (4.24)$$

Finalement, pour $U^n \in \mathbb{R}^J$ donné et $\tilde{U}^n := \mathbb{F}(U^n, j_*^n) + (\mathbb{I} - \Pi_{j_*^n}) U^n$, le schéma diphasique s'écrit

$$\begin{cases} \Pi_{j_*^n} U^{n+1} = \mathbb{F}(U^n, j_*^n), \\ (\mathbb{I} - \Pi_{j_*^n}) U^{n+1} = (\mathbb{I} - \Pi_{j_*^n}) \left(U^n - \frac{\Delta t}{h^2} \mathcal{A} \phi(\tilde{U}^n) \right). \end{cases} \quad (4.25)$$

Il est à noter que ce schéma ne diffère du schéma explicite centré, dans le cas d'une interface immobile, qu'aux points de transition. En particulier, la matrice représentant la discrétisation de $\partial_{xx}^2 \phi(u)$ dans le schéma est celle du laplacien centré. Par construction, il n'y a pas de point dans la zone instable et le mouvement de l'interface calculé grâce à ce schéma apparaît considérablement lissé (voir Figure 4.5). Le schéma diphasique est également, sous la même condition CFL que le

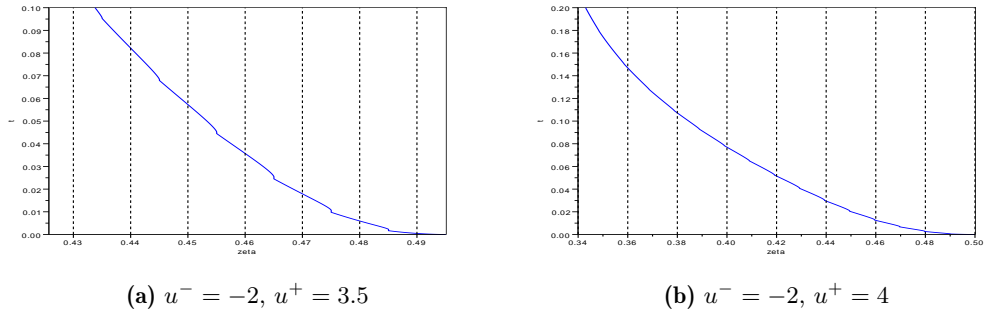


Figure 4.5 – Mouvement de l'interface pour différentes données de Riemann avec $\Delta x = 0.01$.

schéma explicite centré, d'ordre 1 en espace. Enfin, l'interface numérique, calculée respectivement avec le schéma explicite centré et avec le schéma diphasique, comparée à la solution parabolique exacte (proposition 2) donne un net avantage au schéma diphasique, même si le schéma explicite centré, obtenu de manière naïve, donne un résultat honorable (voir Figure 4.6).

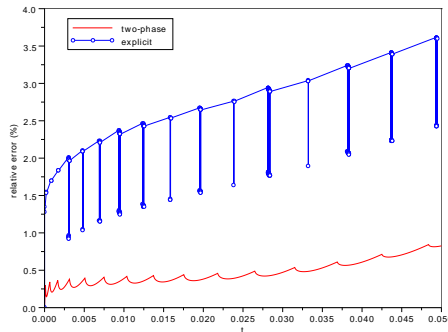


Figure 4.6 – Évolution de l'erreur relative de la position de l'interface pour $(u^-, u^+) = (-2, 4)$.

4.5 Conclusions et perspectives

Dans ce travail, nous avons proposé et analysé différents schémas numériques pour un modèle de transition de phase en dimension 1. Nous souhaitons désormais nous consacrer au cas multidimensionnel, pour lequel la théorie n'a pas encore été développée. Nous projetons d'aborder cette

problématique par le côté numérique, en nous inspirant notamment des schémas volumes finis développés pour les problèmes elliptiques en milieu fracturé, bien adaptés à des solutions non régulières, et notamment à des comportements diphasiques.

Transitions de phase

- [D60] L. C. Evans and M. Portilheiro. Irreversibility and hysteresis for a forward-backward diffusion equation. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 14(11) :1599–1620, 2004.
- [D61] J. Jäckle and H. L. Frisch. Relaxation of chemical potential and a generalized diffusion equation. *Journal of Polymer Science : Polymer Physics Edition*, 23(4) :675–682, 1985.
- [D62] J. Jäckle and H. L. Frisch. Properties of a generalized diffusion equation with memory. *J. Chem. Phys.*, 85(3) :1621–1627, 1986.
- [D63] S. Jin. Efficient asymptotic-preserving (AP) schemes for some multiscale kinetic equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(2) :441–454, 1999.
- [D64] C. Mascia, A. Terracina, and A. Tesei. Two-phase entropy solutions of a forward-backward parabolic equation. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 2009. 10.1007/s00205-008-0185-6.
- [D65] A. Novick-Cohen and R. L. Pego. Stable patterns in a viscous diffusion equation. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 324(1) :331–351, 1991.
- [D66] P. I. Plotnikov. Equations with a variable direction of parabolicity and the hysteresis effect. *Dokl. Akad. Nauk*, 330(6) :691–693, 1993.
- [D67] P. I. Plotnikov. Passage to the limit with respect to viscosity in an equation with a variable direction of parabolicity. *Differentsial'nye Uravneniya*, 30(4) :665–674, 734, 1994.

Chapitre 5

Problèmes en biologie

Ce court chapitre est consacré aux travaux achevés ou en cours de finalisation qui ont traité à des problèmes rencontrés en biologie. Ma première approche date du stage de M2 en 2007 d'Anne Devys, dont j'ai par la suite coencadré la thèse avec Thierry Goudon, et qui est maintenant professeur en classe préparatoire. En premier lieu, nous avons abordé [b16] l'analyse mathématique et numérique de la croissance tumorale, à partir d'un article de chercheurs japonais [B73] qui modélisent les premiers développements de la maladie par une loi de conservation avec une condition au bord non locale. L'enjeu est particulièrement important du fait de la difficulté qu'ont les appareillages actuels à détecter les prémices des cancers. La suite de la thèse d'Anne Devys a porté sur l'étude mathématique de mécanismes de transport intra-cellulaire de protéines [b17], modélisés par une équation de réaction-diffusion, prenant en compte des phénomènes de dégradation et de saturation, et pour laquelle on cherche à savoir s'il existe des ondes progressives, porteuses du signal. Les résultats théoriques sont complétés par des simulations numériques illustrant les effets de seuil prédits sur la taille des conditions initiales et au bord. Ce travail a été réalisé en collaboration avec Ralf Blossey, directeur de recherches CNRS à l'Institut de Recherches Interdisciplinaires affilié aux universités Lille 1 et 2, et Jean-François Bodart, professeur en Biologie à Lille 1. Par ailleurs, Jésus Rosado, Francesco Vecil, respectivement en contrat post-doctoral à l'Université Paris-Dauphine et à l'Université de Valence en Espagne et moi-même nous intéressons à la simulation numérique de formation de motifs dans les bancs de poissons en deux et trois dimensions d'espace [b19], d'après des modèles particuliers et cinétiques introduits par A. Bertozzi, J. A. Carrillo, L. Chayes, Y. Chuang, M. D'Orsogna, Y. Panferov [B71, B69]. Enfin, je me penche actuellement sur des problèmes de dynamique de populations, et plus précisément de leur probabilité d'extinction. D'une part, avec Sophie Hautphenne [b18], actuellement en contrat post-doctoral à l'Université Libre de Bruxelles où elle a soutenu sa thèse en 2009, nous abordons des questions concernant la modélisation par des processus de branchement multitypes sous des conditions extérieures, qui, en agissant ponctuellement ou de manière pérenne, introduisent un couplage entre les individus d'une population [B72]. D'autre part, une collaboration en cours avec Kilian Raschel, en contrat post-doctoral à l'Université de Bielefeld en Allemagne et Viet Chi Tran, maître de conférences à l'Université Lille 1, porte sur la reproduction sexuée de plantes distyles [b20], c'est à dire dont deux variantes génétiques coexistent et qui sont inter-compatibles et intra-incompatibles. Le modèle fait appel au concept de marche aléatoire dans le quart de plan, les bords étant considérés comme absorbants car ils correspondent au fait qu'une des populations a disparu, ce qui entraîne l'extinction de l'autre. L'intérêt des biologistes pour ces modèles est de savoir s'il existe une taille critique de population en dessous de laquelle l'espèce sera menacée. Ces deux travaux font intervenir des chaînes de Markov, affectées par des conditions extérieures aléatoires dans le premier cas, et non homogènes dans le deuxième, conduisant à des équations aux dérivées partielles de transport, que l'on cherche à résoudre explicitement ou au moins numériquement, le traitement purement probabiliste du problème de départ pouvant s'avérer coûteux.

5.1 Évolution des métastases

Le modèle étudié est de type McKendrick-Von Foerster et s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x(w\rho) = 0, & x \in]1, b[, t > 0, \\ w(1)\rho(t, 1) = \int_1^\infty \beta(y)\rho(t, y)dy + \beta(x_p(t)), & t > 0, \\ \rho(0, \cdot) = 0, \end{cases} \quad (5.1)$$

où $t \geq 0$ représente le temps, $x \in [1, b]$, $b > 0$, la taille des tumeurs, ρ leur distribution en taille et où on prend en compte deux phénomènes :

- un tumeur de taille x croît à la vitesse strictement positive $w : x \mapsto ax \ln(b/x)$, $x_p(t) = b^{1-e^{-at}}$ étant la caractéristique associée,
- une tumeur en croissance émet des cellules malignes à un taux $\beta : x \mapsto mx^\alpha$, le terme $\beta(x_p(t))$ correspondant à la contribution de la tumeur initiale.

En b , la vitesse est nulle et on n'a pas besoin de condition au bord. Notre travail a consisté en l'étude mathématique du problème à l'aide d'outils faisant intervenir la dissipation d'entropie, nous permettant ainsi d'exhiber, dans l'esprit de la thèse de P. Michel [B74], le comportement asymptotique $\rho(t, x) \sim_{t \rightarrow +\infty} C \exp(\lambda_0 t) N(x)$, où λ_0 , dit taux malthusien, et N sont une valeur et un vecteur solution d'un problème aux valeurs propres associé par transformation de Laplace à (5.1). La constante C conserve la mémoire de la condition initiale et fait intervenir le vecteur propre dual de N . La partie numérique a consisté en le calcul de λ_0 et de C , et en l'élaboration d'un schéma nous permettant d'obtenir une approximation des solutions du problème continu. La difficulté majeure rencontrée a été la large échelle en taille, $b \sim 10^{11}$, qui nous a contraints à introduire un maillage logarithmique, très raffiné au voisinage de $x = 1$, permettant ainsi de tenir mieux compte de la condition au bord non locale. De plus, notre connaissance préalable du comportement asymptotique nous a incités à mettre l'inconnue sous forme exponentielle, afin de suivre au mieux l'évolution. Pour le problème résultant, nous avons utilisé un schéma de type Weighted Essentially Non Oscillatory (WENO) d'ordre 5 et une intégration d'ordre 4, ce qui nous permet d'obtenir une erreur numérique environ d'ordre 4. Les simulations numériques concordent en temps long avec le profil asymptotique de manière satisfaisante (voir Figure 5.1).

5.2 Cascades de protéines

Le but de ce travail est d'étudier mathématiquement et numériquement un modèle simplifié de transmission d'information de la membrane d'une cellule à son noyau, au moyen d'une cascade de réactions de phosphorylation de la protéine MAPK (Mitogen Activated Protein Kinase). La motivation est d'identifier des comportements reproductibles par des expériences *in vivo*. Nous nous intéressons en particulier aux ovocytes de grenouilles, dont on connaît les propriétés physiologiques. Par ailleurs, en raison de leur taille importante et de leur forme sphérique, nous faisons l'hypothèse d'une configuration radiale. En supposant que le seul mécanisme de transport est dû à la diffusion moléculaire, et non à des agents protéiniques spécialisés, et que l'on considère toutes les réactions chimiques de phosphorylation comme instantanées en comparaison des phénomènes spatiaux, nous proposons une équation simplifiée adimensionnée en une dimension d'espace

$$\begin{cases} \partial_t m(t, x) - \partial_{xx}^2 m(t, x) = \alpha f(m(t, x)) - m(t, x), & x > 0, t > 0, \\ m(0, x) = m^0(x), x > 0, \\ m(t, 0) = \psi(t), t > 0, \end{cases} \quad (5.2)$$

pour la concentration m de MAPK3 (MAPK di-phosphorylée) qui joue le rôle d'activateur et où α est le paramètre quantifiant la synthèse de la molécule par rapport à sa dégradation. On suppose f de forme sigmoïde, et plus précisément on considère une fraction rationnelle de degré 0, nulle en 0 et tendant vers 1 en $+\infty$. On appelle exposant de Hill, noté h , le degré du numérateur, qui

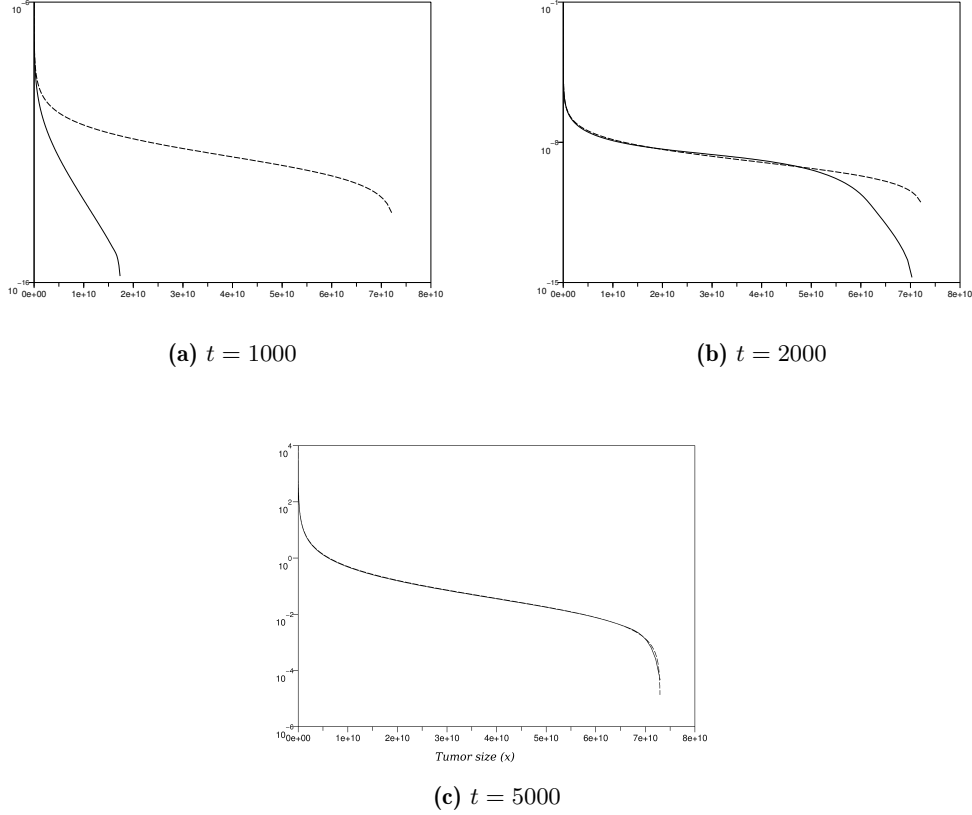


Figure 5.1 – Résultats comparés pour la répartition en taille des tumeurs à différents temps (solution numérique en trait plein et profil asymptotique en pointillés)

est aussi le degré du dénominateur. On se concentre pour l'étude mathématique sur le cas $h = 4$, typique de la cascade MAPK, et plus particulièrement sur la fonction

$$f : m \mapsto \frac{m^4}{m^4 + m^2 + 1}.$$

Au-delà d'une valeur critique α_c , il existe trois états stationnaires : 0, localement stable, a_α , instable et b_α , avec $0 < a_\alpha < b_\alpha$. L'étude menée nous a permis de montrer mathématiquement, au moyen de théorèmes de comparaison, qu'une injection suffisante de masse par la condition initiale m^0 et par la condition au bord ψ permet au système d'atteindre l'état stationnaire b_α . Par ailleurs, nous montrons l'existence d'un front de propagation à la vitesse c_* , évaluée ensuite numériquement en fonction de α . Les simulations ont été effectuées pour différents exposants de Hill $h = 2, 3, 4, 6$, qui apparaissent dans d'autres problèmes biologiques, l'enjeu étant de comprendre l'influence de ce paramètre. L'intuition biologique de la croissance de c_* par rapport à α , liée à la décroissance de la dégradation, est vérifiée sur la Figure 5.2. Par ailleurs, en effectuant des simulations pour différents jeux de données initiales et de conditions au bord dont le support et la norme infinie varient, on montre des situations où l'état stationnaire b_α est atteint et d'autres où le signal s'éteint

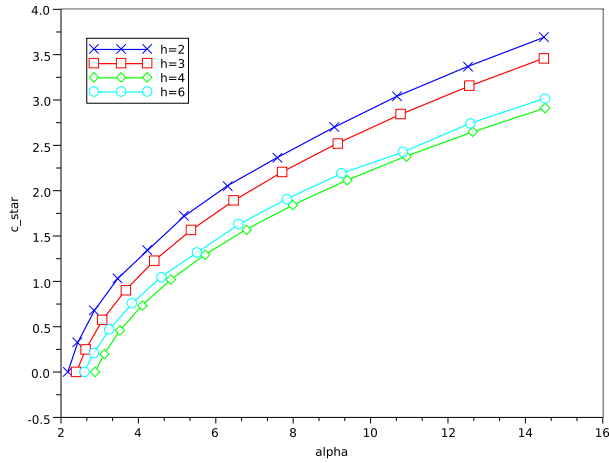
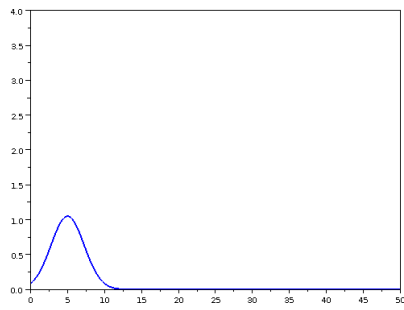
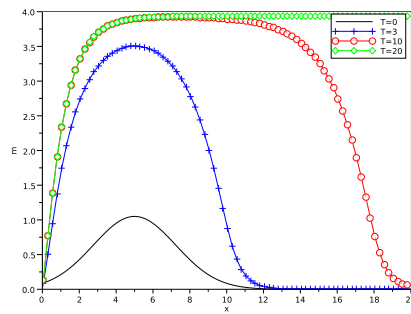


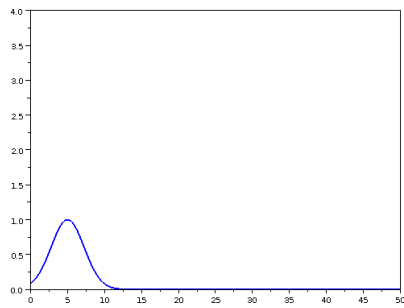
Figure 5.2 – Comportement de la vitesse asymptotique c_* par rapport à α pour différentes valeurs de l'exposant de Hill h



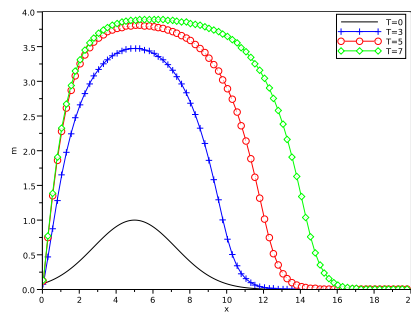
(a) Condition initiale $x \mapsto m_0(x)$, $m_{max} = 1.05$



(b) Solution $x \mapsto m(T, x)$



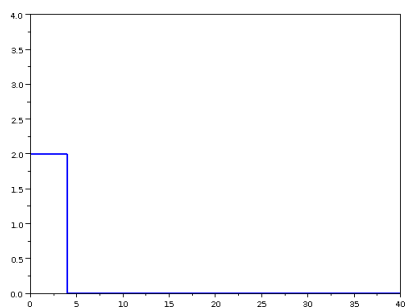
(c) Condition initiale $x \mapsto m_0(x)$, $m_{max} = 1.0$



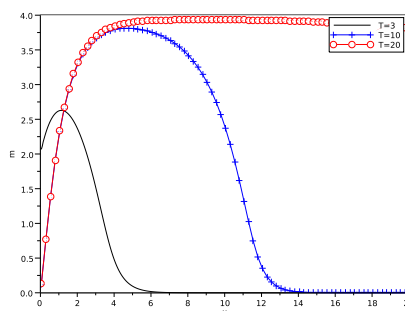
(d) Solution $x \mapsto m(T, x)$

Figure 5.3 – Influence de la condition initiale $m_0(x) = m_{max}e^{-|x-5|^2/10}$ pour une condition au bord nulle.

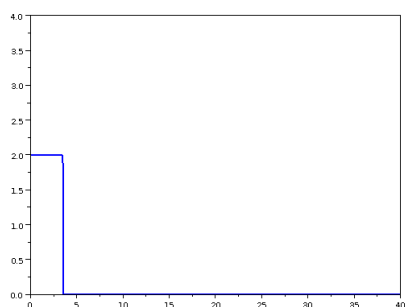
(voir Figures 5.3 et 5.4). En conclusion, ce modèle, bien que simplifié, nous a permis de répondre



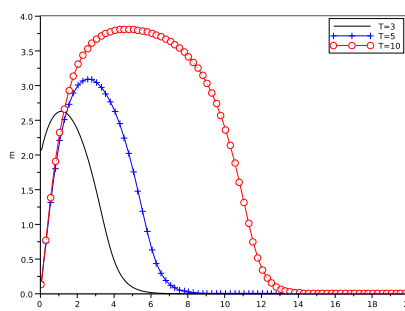
(a) Condition au bord, $\psi(t) = 2$ sur $(0, 4)$



(b) Solution $x \mapsto m(T, x)$



(c) Condition au bord, $\psi(t) = 2$ sur $(0, 3.5)$



(d) Solution $x \mapsto m(T, x)$

Figure 5.4 – Influence de la longueur du support en temps de la condition au bord ψ . La donnée initiale est nulle.

à plusieurs questions de grand intérêt pour les biologistes. Tout d'abord, le rôle de l'exposant de Hill dans le terme de réaction est contrasté : bien qu'il influe sur la vitesse de propagation c_* des fronts, il n'est pas corrélé à sa monotonie, ce qui semblait contre-intuitif. Par ailleurs, la très grande sensibilité de la réponse à la condition initiale et à celle au bord rend compte de la complexité du phénomène de cascade, même pour une situation simplifiée : on ne peut en effet pas résumer la réponse cellulaire à un seul paramètre, comme la norme infinie ou la norme L^1 . Ceci appelle des comparaisons expérimentales qui pourraient aider à cerner de nouveaux critères. La question de l'étude de géométries plus réalistes, quant à elle, demandera le développement d'une modélisation beaucoup plus poussée.

5.3 Bancs de poissons

On s'intéresse à l'équation cinétique de type Vlasov

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \nabla_v((\alpha - \beta \|v\|^2)vf) - \nabla_v((\nabla_x W \star \rho)f) = 0$$

où $f(t, x, v)$ représente la distribution massique des poissons au temps t , à la position $x \in \mathbb{R}^N$, $N = 2, 3$ et à la vitesse $v \in \mathbb{R}^N$, α étant une constante d'autopropulsion et β une constante de friction, apparaissant du fait du choix d'une loi de friction de type Rayleigh. Le potentiel W , quant à lui, modélise des phénomènes d'attraction et de répulsion qui s'expriment sous la forme

$$W : x \mapsto -C_a e^{-\|x\|/l_a} + C_r e^{-\|x\|/l_r}$$

où C_a et C_r (resp. l_a et l_r) sont des amplitudes (resp. longueurs) caractéristiques. Ce modèle cinétique est issu d'une limite en champ moyen du système à N particules de positions et vitesses $(x_i, v_i)_{1 \leq i \leq N}$

$$\begin{aligned} \dot{x}_i &= v_i, \\ \dot{v}_i &= (\alpha - \beta |v_i|^2)v_i - \frac{1}{N} \nabla_{x_i} \sum_{j \neq i} W(x_i - x_j). \end{aligned}$$

D'après les travaux de M. D'Orsogna, Y. Chuang, A. Bertozzi et L. Chayes [B71], les deux paramètres déterminants dans la formation de motifs sont $C = C_r/C_a$ et $l = l_r/l_a$. La loi de friction entraîne la concentration sur les vitesses de module $\sqrt{\alpha/\beta}$, sans prescription, cependant, de la direction. En effet, pour certains (C, l) se forment des regroupements en espace en forme de disques au sein desquels les individus se répartissent en vitesse pour moitié dans chaque direction, ceci afin d'échapper aux prédateurs en créant l'image d'une confusion. De tels régimes de paramètres sont qualifiés de catastrophiques. Notre but est, à partir de couples (C, l) de paramètres faisant apparaître ces motifs lors de simulations particulières, d'étudier leur stabilité à l'aide de l'équation cinétique, en développant des schémas numériques permettant d'observer le comportement asymptotique des bancs de poissons. La première approximation proposée, en deux dimensions d'espace et deux dimensions de vitesse, repose sur une discrétisation par différences finies, sur un maillage cartésien en espace et polaire en vitesse et est codée en Fortran 90. La convolution est traitée en remarquant que $x \mapsto \exp(-\|x\|)$ est la transformée de Fourier du symbole de l'inverse de $(Id - \Delta)^{3/2}$. L'autre discrétisation repose sur un schéma semi-lagrangien, les caractéristiques de l'équation hors convolution pouvant être calculées explicitement. Les simulations particulières étant très coûteuses en trois dimensions, nous nous intéressons au développement des codes pour les équations cinétiques qui sont potentiellement parallélisables et pourraient fournir des solutions statistiques plus rapidement, permettant ainsi l'étude d'une plus grande variété de régimes de paramètres.

5.4 Extinction de populations multitypes

On considère une population comprenant plusieurs classes. Typiquement, ici, ces subdivisions modélisent dans le premier cas les tranches d'âges d'humains et dans le deuxième des morphes, c'est à dire des variantes génétiques d'un caractère donné dans une espèce de plante à fleurs. Les deux approches probabilistes de l'extinction abordées ici sont en réalité deux façons très différentes

d'appréhender le problème, sous l'angle des taux de reproduction par classe (processus de branchement en temps discret), supposées homogènes en la taille des classes pour l'une, et sous la vision des processus de naissance et de mort en temps continu, les probabilités d'extinction dépendant de la taille initiale des classes (marche aléatoire). Avec les processus de branchement, on considère une population initiale composée d'une seule classe i , et on définit la probabilité q_i d'extinction de la population totale en temps fini. En ce qui concerne la marche aléatoire, on part d'une population initiale composée de manière quelconque, et on cherche à savoir si, en temps fini, une des classes peut s'éteindre, entraînant alors la disparition de l'autre, car il s'agit de reproduction sexuée. Dans les deux cas, on va étudier une fonction génératrice afin de caractériser la probabilité d'extinction.

5.4.1 Conditions extérieures pour des processus de branchement

On s'intéresse à des arbres markoviens binaires (MBT en anglais) pour n classes, qui modélisent le cas où les individus ne peuvent donner naissance qu'à un seul enfant à la fois, mais sous l'influence de conditions extérieures qui peuvent altérer la durée de vie ou la fécondité. On considère que l'environnement peut se trouver dans m configurations, la transition étant modélisée par une chaîne de Markov de distribution stationnaire π . Pour la distribution jointe de $\mathbf{Z}(t) \in \mathbb{N}^n$ et de $\xi(t)$, où \mathbf{Z} a pour composantes la taille de chaque classe et où $\xi : \mathbb{R}^+ \rightarrow \{1, \dots, m\}$ désigne l'état dans lequel se trouve l'environnement, on définit la fonction génératrice $\mathbf{F} : (\mathbf{s}, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^+ \mapsto F(\mathbf{s}, t) \in \mathbb{R}^{n \times m}$ par

$$F_{ij}(\mathbf{s}, t) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{N}^n} \mathbb{P}[\mathbf{Z}(t) = \mathbf{k} | (\xi(t) = j, \mathbf{Z}(0) = \mathbf{e}_i)] s_1^{k_1} \dots s_n^{k_n},$$

où \mathbf{e}_i est le i ème vecteur de la base canonique. On trouve les probabilités d'extinction de la population totale en fonction de la classe de départ, composantes du vecteur $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^{1 \times n}$ grâce à la formule

$$\mathbf{q} = \lim_{t \rightarrow +\infty} \mathbf{F}(0, t) \cdot \mathbf{1}$$

où $\mathbf{1} \in \mathbb{R}^m$ désigne le vecteur colonne dont toutes les composantes sont 1. Or on peut montrer que la fonction \mathbf{F} satisfait à l'équation aux dérivées partielles de transport

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{F}(\mathbf{s}, t) - (\nabla_{\mathbf{s}} \mathbf{F}(\mathbf{s}, t)) \cdot A(\mathbf{s}) = \mathbf{F}(\mathbf{s}, t) \cdot Q \\ \mathbf{F}(\mathbf{s}, 0) = \mathbf{s} \cdot \pi, \end{cases}$$

où $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{mn \times m}$ contient les taux de mort et de reproduction des classes dans les différents états de l'environnement extérieur et est polynomiale de degré 2 en la variable s , et Q , représentant l'environnement aléatoire extérieur, peut être non local en s . Le but était donc de construire des schémas numériques performants permettant d'approcher la limite en temps long de \mathbf{F} . Nous avons traité le cas $n = 1$ avec succès, en considérant un splitting de la partie terme-source et de la partie transport, pour laquelle nous avons utilisé d'une part l'expression explicite des caractéristiques et d'autre part une discrétisation d'ordre 2 de type Lax-Wendroff. La difficulté majeure réside dans le fait que les vitesses de transport apparaissant dans le couplage ont deux racines, dont l'une est toujours $s = 1$ et l'autre peut varier suivant l'équation qu'on considère, d'où la complexité du système en temps grand. Ces travaux constituent deux chapitres de la thèse de Sophie Hautphenne [B72].

5.4.2 Reproduction de plantes distyles

On s'intéresse à la reproduction sexuée de fleurs distyles, c'est à dire possédant deux variantes génétiques d'un caractère, dites morphes. Certaines variétés de narcisses [B70] ont cette particularité. Bien que chaque fleur possède les deux organes reproducteurs côte-à-côte, chaque morphe est incompatible avec toutes les plantes du même morphe, y compris lui-même, et ne peut être fécondé que par du pollen provenant d'individus de l'autre morphe. On s'intéresse à la probabilité d'extinction d'une des deux classes, dont on note les tailles X et Y , de la population. Le modèle de naissances et de morts discret en temps de la reproduction des morphes est établi à partir de celui proposé par S. Billiard et V. C. Tran [B68] et repose sur une chaîne de Markov dont les transitions sont de la forme, pour $i, j \in \mathbb{N}^*$,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{(X_0, Y_0)=(i, j)}[(X_1, Y_1) = (i - 1, j)] &= \frac{d i}{(r + d)(i + j)}, & \mathbb{P}_{(X_0, Y_0)=(i, j)}[(X_1, Y_1) = (i + 1, j)] &= \frac{r}{2(r + d)}, \\ \mathbb{P}_{(X_0, Y_0)=(i, j)}[(X_1, Y_1) = (i, j - 1)] &= \frac{d j}{(r + d)(i + j)}, & \mathbb{P}_{(X_0, Y_0)=(i, j)}[(X_1, Y_1) = (i, j + 1)] &= \frac{r}{2(r + d)}, \end{aligned}$$

où r est le taux de production des ovules et où la durée de vie d'un individu est supposée suivre une loi exponentielle de moyenne $1/d$, $d > 0$. La difficulté nouvelle réside dans l'aspect non homogène des probabilités de transition de la marche aléatoire. On suppose $r > d$, l'extinction presque sûre ayant été prouvée dans le cas contraire [B68]. On appelle τ_0 l'instant où une des deux populations s'éteint, entraînant la disparition de l'autre. Pour $i, j \in \mathbb{N}$, on introduit les probabilités d'extinction en temps fini

$$p_{i, j} = \mathbb{P}_{(X_0, Y_0)=(i, j)}(\tau_0 < \infty)$$

et la fonction génératrice qui leur est liée

$$P(x, y) = \sum_{i, j \geq 1} p_{i, j} x^i y^j.$$

Les deux populations ayant des caractéristiques identiques, on a symétrie :

$$\forall i, j \geq 0, \quad p_{i, j} = p_{j, i}$$

et, l'extinction de l'une impliquant celle de l'autre

$$\forall i \geq 0, \quad p_{i, 0} = 1.$$

Le but est d'étudier la fonction P et de comprendre le comportement de $p_{i, j}$ quand i, j tendent vers l'infini, à $i + j$ fixé et de vérifier si on a une probabilité de survie strictement positive quelle que soit la condition initiale.

En utilisant la propriété de Markov forte, on peut trouver une récurrence sur i, j qui permet de calculer en $O(ij)$ opérations la probabilité $p_{i, j}$:

$$p_{i, j} = \frac{d i}{(r + d)(i + j)} p_{i-1, j} + \frac{d j}{(r + d)(i + j)} p_{i, j-1} + \frac{r}{2(r + d)} p_{i, j+1} + \frac{r}{2(r + d)} p_{i+1, j}.$$

Ceci implique que la fonction génératrice P satisfait à une équation aux dérivées partielles de transport stationnaire

$$AP(x, y) = h(x, y, P),$$

où

$$\begin{aligned} AP(x, y) &= Q(x, y) \frac{\partial P}{\partial x}(x, y) + Q(y, x) \frac{\partial P}{\partial y}(x, y) + R(x, y)P(x, y), \\ Q(x, y) &= (r + d)x - \frac{r}{2} - \frac{r}{2} \frac{x}{y} - dx^2, \\ R(x, y) &= \frac{r}{2x} + \frac{r}{2y} - dx - dy, \end{aligned}$$

et

$$h(x, y, P) = -\frac{r}{2} \left(\sum_{i \geq 1} p_{i,1} i x^i + \sum_{j \geq 1} p_{1,j} j y^j \right) + d \left(\sum_{i \geq 1} x^i y + \sum_{j \geq 1} y^j x \right).$$

On peut calculer explicitement les caractéristiques $s \mapsto (x(s), y(s))$ issues d'un point (x_0, y_0) . Elles atteignent toutes $(0, 0)$, point singulier, en un temps fini $s_0(x_0, y_0)$, ce qui permet alors de donner une formule explicite de P en fonction des $p_{i,1}$:

$$\begin{aligned} P(x_0, y_0) &= \frac{r}{2} \sum_{i \geq 1} p_{i,1} \int_0^{s_0} i \left((x(u))^i + (y(u))^i \right) e^{\int_0^u R(x(\alpha), y(\alpha)) d\alpha} du \\ &\quad - d \int_0^{s_0} x(u)y(u) \left(\frac{1}{1-x(u)} + \frac{1}{1-y(u)} \right) e^{\int_0^u R(x(\alpha), y(\alpha)) d\alpha} du. \end{aligned}$$

Nous travaillons actuellement à l'exploitation des propriétés de cette formule, afin de déterminer si elle peut fournir des informations sur le comportement des probabilités d'extinction quand les populations initiales sont de grande taille, notamment dans l'optique de savoir s'il existe un seuil critique en dessous duquel la survie ne serait pas assurée.

Biologie

- [B68] S. Billiard and V. C. Tran. A stochastic sporophytic self-incompatibility model. En préparation, 2010.
- [B69] J. A. Carrillo, M. R. D’Orsogna, and V. Panferov. Double milling in self-propelled swarms from kinetic theory. *Kinetic and Related Models*, 2(2) :363–378, 2009.
- [B70] A. Césaro. Le polymorphisme pour la longueur du style en tant qu’intermédiaire dans l’évolution de la distylie : études expérimentales et théoriques chez narcissus assoanus (amaryllidacées). *Thèse de doctorat*, Université de Montpellier 2, 2004.
- [B71] M. R. D’ Orsogna, Y. L. Chuang, A. L. Bertozzi, and L. S. Chayes. Self-propelled particles with soft-core interactions : patterns, stability, and collapse. *Phys Rev Lett*, 96(10) :104302, Mar 2006.
- [B72] S. Hautphenne. An algorithmic look at phase-controlled branching processes. *Thèse de doctorat*, Université Libre de Bruxelles, 2009.
- [B73] K. Iwata, K. Kawasaki, and N. Shigesada. A dynamical model for the growth and size distribution of multiple metastatic tumors. *Journal of Theoretical Biology*, 203 :177–186, 2000.
- [B74] P. Michel. Principe d’entropie généralisée et dynamique de populations structurées. *Thèse de doctorat*, Université Paris IX-Dauphine, novembre 2005.