AIX-MARSEILLE UNIVERSITÉ

École Doctorale Sciences pour l'Ingénieur :
Mécanique, Physique, Micro et Nanoélectronique

THÈSE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR D'AIX-MARSEILLE UNIVERSITÉ

Discipline : Mécanique et physique des fluides

Présentée et soutenue le 11 juillet 2014

Approximations numériques en situations complexes : applications aux plasmas de tokamak

Bouchra BENSIALI

Directeur de thèse : **Guillaume CHIAVASSA**
Co-directeur de thèse : **Jacques LIANDRAT**

Rapporteurs :

Mme Rosa DONAT	Professeur, Universitat de València
M. Nicholas KEVLAHAN	Professeur, McMaster University

Jury :

M. Jean BACCOU	Ingénieur, IRSN
M. Guillaume CHIAVASSA	Maître de Conférences, ECM
Mme Rosa DONAT	Professeur, Universitat de València
M. Nicholas KEVLAHAN	Professeur, McMaster University
M. Jacques LIANDRAT	Professeur, ECM
M. Richard PASQUETTI	Directeur de Recherche CNRS, J. A. Dieudonné
M. Eric SERRE	Directeur de Recherche CNRS, M2P2

Table des matières

Introduction générale 1

I Schémas de subdivision et calcul de trajectoires 4

1 Introduction et résumé 5
1.1 Motivation physique . . . 5
1.2 Méthodes d'interpolation et schémas de subdivision . . . 7
1.3 Résumé détaillé de l'article . . . 8

2 Nonlinear subdivision schemes in the simulation of particle trajectories 15
2.1 Introduction . . . 15
2.2 Numerical methods . . . 16
2.2.1 Classical interpolation methods . . . 16
2.2.2 Subdivision schemes . . . 17
2.3 Trajectory evaluation . . . 19
2.4 Univariate case . . . 20
2.4.1 Steady state velocity field . . . 20
2.4.2 Time dependent velocity field . . . 25
2.5 Bivariate case . . . 26
2.5.1 Steady state potential . . . 26
2.5.2 Nonsmooth potential . . . 34
2.5.3 Time dependent potential . . . 35
2.6 Conclusion . . . 44

Bibliographie de la partie I 46

II Pénalisation et conditions aux limites de type Neumann/Robin 49

3 Introduction et motivations 50
3.1 Problématique physique . . . 50
3.2 Méthodes de domaines fictifs et méthodes de pénalisation . . . 53
3.3 Les différentes géométries considérées . . . 55

4 Problème elliptique 57
4.1 Définition du problème . . . 57
4.2 Résultats théoriques . . . 58
4.2.1 Existence et unicité . . . 58
4.2.2 Convergence . . . 59
4.2.3 Estimation d'erreur . . . 62
4.2.4 Stabilité . . . 63
4.3 Pénalisation du problème physique . . . 65

4.4 Méthode numérique . . . 66
4.4.1 Discrétisation d'ordre 1 . . . 66
4.4.2 Discrétisation d'ordre 2 . . . 70
4.5 Résultats numériques . . . 73
4.5.1 Conditionnement . . . 74
4.5.2 Schéma centré . . . 74
4.5.3 Tests numériques . . . 76

5 Problème parabolique **80**
5.1 Équation de la chaleur . . . 80
5.1.1 Existence et unicité . . . 80
5.1.2 Discrétisation en temps . . . 82
5.2 Application de la pénalisation . . . 84
5.3 Pénalisation du problème physique . . . 85
5.4 Méthode numérique . . . 86
5.4.1 Schéma d'ordre 1 . . . 86
5.4.2 Schéma de Crank-Nicolson . . . 88
5.5 Résultats numériques . . . 89
5.5.1 Solutions de référence . . . 89
5.5.2 Tests numériques . . . 90

6 Applications et ouvertures **95**
6.1 Problème non linéaire . . . 95
6.1.1 Discrétisation . . . 95
6.1.2 Test numérique . . . 96
6.2 Interaction plasma-paroi dans un tokamak . . . 99
6.3 Extension de la pénalisation au cas multidimensionnel . . . 100
6.3.1 Première configuration . . . 100
6.3.2 Seconde configuration . . . 104

Bibliographie de la partie II **107**

Conclusion générale **110**

Introduction générale

Face à la demande mondiale d'énergie en constante augmentation, la fusion nucléaire représente un potentiel énergétique prometteur et fait l'objet de plusieurs recherches actuelles. Ainsi, le projet de réacteur expérimental ITER, actuellement en construction à Cadarache, vise à démontrer la faisabilité de la fusion nucléaire comme nouvelle source d'énergie.

La fusion est une réaction nucléaire au cours de laquelle deux noyaux atomiques légers fusionnent pour donner naissance à un noyau plus lourd. La fusion s'accompagne d'une importante libération d'énergie. Pour réaliser la réaction de fusion, il faut pouvoir rapprocher deux noyaux chargés positivement, ce qui ne peut se produire qu'en portant la matière à une très haute température, de l'ordre de 100 millions de degrés, afin de vaincre la répulsion électrostatique. Dans ces conditions, la matière est à l'état de plasma : les atomes s'ionisent et on obtient un mélange d'ions et d'électrons.

Pour pouvoir déclencher et entretenir les réactions de fusion, il faut arriver à confiner le plasma dans une région suffisamment dense et chaude. Une des voies explorées dans ce sens est le confinement magnétique. Le principe est de confiner le plasma avec des champs magnétiques puissants, en exploitant la propriété qu'ont les particules du plasma, électriquement chargées, de suivre les lignes de champ magnétique en décrivant des trajectoires en hélice autour de celles-ci. Il s'agit alors de créer une configuration de champ magnétique qui permet de confiner efficacement le plasma. Le projet ITER repose sur le confinement magnétique du plasma dans une machine appelée tokamak. Dans un tokamak, la configuration magnétique utilisée correspond à des lignes de champ hélicoïdales qui s'enroulent autour de surfaces toriques emboîtées, appelées surfaces magnétiques. La structure hélicoïdale des lignes de champ est générée par la combinaison de deux champs magnétiques : un champ magnétique toroïdal, créé par des bobines toroïdales extérieures, et un champ magnétique poloïdal, créé par un courant circulant toroïdalement dans le plasma (voir Fig. 1).

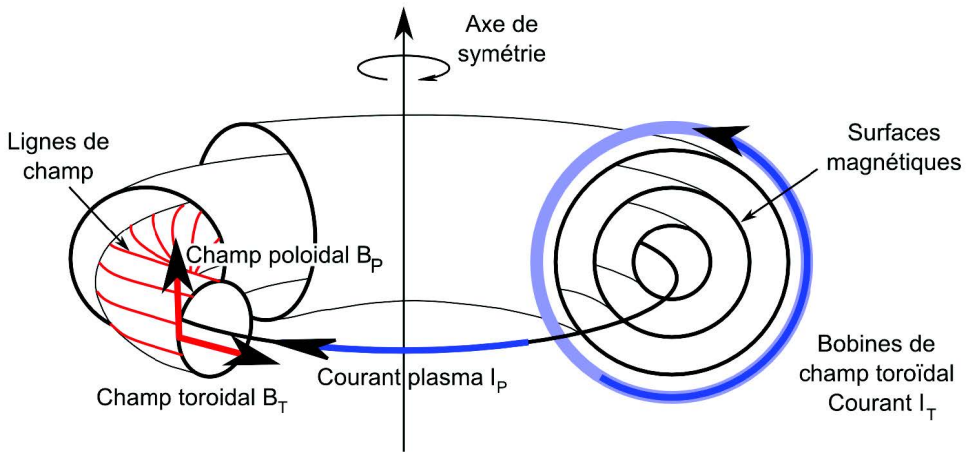


Fig. 1: Configuration magnétique du tokamak.

Malgré cette configuration magnétique, le confinement du plasma n'est pas parfait. En effet, d'importantes pertes d'énergie et un transport non négligeable de particules à travers les lignes de champ magnétique ont été observés expérimentalement. Ce transport déconfinant a été qualifié d'anormal car il est de plusieurs ordres de grandeur supérieur aux prédictions basées uniquement sur les collisions coulombiennes entre particules. Ce transport anormal est généralement attribué aux effets de la turbulence due aux fluctuations des champs électrique et magnétique. Parmi les mécanismes principaux de ce transport turbulent, responsable de la dégradation du confinement, les fluctuations du champ électrique engendrent une vitesse de dérive électrique perpendiculairement aux lignes de champ.

Le déconfinement du plasma conduit les particules à diffuser vers le bord du plasma et finalement à rencontrer la paroi. De plus, même si dans le plasma central (au centre du tokamak), les lignes de champ magnétique sont fermées, en s'éloignant du centre vers le bord du tokamak, il existe nécessairement une surface magnétique au-delà de laquelle les lignes de champ rencontrent des obstacles solides. Cette surface limite définit une région dite Scrape-Off Layer (SOL) où les lignes de champ sont ouvertes (voir Fig. 2). Dans cette région, le plasma entre alors en interaction avec la paroi. Ces interactions, nécessaires pour la récupération de l'énergie, influencent les caractéristiques du plasma de cœur. La maîtrise des phénomènes à l'intérieur de la SOL est un aspect essentiel pour la garantie de bonnes performances du tokamak.

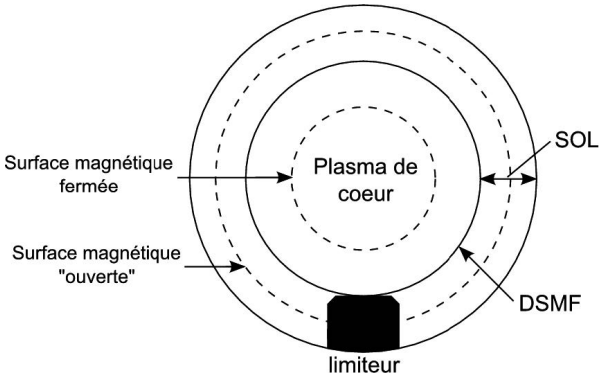


Fig. 2: Coupe poloïdale du tokamak.

Le but de cette thèse est le développement et l'analyse de méthodes d'approximation numérique pour l'étude de deux problématiques fondamentales dans les plasmas de tokamak, le transport turbulent de particules et la modélisation du plasma au voisinage d'une paroi solide. Nos travaux ont été réalisés dans le cadre du projet ANR "ESPOIR" (Edge Simulation of the Physics Of ITER Relevant turbulent transport, 2009–2013) fédérant les laboratoires M2P2 (Mécanique, Modélisation et Procédés Propres), LATP (Laboratoire d'Analyse, Topologie, Probabilités), J. A. (Jean Alexandre) Dieudonné, l'INRIA (Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique) Sophia Antipolis et l'IRFM (Institut de Recherche sur la Fusion par confinement Magnétique) / CEA (Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives) Cadarache, et dont un des objectifs est le développement de codes de simulation des plasmas de tokamak, basés sur une approche fluide.

Partie I

Dans la première partie de notre travail, nous nous plaçons dans le cadre du transport de particules passives par un champ de vitesse connu. Il s'agit donc de tracer le portrait de phase d'une équation différentielle du type $\dot{x} = v(x)$ et donc d'approcher numériquement la solution de $\dot{x} = v(x)$, $x(0) = x_0$ pour tout x_0, qui traduit le transport lagrangien d'une particule initialement en x_0. Nous supposons que le champ de vitesse $v(x)$ n'est connu que sur une grille de points, comme c'est le cas si le champ de vitesse est issu d'une simulation numérique eulérienne. La difficulté principale associée à la mise en œuvre d'une méthode de type différences finies dans cette situation provient de la nécessité de disposer d'une approximation du champ de vitesse v en des positions n'appartenant pas à la grille initiale. Il s'agit d'un problème d'interpolation dont la résolution interfère avec la convergence de l'approximation aux différences finies quand le pas de temps tend vers 0. Nous comparons différentes solutions et analysons une méthode originale basée sur les schémas de subdivision. Le recours aux schémas de subdivision est motivé par les champs de vitesse observés dans un tokamak qui présentent de forts gradients et fluctuations conduisant, pour l'interpolation, au phénomène de Gibbs lorsque les méthodes d'interpolation classiques sont utilisées.

Nous utilisons ensuite la méthode introduite plus haut pour l'analyse de la propagation de particules dans un champ de vitesse échantillonné modélisant la turbulence dans le plasma de bord d'un tokamak. Ce champ est issu du code TOKAM-2D [1]. Nous nous intéressons aux trajectoires de particules émises dans des structures de densité définies comme des zones fermées de sur-densité se propageant au voisinage de la paroi. En particulier nous comparons la trajectoire d'un ensemble de particules à la trajectoire de la structure elle-même ; nous montrons notamment que, contrairement à ce que l'on pourrait croire a priori, les particules ne restent pas piégées au sein de la structure et la quittent après un temps de séjour moyen que nous évaluons.

Partie II

La deuxième partie du manuscrit est consacrée à la simulation eulérienne au voisinage de parois. Nous nous intéressons aux équations aux dérivées partielles de la description fluide du plasma pour lesquelles les conditions aux limites sont de type Neumann $(\frac{\partial u}{\partial n} = g)$ ou Robin $(\frac{\partial u}{\partial n} + \alpha u = g)$. La prise en compte de telles conditions aux limites sur une paroi de forme quelconque est en général difficile et nous proposons une méthode de type domaine fictif avec pénalisation pour la résolution de cette difficulté. Le principe général des méthodes de domaines fictifs consiste à étendre un problème initialement posé dans un domaine géométrique complexe à un domaine plus grand mais plus simple. Les méthodes de type pénalisation reposent sur l'ajout de termes de forçage dans les équations initiales. Ces termes de forçage sont contrôlés par un paramètre de pénalisation η. L'objectif de la méthode est que, quand η tend vers 0, la limite de la restriction de la solution u_η, du problème sur le domaine fictif, au domaine initial soit égale à la solution du problème initial. Nous effectuons une étude théorique de la méthode de pénalisation proposée dans le cas de problèmes elliptiques et paraboliques linéaires classiques, ainsi que l'analyse numérique d'une méthode d'approximation obtenue en discrétisant le problème pénalisé par un schéma aux différences finies.

La méthode de pénalisation développée est ensuite testée sur une équation d'advection-diffusion non linéaire en vue de son application aux équations portant sur les températures ionique et électronique dans le cadre de la modélisation de l'interaction plasma-paroi dans un tokamak, les conditions aux limites associées étant de type Neumann ou Robin sur la paroi du tokamak.

Première partie

Schémas de subdivision et calcul de trajectoires

1 Introduction et résumé

La première partie de ce travail est consacrée au développement de méthodes d'interpolation basées sur les schémas de subdivision pour le calcul de trajectoires de particules transportées par un champ de vitesse échantillonné. Cette étude est motivée par la simulation du transport turbulent de particules dans un tokamak.

Ce travail a donné lieu à une publication intitulée "Comparison of different interpolation operators including nonlinear subdivision schemes in the simulation of particle trajectories" dans Journal of Computational Physics [2]. L'article est reproduit au Chapitre 2 avec quelques modifications.

Le présent chapitre introduit la motivation physique et les schémas de subdivision avant de présenter, par un résumé détaillé des principaux résultats, notre contribution sus-citée.

1.1 Motivation physique

L'analyse du transport de particules au sein d'un tokamak est d'une très grande importance pour les raisons suivantes :

1. Le fonctionnement du tokamak repose sur un confinement des particules, réalisé par un fort champ magnétique. L'objectif est que les particules se déplacent le long de lignes de champ magnétique fermées. Cependant, même en présence de très fort confinement magnétique, on observe expérimentalement le transport de particules chargées et à haut niveau d'énergie au travers des lignes de champ. Ce transport dit "anormal" est généralement associé à la turbulence plasma à petite échelle et est particulièrement important dans le plasma de bord : on parle de déconfinement par transport turbulent [3].

2. Il existe à l'intérieur du plasma des impuretés qui proviennent, en particulier, de l'interaction avec les parois. Ces impuretés sont transportées par le champ de vitesse du plasma. Elles influencent fortement le fonctionnement du tokamak : d'une part, les impuretés qui pénètrent au cœur du plasma augmentent les pertes d'énergie par radiation et contribuent à son refroidissement ; elles peuvent donc entraîner l'arrêt de la réaction de fusion, d'autre part, les impuretés à haute température qui arrivent en bord du plasma peuvent rentrer en interaction avec les parois et contribuent donc fortement aux phénomènes d'érosion ou de déposition aux parois. La compréhension des mécanismes de transport qui contrôlent les impuretés est donc un élément crucial pour les performances et la sécurité des dispositifs de fusion.

3. L'analyse de ces phénomènes d'érosion ou de déposition pour des parois exposées à un plasma est réalisée par injection de traceurs à l'intérieur du plasma. L'analyse de leur migration au voisinage des parois renseigne sur les risques d'érosion ou de déposition en présence d'impuretés [4].

Dans un cadre plus général [5–8], l'étude des trajectoires de traceurs advectés par un champ turbulent est l'ingrédient principal pour le développement de modèles stochastiques lagrangiens. Ces modèles interviennent de manière cruciale dans la modélisation dans de

multiples contextes comme la combustion, la dispersion de polluants, la formation des nuages, le contrôle de mélanges industriels ou l'étude de la corrosion.

Expérimentalement, ces études sont difficiles en particulier à cause des différents ordres de grandeur qui séparent les échelles spatiales et temporelles mises en jeu. Les simulations numériques directes sont une alternative intéressante, à condition d'être capable de simuler de façon précise et rapide un grand nombre de trajectoires sur des temps longs. Le coût associé aux méthodes de résolution directes des équations fluides limite la taille des grilles du calcul eulérien et implique donc la mise en place de techniques d'interpolation sophistiquées dans la calcul lagrangien.

Nous nous intéressons plus spécifiquement à la turbulence dans le plasma de bord, caractérisée par la présence de structures de densité cohérentes, appelées avalanches, qui se propagent du cœur vers la paroi [9]. Outre l'intérêt pour la caractérisation de la turbulence, analyser le comportement des particules tests par rapport à la structure fluide est important pour des raisons de sûreté de l'appareil. Les avalanches peuvent être dangereuses parce qu'en arrivant de zones plus proches du centre du plasma, leur température est très élevée et si elles ne se refroidissent pas avant de toucher la paroi, elles pourront l'endommager considérablement. Ces structures peuvent donc avoir un impact négatif sur la durée de vie des composants exposés au plasma.

Le transport turbulent dans les plasmas de tokamak est dû principalement à l'effet des fluctuations turbulentes du champ électrique. Ces fluctuations donnent lieu à une vitesse de dérive électrique perpendiculairement aux lignes de champ, dont l'expression est donnée par [6, 10, 11]

$$\mathbf{v}_d = \frac{1}{B^2}\mathbf{E} \times \mathbf{B}, \tag{1.1.1}$$

où $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ est le champ électrique dérivant d'un potentiel ϕ et $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ est le champ magnétique. La Fig. 1.1.1 donne une illustration de ce transport turbulent en montrant une coupe poloïdale (perpendiculaire au champ magnétique) d'un tokamak : la vitesse de dérive (1.1.1) a pour effet de faire dériver les particules qui peuvent alors diffuser vers le bord du tokamak.

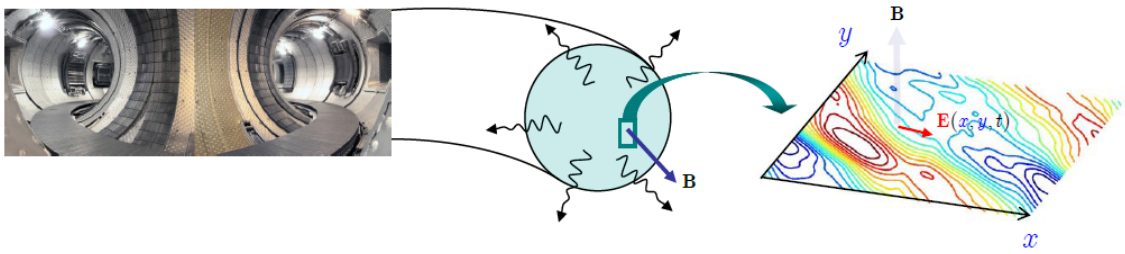


FIG. 1.1.1: Illustration du transport turbulent de particules dans un tokamak par la vitesse de dérive électrique (1.1.1).

Les particules tests sont des particules chargées individuelles qui ne modifient pas le potentiel électrique. Celles-ci peuvent modéliser les impuretés du plasma qui sont des particules issues de l'interaction entre le plasma et la paroi. Ces impuretés, advectées par les potentiels turbulents qui caractérisent la région de bord du plasma, peuvent atteindre la région de plasma de cœur et détériorer de façon significative le confinement et ainsi les performances du tokamak. Pour ces raisons, il est important de comprendre leur dynamique. Les équations de mouvement des particules tests, évoluant sous l'effet de la vitesse de

dérive (1.1.1), sont de la forme

$$\begin{cases} \dot{x} = -\partial_y \phi(x, y, t) \\ \dot{y} = \partial_x \phi(x, y, t). \end{cases} \tag{1.1.2}$$

En pratique, le champ de vitesse qui régit le mouvement des particules tests n'est connu que de façon discrète car il est obtenu à partir d'un code numérique ou d'une mesure expérimentale. La résolution par différences finies des équations (1.1.2) demande, si $(t_n)_{0 \leq n \leq N}$ représente la segmentation temporelle, l'évaluation du membre de droite aux points (x_n, y_n, t_n) qui ne coïncident pas en général avec la grille d'évaluation de ϕ. Il est donc nécessaire d'avoir recours à des méthodes d'interpolation pour évaluer le second membre en des points arbitraires différents des points où le champ est connu. Par ailleurs, les champs étudiés présentent de forts gradients et fluctuations, ce qui nécessite le développement de méthodes d'interpolation robustes.

1.2 Méthodes d'interpolation et schémas de subdivision

Initialement introduits pour la construction de courbes ou de surfaces, les schémas de subdivision sont aujourd'hui utilisés dans la conception assistée par ordinateur et trouvent des applications dans le traitement d'images et le calcul scientifique [12, 13].

L'ingrédient de base d'un schéma de subdivision linéaire interpolant, dyadique, stationnaire et uniforme est un opérateur dans $\ell^\infty(\mathbb{Z})$, l'ensemble des suites bornées, qui s'écrit

$$S\colon \begin{cases} \ell^\infty(\mathbb{Z}) \longrightarrow \ell^\infty(\mathbb{Z}) \\ f = (f_n)_{n\in\mathbb{Z}} \longmapsto ((Sf)_n)_{n\in\mathbb{Z}} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} (Sf)_{2n} = f_n \\ (Sf)_{2n+1} = \sum_k a_{2n+1-2k} f_k, \end{cases} \end{cases} \tag{1.2.1}$$

où $(a_n)_{n\in\mathbb{Z}}$ est un ensemble de coefficients nuls sauf pour un nombre fini d'indices, qui définit le schéma. En partant d'une suite $f^0 = (f_n^0)_{n\in\mathbb{Z}}$ correspondant à une grille régulière $(x_n^0 = n\Delta x)_{n\in\mathbb{Z}}$, et en définissant $f_n^{j+1} = (Sf^j)_n$, $n \in \mathbb{Z}$, $j \in \mathbb{N}$, un schéma de subdivision S convergent définit, pour toute suite initiale f^0, une fonction continue $S^\infty f^0$ telle que $\lim_{j\to+\infty} \sup_n |f_n^j - S^\infty f^0(x_n^j)| = 0$ où $x_n^j = n2^{-j}\Delta x$. Numériquement les points (x_n^j, f_n^j) se concentrent sur une courbe continue comme montré sur la Fig. 1.2.1 illustrant le processus de subdivision et sa convergence.

En faisant dépendre les coefficients $(a_n)_{n\in\mathbb{Z}}$ de la position n (resp. de l'échelle j), on définit les schémas de subdivision non uniformes (resp. non stationnaires). Les faire dépendre de f conduit aux schémas de subdivision non linéaires.

Dans la suite, deux schémas de subdivision convergents seront utilisés : le schéma de Lagrange et le schéma PPH (Piecewise Parabolic Harmonic) [12, 14]. Le premier est un schéma linéaire tandis que le second est non linéaire.

Ces schémas ainsi que les méthodes d'interpolation classiques utilisées (interpolation polynomiale, interpolation spectrale [15], interpolation par splines cubiques [16, 17]) sont détaillés en Section 2.2. Notons que l'introduction du schéma PPH est principalement motivée par le fait qu'il ne produit pas le phénomène de Gibbs (génération d'oscillations près des discontinuités) tout en préservant les autres bonnes propriétés du schéma de Lagrange. Ces autres propriétés concernent la régularité, l'ordre de convergence et le caractère local ou global de l'implémentation. Elles sont résumées dans le Tab. 2.2.1 pour les différentes méthodes d'interpolation utilisées.

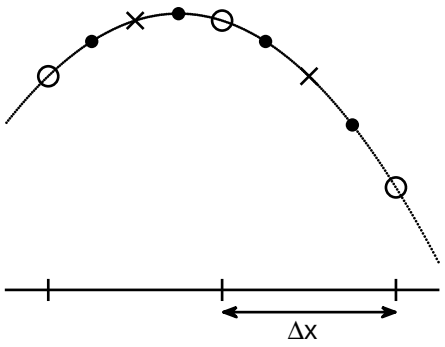


FIG. 1.2.1: Processus de subdivision : les cercles correspondent à $f_n^0, -1 \leq n \leq 1$, les croix correspondent à $f_{2n+1}^1, -1 \leq n \leq 0$, les points correspondent à $f_{2n+1}^2, -2 \leq n \leq 1$ et la ligne continue représente $S^\infty f^0$.

1.3 Résumé détaillé de l'article

Le problème général auquel on s'intéresse dans l'article est le calcul de la trajectoire $\mathbf{X}(t)$ d'une particule soumise à un champ de vitesse $\mathbf{F}$ suivant l'équation de mouvement

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{X}} = \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) \quad t \in [t_0, T] \\ \mathbf{X}(t_0) = \mathbf{X}_0. \end{cases} \tag{1.3.1}$$

On suppose $\mathbf{F}$ connu uniquement sur une grille régulière sous la forme de valeurs discrètes $\mathbf{F}_h$, h représentant le pas de la grille. L'intégration numérique de l'équation (1.3.1) dans ce cadre implique l'évaluation de $\mathbf{F}$ en des points arbitraires qui ne coïncident pas forcément avec les points de la grille et requiert donc l'utilisation de méthodes d'interpolation. Le problème est alors remplacé par

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{X}}_{h,\text{interp}} = \mathbf{F}_{h,\text{interp}}(\mathbf{X}_{h,\text{interp}}, t) \quad t \in [t_0, T] \\ \mathbf{X}_{h,\text{interp}}(t_0) = \mathbf{X}_0, \end{cases} \tag{1.3.2}$$

où $\mathbf{F}_{h,\text{interp}}$ interpole les valeurs $(\mathbf{F}_h)$.

Notre objectif étant d'étudier des situations impliquant des champs de vitesse $\mathbf{F}$ avec de forts gradients, nous commençons par considérer un champ de vitesse unidimensionnel stationnaire présentant une discontinuité d'amplitude $d > 0$. Plus précisément, on considère l'équation autonome

$$\begin{cases} \dot{x} = v(x) \quad t \in [0, T] \\ x(0) = x_0 = 0.2, \end{cases} \tag{1.3.3}$$

avec

$$v(x) = \begin{cases} 0.5 & \text{si } x < 0.5 \\ 0.5 + d = v_p & \text{si } x \geq 0.5. \end{cases} \tag{1.3.4}$$

Le second membre (1.3.4) de l'équation différentielle (1.3.3) étant discontinu, celle-ci est à comprendre ici sous la formulation intégrale

$$x(t) = x_0 + \int_0^t v(x(s))\, ds, \tag{1.3.5}$$

dont l'unique solution est

$$x(t) = \begin{cases} 0.2 + 0.5t & \text{si } t < 0.6 \\ 0.5 + v_p(t - 0.6) & \text{si } t \geq 0.6, \end{cases} \tag{1.3.6}$$

qui est le raccord continu, en $x = 0.5$, de deux solutions classiques. Il est d'ailleurs possible de montrer que la solution obtenue avec le schéma d'Euler explicite converge vers cette solution.

Pour se placer dans le cadre d'un champ de vitesse échantillonné, on considère ensuite que la vitesse v n'est connue que sur une grille régulière de pas h (contenant le point de discontinuité) et qu'une méthode d'interpolation est utilisée pour reconstruire la vitesse. La trajectoire estimée en utilisant une méthode d'interpolation donnée est alors déterminée en intégrant l'équation

$$\begin{cases} \dot{x}_{h,\text{interp}} = v_{h,\text{interp}}(x_{h,\text{interp}}) \quad t \in [0, T] \\ x_{h,\text{interp}}(0) = x_0, \end{cases} \tag{1.3.7}$$

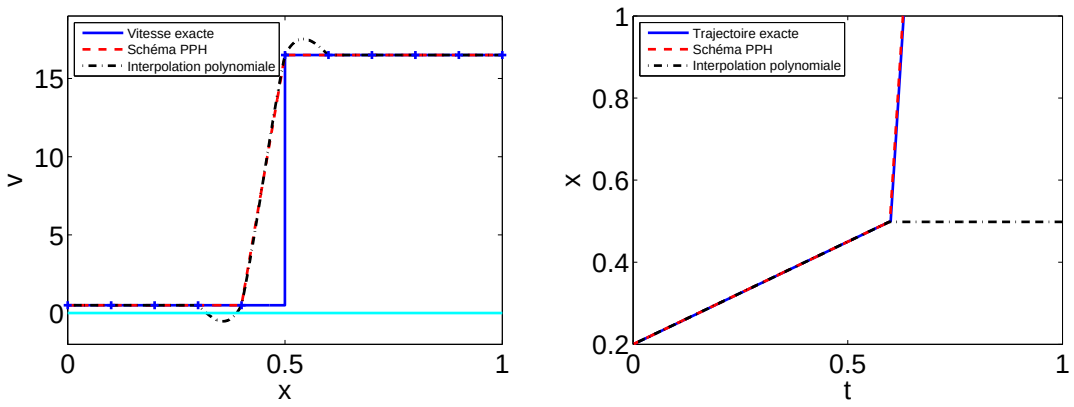
où $v_{h,\text{interp}}$ correspond à la reconstruction obtenue par interpolation. Nous comparons deux méthodes d'interpolation : le schéma PPH et l'interpolation polynomiale de degré 3. On peut voir sur la Fig. 1.3.1a que le schéma PPH s'affranchit du phénomène de Gibbs (oscillations au voisinage de la discontinuité), ce qui n'est pas le cas pour l'interpolation polynomiale. Contrairement au problème initial (1.3.3)-(1.3.4), le second membre de l'équation différentielle (1.3.7), obtenu par interpolation, est une fonction continue qui vérifie les conditions de Cauchy-Lipschitz, ce qui assure l'existence et l'unicité de la solution $x_{h,\text{interp}}$. Nous montrons alors que les deux trajectoires $x_{h,\text{pph}}$ et $x_{h,\text{poly}}$ ont des comportements différents :

- Pour le schéma PPH, un calcul explicite de la solution de (1.3.7) montre que la trajectoire $x_{h,\text{pph}}$ converge vers la trajectoire exacte (1.3.6), solution du problème de départ lorsque le pas d'échantillonnage h tend vers 0. La solution $x_{h,\text{pph}}$ est donnée par l'équation (2.4.10).

- Pour l'interpolation polynomiale de degré 3, il existe des valeurs du saut d au niveau de la discontinuité pour lesquelles la trajectoire $x_{h,\text{poly}}$ ne converge pas vers la trajectoire exacte lorsque h tend vers 0. Ce résultat est directement lié au phénomène de Gibbs. En effet, on trouve que $v_{h,\text{poly}}(0.5 - 3h/2) = 0.5 - \frac{1}{16}d$ est une constante qui ne dépend pas de h, expliquant que l'oscillation générée par la reconstruction de v à l'aide de l'interpolation polynomiale subsiste malgré la diminution du pas h. On voit alors que pour $d \geq 8$, on a $v_{h,\text{poly}}(0.5 - 3h/2) \leq 0$ ainsi la vitesse reconstruite s'annule en un point de l'intervalle $[0.5 - 2h, 0.5 - 3h/2]$. La particule initialement en $x_0 = 0.2$ se trouve alors piégée dans l'oscillation de Gibbs pour h suffisamment petit et la trajectoire $x_{h,\text{poly}}$ reste bornée par $x = 0.5$.

Ce résultat de convergence est illustré sur la Fig. 1.3.1b pour $d = 16$.

Ce premier cas étudié fait l'objet de la Section 2.4 et met en évidence l'effet du phénomène de Gibbs sur le calcul de trajectoires. Une étude complète de la convergence numérique est également présentée : elle traite de la convergence suivant les deux paramètres que sont le pas d'échantillonnage de la vitesse h et le pas de discrétisation en temps δt introduit quand on réalise la discrétisation de l'équation (1.3.7) par différences finies.



(a) (b)

FIG. 1.3.1: (a) Vitesse exacte (Eq. (1.3.4) avec $d = 16$) et vitesses reconstruites en partant d'une grille de pas $h = 0.1$. (b) Trajectoire exacte (1.3.6) et trajectoires obtenues en résolvant (1.3.7) avec $h = 10^{-3}$.

Dans un deuxième temps, nous nous intéressons au problème de l'évolution de particules tests dans un plasma magnétisé. Dans le cas stationnaire, celui-ci s'écrit

$$\begin{cases} \dot{x} = -\partial_y \phi(x, y) \\ \dot{y} = \partial_x \phi(x, y), \end{cases} \tag{1.3.8}$$

le champ de vitesse dérivant d'un potentiel ϕ. Il s'ensuit que le long de la trajectoire $(x(t), y(t))$,

$$\frac{d\phi}{dt} = \partial_x \phi \, \dot{x} + \partial_y \phi \, \dot{y} = 0. \tag{1.3.9}$$

Le potentiel ϕ se conserve donc le long de la trajectoire. En particulier, la trajectoire d'une particule située sur une ligne isopotentielle fermée doit être fermée.

Dans le cadre d'un champ de vitesse discret, connu seulement sur une grille bidimensionnelle, la forme du champ de vitesse dans l'équation (1.3.8) permet d'envisager deux versions pour l'application des méthodes d'interpolation. La première version consiste à intégrer

$$\begin{cases} \dot{x} = -(\partial_y \phi)_{\text{interp}}(x, y) \\ \dot{y} = (\partial_x \phi)_{\text{interp}}(x, y), \end{cases} \tag{1.3.10}$$

et la seconde version à considérer

$$\begin{cases} \dot{x} = -\partial_y \phi_{\text{interp}}(x, y) \\ \dot{y} = \partial_x \phi_{\text{interp}}(x, y), \end{cases} \tag{1.3.11}$$

la différence entre $(\partial_x \phi)_{\text{interp}}$ et $\partial_x \phi_{\text{interp}}$ provenant de l'ordre dans lequel les opérateurs de dérivation et d'interpolation sont effectués.

Pour la seconde version, on obtient, comme pour le problème initial (1.3.8),

$$\frac{d\phi_{\text{interp}}}{dt} = \partial_x \phi_{\text{interp}} \, \dot{x} + \partial_y \phi_{\text{interp}} \, \dot{y} = 0 \tag{1.3.12}$$

le long de la trajectoire obtenue en résolvant (1.3.11) alors qu'une identité analogue ne peut être déduite pour la première version. La seconde version est alors qualifiée de

"conservative" en permettant la conservation du potentiel interpolé ϕ_{interp} et la première version est qualifiée de "non conservative" car la propriété de conservation n'est pas garantie. Nous montrons alors, indépendamment de la méthode d'interpolation choisie, l'avantage de l'utilisation de l'approche conservative en nous basant sur deux critères pour mesurer la performance des méthodes : la conservation du potentiel et les erreurs moyennes. Pour cela, un potentiel analytique périodique [6] de la forme

$$\phi(x,y) = \frac{a}{2\pi} \sum_{\substack{n,m=1 \\ n^2+m^2 \leq N^2}}^{N} \frac{\sin(2\pi(nx+my)+\varphi_{nm})}{(n^2+m^2)^{3/2}}, \tag{1.3.13}$$

est considéré dans $[0,1] \times [0,1]$, où φ_{nm} sont des phases fixées. Une visualisation du potentiel est montrée sur la Fig. 1.3.2. En partant d'une grille initiale de pas $\Delta x = \Delta y$ et en fixant une méthode d'interpolation, les deux équations (1.3.10) (version 1) et (1.3.11) (version 2) sont intégrées à l'aide du schéma de Runge-Kutta d'ordre 4 avec un pas de temps $\delta t = \frac{\Delta x}{6}$. Les trajectoires estimées par les différentes versions sont comparées à des trajectoires de référence obtenues en intégrant l'équation initiale (1.3.8) à l'aide du schéma de Runge-Kutta d'ordre 4 avec $\delta t = \frac{1}{6}\frac{1}{2^{10}}$. En utilisant le schéma PPH par exemple comme méthode d'interpolation, nous obtenons les résultats suivants :

- Pour une grille grossière $\Delta x = \Delta y = \frac{1}{32}$, la Fig. 1.3.3a montre les trajectoires obtenues pour une particule individuelle par les différentes versions. La version conservative donne une trajectoire fermée comme pour l'intégration "exacte", alors que la version non conservative conduit à une trajectoire en spirale témoignant que le potentiel n'est clairement pas conservé.

- En considérant $N_p = 125$ particules dont les positions initiales sont réparties aléatoirement de façon uniforme dans $[0,1] \times [0,1]$, l'erreur d'interpolation est quantifiée en fonction du temps comme suit [18] :

$$E(t) = \left(\frac{1}{N_p} \left(\sum_{n=1}^{N_p} \left| \mathbf{x}_{\text{interp}}(t) - \mathbf{x}_{\text{ref}}(t) \right|^2 \right) \right)^{1/2}. \tag{1.3.14}$$

  La Fig. 1.3.3b montre que les erreurs moyennes liées à la version non conservative sont plus importantes que pour la version conservative. En utilisant la version non conservative, les erreurs augmentent avec le temps indiquant que les particules s'éloignent de leurs trajectoires exactes.

Le même comportement est observé avec les autres méthodes d'interpolation comme montré dans le Tab. 2.5.3.

Ce deuxième cas étudié fait l'objet de la Section 2.5.1 et montre la nécessité de l'utilisation d'une version conservative pour le calcul de trajectoires dans un champ de vitesse dérivant d'un potentiel.

Dans un troisième temps, en nous basant sur les conclusions tirées des deux premières études, la méthode d'interpolation basée sur le schéma de subdivision non linéaire PPH dans sa version conservative est appliquée dans le cas d'un potentiel dépendant du temps plus réaliste, généré par un code numérique spectral (TOKAM-2D) modélisant la turbulence dans la région de bord d'un tokamak [1]. Le code TOKAM-2D permet la résolution numérique d'un système d'équations fluides portant sur la densité n et le potentiel électrique ϕ du plasma. Les champs générés sont donnés sur une grille $N_x \times N_y$ à chaque pas de temps

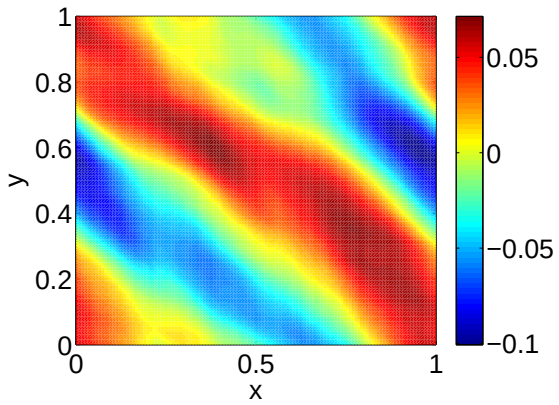
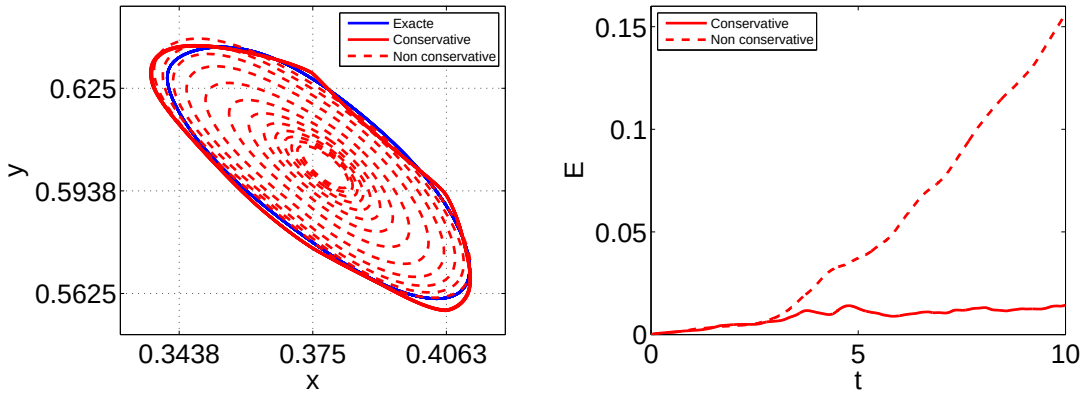


FIG. 1.3.2: Potentiel analytique $\phi(x, y)$ donné par (1.3.13) avec $a = 1$ et $N = 25$.



(a) (b)

FIG. 1.3.3: (a) Trajectoire exacte et trajectoires obtenues en utilisant le schéma de subdivision PPH à partir d'une grille initiale de pas $\Delta x = \Delta y = \frac{1}{32}$. (b) Erreurs moyennes (1.3.14) sur $N_p = 125$ trajectoires en utilisant le schéma de subdivision PPH à partir d'une grille initiale de pas $\Delta x = \Delta y = \frac{1}{64}$.

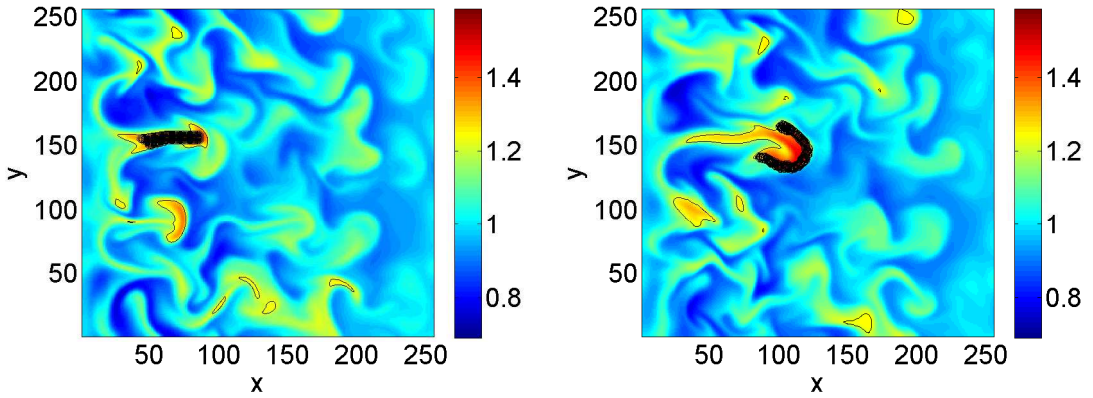
Δt. La Fig. 1.3.4 représente la densité normalisée $C(x,y,t) = n(x,y,t)/\langle n(x,y,t)\rangle_{y,t}$ à différents instants, où x correspond à la direction radiale dans le tokamak et y à la direction poloïdale. La quantité $\langle n(x,y,t)\rangle_{y,t}$ qui représente la moyenne suivant y et t est introduite pour tenir compte de la forte décroissance radiale de la densité et permettre ainsi une meilleure visualisation de la densité dans la région de bord.

Dans le champ de densité, on peut identifier des régions de sur-densité (en rouge) et des régions de sous-densité (en bleu), que l'on appelle structures. La Fig. 1.3.4 montre que les structures de sur-densité se propagent de la source (à gauche) vers le bord (à droite) au cours du temps, tandis que les structures de sous-densité se déplacent dans la direction opposée. En isolant une structure de sur-densité autour du point de maximum de la densité par un critère de seuillage ($C \geq C^*$), nous nous intéressons à la dynamique de particules tests émises initialement au cœur de la structure de sur-densité choisie. L'évolution des particules est obtenue en intégrant les équations de mouvement

$$\begin{cases} \dot{x} = -\partial_y \phi(x,y,t) \\ \dot{y} = \partial_x \phi(x,y,t), \end{cases} \tag{1.3.15}$$

en utilisant l'approche d'interpolation déjà présentée. Le transport des particules tests est alors comparé à la propagation de la structure de densité en superposant les positions des particules avec le champ de densité au cours du temps comme représenté sur la Fig. 1.3.4. Cette étude met en évidence la différence entre le transport de particules et le transport de structures de densité dans les champs turbulents, en montrant que différents régimes de transfert se produisent entre les structures de densité et le plasma environnant. Une analyse plus fine comprenant l'évolution du nombre de particules restant dans la structure au cours du temps (Fig. 2.5.12) est présentée dans la Section 2.5.3.2.

D'autres applications à l'analyse du transport de particules dans les plasmas de tokamak sont également présentées en Section 2.5.3.



(a) Configuration initiale ($t = 0$)

(b) Les particules rattrapent la pointe ($t = 600$)

(c) Les particules sont poussées derrière ($t = 1200$)

(d) Les particules sont réparties autour ($t = 3300$)

FIG. 1.3.4: Propagation des particules et des structures dans le champ de densité du plasma, généré par le code numérique TOKAM-2D modélisant la turbulence dans la région de bord d'un tokamak.

2 Comparison of different interpolation operators including nonlinear subdivision schemes in the simulation of particle trajectories

In this work, we compare different interpolation operators in the context of particle tracking with an emphasis on situations involving velocity field with steep gradients. Since, in this case, most classical methods give rise to the Gibbs phenomenon (generation of oscillations near discontinuities), we present new methods for particle tracking based on subdivision schemes and especially on the Piecewise Parabolic Harmonic (PPH) scheme which has shown its advantage in image processing in presence of strong contrasts. First an analytic univariate case with a discontinuous velocity field is considered in order to highlight the effect of the Gibbs phenomenon on trajectory calculation. Theoretical results are provided. Then, we show, regardless of the interpolation method, the need to use a conservative approach when integrating a conservative problem with a velocity field deriving from a potential. Finally, the PPH scheme is applied in a more realistic case of a time-dependent potential encountered in the edge turbulence of magnetically confined plasmas, to compare the propagation of density structures (turbulence bursts) with the dynamics of test particles. This study highlights the difference between particle transport and density transport in turbulent fields.

2.1 Introduction

The tracking of particles convected passively in a velocity field is a classical problem in physics but its simulation is often difficult since the velocity field, that usually is itself an output of an Eulerian simulation, is only known on a fixed grid of points [18–21]. Since the tracking is based on a Lagrangian description of the trajectory of the particle, evaluation of the velocity field on arbitrary points is required.

Evaluation of a field on arbitrary points is required in many studies for instance in fluid dynamics, geostatistics, image compression and, more generally multiscale approximation [5, 22–25].

Subdivision schemes are nowadays becoming workhorses for advanced scientific computing in data and geometry processing. Among them, some nonlinear schemes based on nonlinear transforms are reaching a recognized status supported by recent results concerning their precision and stability as well as their satisfactory behavior in presence of strongly varying data (either intrinsic to the problem or due to sampling) where linear schemes, due to the Gibbs phenomenon, generally fail [13].

In this paper we propose a comparison of different tracking algorithms based on different interpolation operators: polynomial interpolation, spectral interpolation and spline interpolation are compared to subdivision operators based on local polynomial interpolation and a nonlinear perturbation of it, called PPH (Piecewise Parabolic Harmonic) subdivision [13]. Our investigations are both theoretical and numerical with applications to univariate and

multivariate situations. The initial motivation of this work is the simulation of impurities trajectories in plasma fusion velocity fields. The transport of impurities is a key point for the control of the efficiency of the devices designed for energy extraction in magnetically confined fusion plasma [26–30]. However, the velocity fields exhibit very strong gradients that motivate the consideration of Gibbs free interpolators.

The paper is organized as follows: after a detailed presentation of the different interpolation operators in Section 2.2, and a brief recall of the problem of the trajectory evaluation in Section 2.3, the univariate situation is investigated in Section 2.4 with a theoretical analysis of the convergence of the numerical tracking schemes for the different interpolation operators (2.4.1). Section 2.5 is devoted to bivariate situations: we start with the comparison between conservative and nonconservative approaches to track particles in a velocity field deriving from a potential. The end of this section is devoted to particle tracking in a turbulent velocity field related to numerical simulations of edge fusion plasma: we investigate in particular the relation between test-particle dynamics and density structures evolution. It is shown that physical informations of high interest can be reached if suitable interpolation operators are used. The last section is devoted to conclusion and remarks.

2.2 Numerical methods

In this section, we describe the interpolation methods we use. We first recall classical methods including polynomial, spectral and cubic splines interpolations. Then subdivision schemes are presented with emphasis on the Piecewise Parabolic Harmonic (PPH) scheme. The univariate framework is adopted for the presentation. Multivariate applications are derived using a tensor product approach.

We denote by $(f_n)_{n\in\mathbb{Z}}$ the sampling of a function f on a uniform grid $(x_n)_{n\in\mathbb{Z}}$ with $x_{n+1} - x_n = \Delta x$.

2.2.1 Classical interpolation methods

2.2.1.1 Polynomial interpolation

In this paper, we call polynomial interpolation of degree $2p+1$ the classical piecewise centered Lagrange interpolation: in each interval $[x_n, x_{n+1}]$, f is approximated by the unique polynomial P_n of degree $2p+1$ which interpolates $(x_{n-p}, f_{n-p}), \ldots, (x_{n+p+1}, f_{n+p+1})$.

Introducing, for $-p \leq i \leq p+1$, Lagrange polynomials [1]

$$L_i^n(x) = \prod_{k=-p, k\neq i}^{p+1} \frac{x - x_{n+k}}{x_{n+i} - x_{n+k}},$$

P_n is given by

$$P_n(x) = \sum_{i=-p}^{p+1} f_{n+i} L_i^n(x).$$

2.2.1.2 Spectral interpolation

Spectral interpolation involves trigonometric polynomials [15]. More precisely, we call spectral interpolation of f relative to the grid $(x_n)_{0\leq n\leq N-1}$ of the interval $[0, a]$, $a = N\Delta x$,

1. Note that developing $L_i^n(x_n + r\Delta x)$ for $r \in [0,1]$, one finds that $L_i^n(x_n + r\Delta x)$ is independent of n and Δx, i.e. $L_i^n(x_n + r\Delta x) = L_i(r)$ or in other words $L_i^n(n\Delta x_1 + r\Delta x_1) = L_i^m(m\Delta x_2 + r\Delta x_2)$. There is invariance by translation and dilatation.

the following trigonometric polynomial of degree N (supposed to be even):

$$T_N(x) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \tilde{f}_k \exp(2i\pi kx/a),$$

where $(\tilde{f}_k)_{-N/2\leq k\leq N/2-1}$ stands for the discrete Fourier transform of $(f_n)_{0\leq n\leq N-1}$ defined by

$$\tilde{f}_k = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} f_n \exp(-2i\pi kn/N), \quad k = -N/2, \ldots, N/2-1.$$

2.2.1.3 Cubic splines

Cubic splines are C^2 continuous, piecewise polynomials of degree 3 interpolating the values $(f_n)_{n\in\mathbb{Z}}$ at grid points [16]. Most of the fields considered in this paper are periodic, thus we implemented periodic spline interpolation following [17].

2.2.2 Subdivision schemes

Initially introduced for curves and surfaces design, subdivision schemes are now basic elements for computer aided design, computational science, and image processing [12,13].

The basic ingredient for dyadic stationary and uniform linear interpolant subdivision scheme is an operator in $\ell^\infty(\mathbb{Z})$, the set of bounded sequences, that reads:

$$S\colon \begin{cases} \ell^\infty(\mathbb{Z}) \longrightarrow \ell^\infty(\mathbb{Z}) \\ f = (f_n)_{n\in\mathbb{Z}} \longmapsto ((Sf)_n)_{n\in\mathbb{Z}} \end{cases} \quad \text{with} \quad \begin{cases} (Sf)_{2n} = f_n \\ (Sf)_{2n+1} = \sum_k a_{2n+1-2k} f_k, \end{cases} \tag{2.2.1}$$

where $(a_n)_{n\in\mathbb{Z}}$ is a set of null coefficients but a finite number that defines the scheme. Starting from a sequence $f^0 = (f_n^0)_{n\in\mathbb{Z}}$ and defining $f_n^{j+1} = (Sf^j)_n$, $n \in \mathbb{Z}$, $j \in \mathbb{N}$, a convergent subdivision scheme S defines, for all initial sequence f^0, a continuous function $S^\infty f^0$ such that $\lim_{j\to+\infty} \sup_n |f_n^j - S^\infty f^0(x_n^j)| = 0$ where $x_n^j = n2^{-j}\Delta x$. Numerically the points (x_n^j, f_n^j) concentrate on a continuous curve as shown on Fig. 2.2.1 illustrating the subdivision process and its convergence.

Making the coefficients $(a_n)_{n\in\mathbb{Z}}$ depend on the position n (resp. the scale j) leads to nonuniform (resp. nonstationary) schemes. Making them dependent of f defines nonlinear subdivision schemes.

In this paper, two convergent subdivision schemes will be used, the Lagrange and the PPH schemes [12,14]. The first one is a linear scheme whereas the second is nonlinear.

2.2.2.1 Lagrange scheme

Here, on each interval, the new points $(Sf)_{2n+1}$, $n \in \mathbb{Z}$, are defined as the value taken by a polynomial determined by neighboring previously computed points.

In this paper, degree 3 centered Lagrange interpolation is used. $(Sf)_{2n+1}$ is then defined as the value of the unique cubic polynomial P_n that interpolates (x_{n-1}, f_{n-1}), (x_n, f_n), (x_{n+1}, f_{n+1}), and (x_{n+2}, f_{n+2}) at location $\frac{x_n+x_{n+1}}{2}$. It reads:

$$\begin{cases} (Sf)_{2n+1} = -\frac{1}{16}f_{n-1} + \frac{9}{16}f_n + \frac{9}{16}f_{n+1} - \frac{1}{16}f_{n+2} \\ (Sf)_{2n} = f_n. \end{cases} \tag{2.2.2}$$

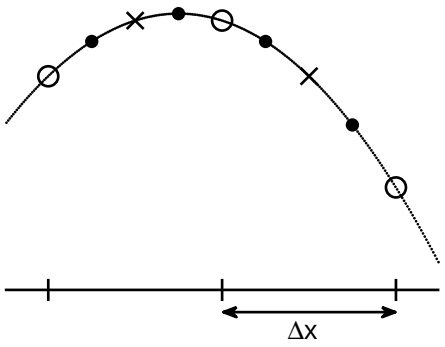


FIG. 2.2.1: Subdivision process: circles correspond to $f_n^0, -1 \leq n \leq 1$, crosses correspond to $f_{2n+1}^1, -1 \leq n \leq 0$, dots correspond to $f_{2n+1}^2, -2 \leq n \leq 1$ and the continuous line stands for $S^\infty f^0$.

This scheme is referred to as a linear scheme because the new points are defined as a linear combination of the old ones. Note that even if the connection with polynomial interpolation is trivial for one iteration, the limit function $S^\infty f^0$ is generally not piecewise polynomial.

2.2.2.2 PPH scheme

The PPH scheme is also based on a polynomial interpolation. Introducing the differences $Df_n = f_{n+1} - 2f_n + f_{n-1}$, the polynomial $\bar{P}_n$ used to define $(Sf)_{2n+1}$ interpolates (x_{n-1}, f_{n-1}), (x_n, f_n), (x_{n+1}, f_{n+1}), and $(x_{n+2}, \bar{f}_{n+2})$ with

$$\bar{f}_{n+2} = f_{n+1} + f_n - f_{n-1} + 2H(Df_n, Df_{n+1}), \tag{2.2.3}$$

where H is defined by:

$$H(x,y) = \begin{cases} 2\dfrac{xy}{x+y} & \text{if } xy > 0 \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{2.2.4}$$

The PPH scheme is a perturbation of the Lagrange scheme. Indeed, remarking that $f_{n+2} = f_{n+1} + f_n - f_{n-1} + 2\frac{Df_n + Df_{n+1}}{2}$, it clearly appears that the arithmetic mean of local differences has been substituted by the harmonic mean. Finally, we obtain

$$\begin{cases} (Sf)_{2n+1} = \dfrac{f_n + f_{n+1}}{2} - \dfrac{1}{8}H(Df_n, Df_{n+1}) \\ (Sf)_{2n} = f_n. \end{cases} \tag{2.2.5}$$

The introduction of the PPH scheme is mainly motivated by the fact that the PPH subdivision does not produce the Gibbs phenomenon (oscillation near discontinuities) while preserving the other good properties of the Lagrange subdivision (see Tab. 2.2.1). Its convergence has been established in [14].

Remark 2.2.1. An important aspect for implementation of the interpolation or prediction methods is their local/global properties that influence directly their ability to be efficiently parallelized. As mentioned in Tab. 2.2.1, spectral and spline methods are global. The others are local and, for a four point stencil considered here, the prediction at a given position in one dimension involves only the four nearest points.

Interpolation	Classical method				Subdivision scheme	
	Spectral	Linear d ° 1	Poly. d ° 3	Spline	Lagrange	PPH
Smoothness	C^∞	C^0 piecewise poly. d ° 1	C^0 piecewise poly. d ° 3	C^2 piecewise poly. d ° 3	C^{2-}	C^{1-}, C^2 (strictly convex data)
Rate of convergence/ approximation		2	4	4	4	3
Local/global implementation	Global	Local	Local	Local-global (coefficients)	Local	Local
Gibbs phenomenon	Yes	No	Yes	Yes	Yes	No

TAB. 2.2.1: Some properties of the interpolation methods.

There are, moreover, important differences between classical methods and subdivision schemes. While the former allow one to predict f at any position x, the latter only provide the prediction at dyadic points. In addition, the interpolatory function is directly given for classical methods while it is only known as the limit of the convergent subdivision process in the latter situation. These facts have various consequences:

– Since subdivision provides only predictions at dyadic points (of the form $k2^{-L}\Delta x$, with L the level of subdivision starting from the initial grid size Δx), an additional error linked to localization is introduced. If $\|f'\|_\infty$ stands for the L^∞ norm of the first derivative of f, then this error is bounded by $2^{-L}\Delta x\|f'\|_\infty$. Therefore, if ε_s stands for a target error,

$$L > \frac{\log\left(\frac{\Delta x\|f'\|_\infty}{\varepsilon_s}\right)}{\log 2}. \tag{2.2.6}$$

In practice, $\|f'\|_\infty$ is evaluated numerically and ε_s is fixed: formula (2.2.6) then gives the number of required subdivision steps for each evaluation.

– Interpolatory subdivision presented above are based on polynomial interpolation on dyadic points. Therefore, one could wonder what are the advantages of using subdivision rather than the corresponding first level polynomial interpolation at each point. It turns out to be that the advantages are threefold: first, from a mathematical point of view, as shown in Tab. 2.2.1, the interpolatory function for piecewise polynomial interpolations is C^0 while it is more regular for subdivision. In particular, for the PPH subdivision it is C^{1-} and even C^2 in strictly convex regions. Second, from a computational point of view, four point subdivision involves only the storage of four coefficients independent of the subdivision level. Direct polynomial interpolation involves sixteen coefficients that are grid dependent. Third, generalization to bivariate configuration such as done in the next sections is straightforward for subdivision using tensorial product. It becomes very costly for piecewise bivariate interpolation.

2.3 Trajectory evaluation

Now that the interpolation schemes have been introduced, we address the problem of trajectory evaluation. The general problem we are interested in is the computation of the trajectory $\mathbf{X}(t)$ of a particle swept along by a velocity field $\mathbf{F}$ following the equation:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{X}} = \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) \quad t \in [t_0, T] \\ \mathbf{X}(t_0) = \mathbf{X}_0, \end{cases} \tag{2.3.1}$$

where $\mathbf{F}(\mathbf{X}, t)$ is supposed to be known on a regular grid. Any numerical resolution of (2.3.1) involves the evaluation of $\mathbf{F}$ on arbitrary points and therefore requires interpolation operators.

Although in this paper we focus on particle trajectories, the framework of the methods discussed here is more general and may relate to problems of propagation of fronts, shock waves or passive tracers.

In the following sections, we aim to study situations involving strongly varying velocity fields $\mathbf{F}$. We consider first an analytic univariate case with a discontinuous velocity field in order to provide theoretical results, then bivariate cases for test particle transport in a magnetized plasma are considered.

2.4 Univariate case

When used to reconstruct a discontinuous function, most classical methods of interpolation or approximation give rise to the Gibbs phenomenon which is characterized by the generation of oscillations near discontinuities. In this section, we highlight the effect of the Gibbs phenomenon on trajectory calculation. In our framework of particle tracking, the Gibbs phenomenon may lead to incorrect trajectories.

2.4.1 Steady state velocity field

Here we consider (2.3.1) with a velocity field F exhibiting a discontinuity of amplitude $d > 0$ given by

$$F(x,t) = v(x) = \begin{cases} 0.5 & \text{if } x < 0.5 \\ 0.5 + d = v_p & \text{if } x \geq 0.5, \end{cases} \tag{2.4.1}$$

and focus on the initial condition $x_0 = 0.2$ at $t_0 = 0$.

2.4.1.1 Analytical integration

2.4.1.1.1 Mathematical meaning of the differential equation It should be noted that the right-hand side (2.4.1) of the differential equation (2.3.1) being discontinuous, the classical definition of a solution of a differential equation with a continuous right-hand side, as a function which has a derivative and satisfies the equation everywhere on a given interval, is no longer valid. *A fortiori*, the Cauchy-Lipschitz theorem [31] ensuring the existence and the uniqueness of the solution does not apply.

One can propose, however, a good candidate to be solution of the Cauchy problem (2.3.1) for the velocity v given by (2.4.1). It is the connection, at $x = 0.5$, of two classical solutions:

$$x(t) = \begin{cases} 0.2 + 0.5t & \text{if } t < 0.6 \\ 0.5 + v_p(t - 0.6) & \text{if } t \geq 0.6. \end{cases} \tag{2.4.2}$$

For $t = 0.6$, the derivative of the function defined by (2.4.2) does not exist, thus Eq. (2.3.1) is not satisfied at $t = 0.6$ in the classical meaning. However, the function (2.4.2) is the unique solution of the integral formulation [2]

$$x(t) = x_0 + \int_0^t v(x(s))\, ds. \tag{2.4.3}$$

2. The integral formulation is equivalent to the differential equation in the case of a continuous right-hand side: a solution of a differential equation subject to an initial condition is a solution of the corresponding integral formulation and *vice versa*.

One should remark however that the integral formulation is not always sufficient to provide a reasonable rigorous meaning to a differential equation with a discontinuous right-hand side. To illustrate this point, let us consider the following right-hand side [32]

$$v(x) = 1 \quad \text{if } x < 0.5, \quad v(0.5) = a \neq 0, \quad v(x) = -1 \quad \text{if } x > 0.5. \tag{2.4.4}$$

For $x > 0.5$, the solutions are $x(t) = -t + c_1$, and for $x < 0.5$, the solutions are $x(t) = t + c_2$. When t increases, the solutions reach the line $x = 0.5$. The field forbids to cross the axis $x = 0.5$. And the problem is to find a definition which gives a meaning to the constant solution $x(t) = 0.5$. The classical sense is unsurprisingly eliminated, since for this constant solution $\dot{x} = 0$, whereas the right hand-side is nonzero at $x = 0.5$. The integral formulation does not fix the problem because it requires $a = 0$ through

$$x(t) = 0.5 = 0.5 + \int_0^t v(x(s))\, ds = 0.5 + at. \tag{2.4.5}$$

The consideration of differential equations with discontinuous right-hand side then requires the generalization of the concept of solution. Different approaches have been proposed [32, 33]. However it is out of the scope of this paper, and we adopt the formulations (2.4.2) or (2.4.3) that fit to (2.3.1)-(2.4.1).

2.4.1.1.2 Convergence of the Euler scheme to the solution Given a fixed time step δt, we note $t_n = n\delta t$ and y_n the calculated position at time t_n. Using the explicit Euler scheme we have

$$y_n = \begin{cases} x_0 + 0.5 n\delta t & \text{if } n \leq n_0 \ (n_0 \text{ s.t. } n_0 - 1 < \frac{0.5 - x_0}{0.5\delta t} \leq n_0) \\ y_{n_0} + v_p(n - n_0)\delta t & \text{if } n \geq n_0 + 1. \end{cases} \tag{2.4.6}$$

We get that $\sup_n |y_n - x(n\delta t)| \xrightarrow[\delta t \to 0]{} 0$ that is the convergence of the scheme.

2.4.1.2 Integration using interpolation methods

Here, we consider that the velocity v is only known on a uniform grid of step $h = \Delta x$ (we consider a grid that contains the discontinuity point) and that an interpolation method is used to reconstruct the velocity everywhere.

If we denote by $v_{h,\text{interp}}$ the reconstruction obtained using the interpolation method under consideration, then the estimation of the particle trajectory by the interpolation method is given by the integration of

$$\begin{cases} \dot{x} = v_{h,\text{interp}}(x) & t \in [0, T] \\ x(0) = x_0. \end{cases} \tag{2.4.7}$$

Two interpolation methods are compared: PPH subdivision, which coincides here with linear interpolation (polynomial interpolation of degree 1) and for which there is no Gibbs phenomenon, and polynomial interpolation of degree 3, suffering from the Gibbs phenomenon, see Fig. 2.4.1.

In (2.4.7), unlike the initial Eqs. (2.3.1)-(2.4.1), the right-hand side term is a continuous function which verifies the conditions of the Cauchy-Lipschitz theorem, thus there exists a unique solution of the Cauchy problem, denoted $x_{h,\text{interp}}$.

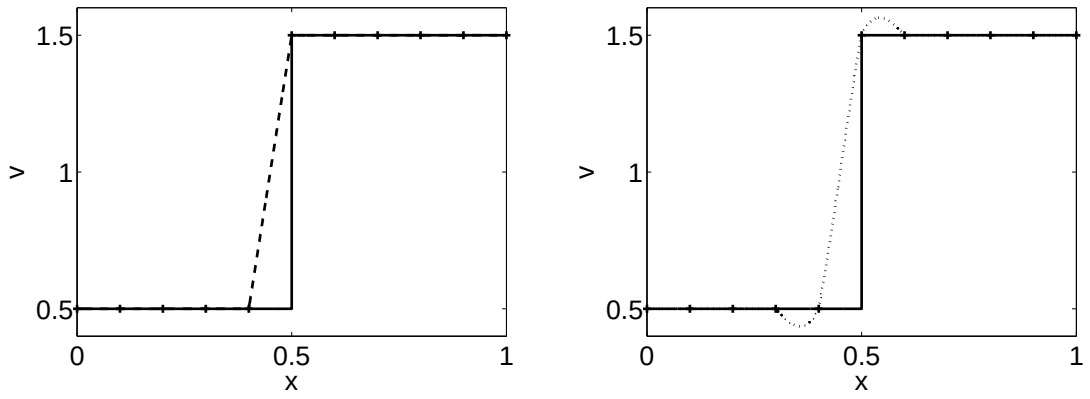
Reconstruction of the velocity

PPH interpolation

$$v_{h,\mathrm{pph}}(x) = \begin{cases} 0.5 & \text{if } x \le 0.5 - h \\ 0.5\frac{x-0.5}{-h} + v_p\frac{x-(0.5-h)}{h} = \frac{d}{h}x + v_p - \frac{d}{h}0.5 & \text{if } 0.5-h \le x \le 0.5 \\ v_p & \text{if } x \ge 0.5. \end{cases} \tag{2.4.8}$$

Polynomial interpolation

$$v_{h,\mathrm{poly}}(x) = \begin{cases} 0.5 & \text{if } x \le 0.5 - 2h \\ P_1(x) & \text{if } 0.5-2h \le x \le 0.5-h \\ P_2(x) & \text{if } 0.5-h \le x \le 0.5 \\ P_3(x) & \text{if } 0.5 \le x \le 0.5+h \\ v_p & \text{if } x \ge 0.5+h. \end{cases} \tag{2.4.9}$$



(a) (b)

FIG. 2.4.1: Velocity fields. Solid line: exact velocity field (Eq. (2.4.1) with $d = 1$); (a) Dashed line: velocity $v_{h,\mathrm{pph}}$ using PPH scheme starting from a sampling with $h = 0.1$. (b) Dotted line: velocity $v_{h,\mathrm{poly}}$ using polynomial interpolation of degree 3 starting from a sampling with $h = 0.1$.

2.4.1.3 Convergence

2.4.1.3.1 Convergence of the reconstruction For both interpolation methods, $v_{h,\mathrm{interp}}$ converges uniformly to v when h tends to 0 on any closed interval not containing the discontinuity point 0.5.

2.4.1.3.2 Convergence of the trajectory For PPH interpolation (and linear interpolation), the solution of the problem (2.4.7) can be computed explicitly. We find for h small enough (such that at $t = 0$, $v_h(x_0) = v_h(0.2) = v(0.2) = 0.5$):

$$x_{h,\mathrm{pph}}(t) = \begin{cases} 0.2 + 0.5t & \text{if } 0 \le t \le \frac{0.3-h}{0.5} = t_1 \\ (\frac{v_p}{d} - 1)h\exp(\frac{d}{h}(t-t_1)) + (0.5 - \frac{v_p}{d}h) & \text{if } t_1 \le t \le \frac{h}{d}\ln(\frac{v_p}{v_p-d}) + t_1 = t_2 \\ 0.5 + v_p(t - t_2) & \text{if } t \ge t_2. \end{cases} \tag{2.4.10}$$

One obtains immediately the convergence of the solution $x_{h,\text{pph}}$ to the exact solution (2.4.2) of the initial problem (with discontinuous right-hand side) when the discretization step h tends to 0.

In the case of polynomial interpolation, the explicit calculation of the solution is not possible in general. However, a counterexample to the convergence of $x_{h,\text{poly}}$ to the exact solution x can be found without calculating the solution. Indeed, since the polynomial interpolation and the Lagrange scheme coincide at the midpoints of the initial grid, it follows using (2.2.2) that

$$\begin{aligned} v_{h,\text{poly}}(0.5-3h/2) &= -\frac{1}{16}0.5+\frac{9}{16}0.5+\frac{9}{16}0.5-\frac{1}{16}v_p \\ &= \frac{17}{16}0.5-\frac{1}{16}v_p \\ &= 0.5-\frac{1}{16}(v_p-0.5) \\ &= 0.5-\frac{1}{16}d, \end{aligned} \tag{2.4.11}$$

where d is the jump at the discontinuity point.

Thus, the value of the reconstruction at the considered midpoint is a constant c that does not depend on the step $h=\Delta x$, but only on d the amplitude of the jump at the discontinuity point. The oscillation generated in the reconstruction of v using polynomial interpolation then remains despite the reduction of h, it is the Gibbs phenomenon.

If we take, for instance, $d=16$, then the constant c is negative. By continuity of $v_{h,\text{poly}}$, we deduce, using the intermediate value theorem, the existence of a point x^0 (depending on h) in $[0.5-2h, 0.5-3h/2]$ where $v_{h,\text{poly}}(x^0)=0$.

For a fixed h, the constant function $X(t)=x^0$ is solution of the differential equation $\dot{x}=v_{h,\text{poly}}(x)$ subject to the initial condition $x(0)=x^0$. Thus using Cauchy-Lipschitz theorem, we have for $h>0$ small enough (such that $x^0 \geq 0.5-2h > 0.2 = x_0$)

$$\forall t \geq 0, \quad x_{h,\text{poly}}(t) < x^0 < 0.5-3h/2 < 0.5, \tag{2.4.12}$$

that proves that if $x_{h,\text{poly}}$ converges to x_{poly} as h approaches 0, then passing to the limit in (2.4.12), we get that $x_{\text{poly}}(t) \leq 0.5$ for all $t \geq 0$, and $x_{\text{poly}} \neq x$ the exact solution (2.4.2) of the initial problem (2.3.1)-(2.4.1).

Fig. 2.4.2 illustrates the convergence result in the case $d=16$: the trajectory $x_{h,\text{pph}}$ converges to the exact trajectory when the step h tends to 0 while the trajectory $x_{h,\text{poly}}$ remains bounded by $x=0.5$.

Remark 2.4.1. In practice, when using the PPH scheme, following Remark 2.2.1 and formula (2.2.6), subdivision is stopped after L iterations, which provides a sequence of values corresponding to the refined grid. Then, one can use a piecewise constant approximation to define $v_{h,\text{pph},L}$ and consider the trajectory $x_{h,\text{pph},L}$ solution of $\dot{x}=v_{h,\text{pph},L}(x)$, $x(0)=x_0$ under integral formulation. One can write $v_{h,\text{pph},L}(x)=v_{h,\text{pph}}(x)+\varepsilon_{h,L}(x)$ with $|\varepsilon_{h,L}(x)| \leq \varepsilon_L$ (where $\varepsilon_L=\frac{d}{2^L}$ for example). Setting $y=x_{h,\text{pph}}$ and $z=x_{h,\text{pph},L}$ for simplicity, we obtain $z(t)-y(t)=\int_0^t \Big((v_{h,\text{pph}}(z(s))-v_{h,\text{pph}}(y(s))) + \varepsilon_{h,L}(z(s)) \Big)\, ds$. Thus for $t \geq 0$,

$$\begin{aligned} |z(t)-y(t)| &\leq \int_0^t |v_{h,\text{pph}}(z(s))-v_{h,\text{pph}}(y(s))|\, ds + \int_0^t |\varepsilon_{h,L}(z(s))|\, ds \\ &\leq k\int_0^t |z(s)-y(s)|\, ds + \varepsilon_L t, \end{aligned} \tag{2.4.13}$$

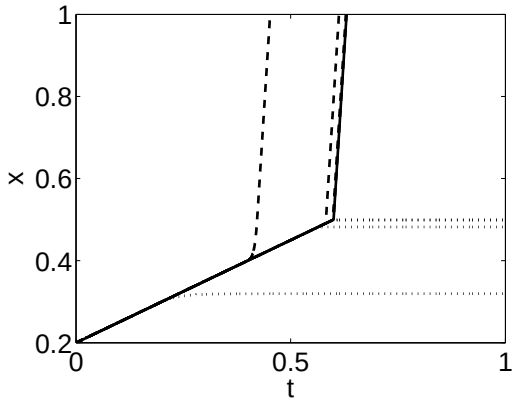


FIG. 2.4.2: Trajectories corresponding to the Cauchy problem (2.3.1)-(2.4.1) with $d = 16$ and $x_0 = 0.2$. Solid line: exact trajectory (2.4.2). Dashed line: numerical solution $x_{h,\mathrm{pph}}$ of (2.4.7) using PPH scheme for various values of $10^{-1} \geq h \geq 10^{-4}$ and $\delta t = 10^{-4}$. Dotted line: numerical solution $x_{h,\mathrm{poly}}$ of (2.4.7) using polynomial interpolation of degree 3 for various values of $10^{-1} \geq h \geq 10^{-4}$ and $\delta t = 10^{-4}$. The variation of $x_{h,\mathrm{pph}}$, respectively $x_{h,\mathrm{poly}}$, as h decreases, is from left to right, respectively from bottom to top.

using the Lipschitz continuity of $v_{h,\mathrm{pph}}$ for $h > 0$ ($k \geq 0$ being a Lipschitz constant for $v_{h,\mathrm{pph}}$) and $|\varepsilon_{h,L}(x)| \leq \varepsilon_L$. Using now the Gronwall's lemma, one obtains $|x_{h,\mathrm{pph},L}(t) - x_{h,\mathrm{pph}}(t)| = |z(t) - y(t)| \leq \varepsilon_L t \exp(kt)$ for $t \geq 0$ and $\lim_{L\to\infty} x_{h,\mathrm{pph},L} = x_{h,\mathrm{pph}}$. It follows $\lim_{h\to 0} \lim_{L\to\infty} x_{h,\mathrm{pph},L} = x$ where x is the exact trajectory of the initial problem (2.3.1)-(2.4.1).

2.4.1.3.3 Specific convergence analysis when δt is related to h The previous section was devoted to the convergence of the numerical trajectory towards the real trajectory when the step h defining the sampling of v goes to zero and according to the different reconstruction procedure analyzed in this paper. More precisely, constructing $(x_{n,h})_{n\in\mathbb{N}}$ as:

$$x_{0,h} = x_0,\ x_{n+1,h} = x_{n,h} + \delta t\, v_h(x_{n,h}) \text{ and } x_h = \lim_{\delta t\to 0}(x_{n,h}), \text{ what is } \lim_{h\to 0} x_h? \qquad (2.4.14)$$

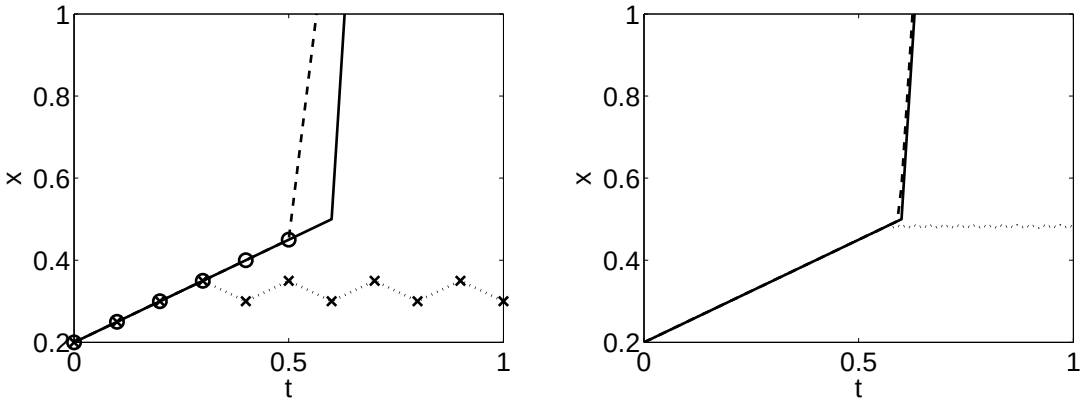
Now we would like to investigate a situation where the time step δt used for the evaluation of $(x_{n,h})_{n\in\mathbb{N}}$ is related to h, the sampling step of v. This situation mimics the case of a nonstationary velocity field solution of an advection equation resolved numerically under the constraint of a so called CFL condition. If we suppose for instance that this condition gives $\delta t = h$, then the convergence problem is the analysis of $\lim_{\delta t\to 0}(x_{n,\delta t})$ if

$$x_{n+1,\delta t} = x_{n,\delta t} + \delta t\, v_{\delta t}(x_{n,\delta t}). \qquad (2.4.15)$$

In the case of PPH interpolation (and linear interpolation), explicit calculation of the terms of the sequence gives the convergence of the solution $x_{\delta t,\mathrm{pph}}$ to the exact solution (2.4.2) of the initial problem (2.3.1)-(2.4.1) when δt goes to 0.

For polynomial interpolation with $d = 16$, the reconstructed velocity takes negative values, that leads to nonconvergence to the exact solution in the sense (2.4.14). At the discrete level (2.4.15), however, this argument is not sufficient to determine whether or not convergence occurs, because it depends on the location of the values of the sequence.

Based on numerical tests performed using time steps 0.1, 0.01 (see Fig. 2.4.3), we note that $x_{\delta t,\mathrm{poly}}$ ends up oscillating between two values.



(a) (b)

FIG. 2.4.3: Trajectories corresponding to the Cauchy problem (2.3.1)-(2.4.1) with $d = 16$ and $x_0 = 0.2$. Solid line: exact trajectory (2.4.2). Dashed line: numerical solution $x_{\delta t,\mathrm{pph}}$ of (2.4.15) using PPH scheme. Dotted line: numerical solution $x_{\delta t,\mathrm{poly}}$ of (2.4.15) using polynomial interpolation of degree 3. The computations are performed using $\delta t = h = 0.1$ in (a) and $\delta t = h = 0.01$ in (b).

We prove this result: for δt small enough, we have $x_n = 0.2 + 0.5n\delta t$, as long as $x_{n-1} \leq 0.5 - 2\delta t$, i.e. as long as $n \leq \frac{0.5-2\delta t-0.2}{0.5\delta t} + 1$, that is, for $n \leq n_0$ with $n_0 = [\frac{0.6}{\delta t} - 3]$. If we restrict ourselves to $\delta t = 10^{-k}$, we get $n_0 = 6 \times 10^{k-1} - 3$.

We have $x_{n_0} = 0.2 + 0.5n_0\delta t$ and for $\delta t = 10^{-k}$, we get

$$x_{n_0} = 0.5 - 1.5\delta t, \tag{2.4.16}$$

x_{n_0} is exactly the midpoint of $[0.5 - 2\delta t, 0.5 - \delta t]$, where the velocity does not depend on δt (cf. (2.4.11)):

$$x_{n_0+1} = x_{n_0} + \delta t\, v_{\delta t}(x_{n_0}) = 0.5 - 1.5\delta t + \delta t\Big(0.5 - \frac{d}{16}\Big). \tag{2.4.17}$$

The choice $d = 16$ (arbitrary until now) gives $x_{n_0+1} = 0.5 - 2\delta t$ and

$$x_{n_0+2} = x_{n_0+1} + 0.5\delta t = 0.5 - 1.5\delta t = x_{n_0}. \tag{2.4.18}$$

It is seen from (2.4.17) that choosing $d = 8$ would have given a fixed point, while other options would not have allowed to conclude.

Remark 2.4.2. As soon as the polynomial interpolation remains strictly positive (when $d = 1$ for example), one can show that there is convergence of the trajectory deduced by polynomial interpolation to the exact trajectory (at the continuous level (2.4.14), and at the discrete level (2.4.15)).

2.4.2 Time dependent velocity field

We now consider a nonstationary velocity field V given by

$$V(x,t) = v(x - \alpha t), \tag{2.4.19}$$

where v is given by Eq. (2.4.1) and the corresponding Cauchy problem

$$\begin{cases} \dot{x} = V(x,t) = v(x - \alpha t) & t \in [0,T] \\ x(0) = x_0. \end{cases} \tag{2.4.20}$$

This time dependent case is a steady state case if one works in the reference frame moving with the velocity: changing the variable x to $y = x - \alpha t$ in (2.4.20) gives indeed:

$$\begin{cases} \dot{y} = v(y) - \alpha = w(y) & t \in [0,T] \\ y(0) = x_0. \end{cases} \tag{2.4.21}$$

The velocity w is nothing but the velocity v shifted downward by a quantity α. Similarly to the steady state case, there is existence and uniqueness of the solution y to the differential equation (2.4.21) under the integral formulation, if $w > 0$, that is if $0.5 > \alpha$. Consequently, there is existence and uniqueness of the solution x to (2.4.20) if $0.5 > \alpha$.

The corresponding problem using interpolation methods reads

$$\begin{cases} \dot{x} = v_{h,\text{interp}}(x - \alpha t) & t \in [0,T] \\ x(0) = x_0, \end{cases} \tag{2.4.22}$$

and one can find d and α such that the solution $x_{h,\text{poly}}$ of the problem (2.4.22) with $v_{h,\text{interp}} = v_{h,\text{poly}}$, does not converge to the exact solution x. This holds when $w_{h,\text{poly}}(0.5 - 3h/2) = w_0 - \frac{1}{16}d = v_0 - \alpha - \frac{1}{16}d < 0$ that is when $v_0 - \frac{1}{16}d < \alpha$. In particular, the value $d = 1$ for which there was convergence for the polynomial interpolation in the steady state case, can lead to nonconvergence in the time dependent case if $0.4375 < \alpha < 0.5$.

2.5 Bivariate case

We now consider the evolution of test particles in a bivariate potential field. The equations of motion read

$$\begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\partial_y \phi(x,y,t) \\ \partial_x \phi(x,y,t) \end{pmatrix}, \tag{2.5.1}$$

where ϕ is a potential. Following Ref. [6] we consider, as a first example, the following explicit form of the potential:

$$\phi(x,y,t) = \frac{a}{2\pi} \sum_{\substack{n,m=1 \\ n^2+m^2 \le N^2}}^{N} \frac{\sin(2\pi(nx+my) + \varphi_{nm} - \omega t)}{(n^2+m^2)^{3/2}}, \tag{2.5.2}$$

where φ_{nm} and ω are fixed. In what follows, we choose $N = 25$ and $a = 0.5$. The quantities φ_{nm} are random phases in $[0, 2\pi]$. Fig. 2.5.1 shows a visualization of the potential at $t = 0$.

2.5.1 Steady state potential

Here we consider an autonomous potential $\phi(x,y,t) = \phi(x,y)$ corresponding to $\omega = 0$. The equations of motion are then

$$\begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\partial_y \phi(x,y) \\ \partial_x \phi(x,y) \end{pmatrix}. \tag{2.5.3}$$

From the equations of motion (2.5.3), we deduce that

$$\frac{d\phi}{dt} = \partial_x\phi\,\dot{x} + \partial_y\phi\,\dot{y} = 0 \tag{2.5.4}$$

along the trajectory, that means that the trajectories live on isopotential curves. In particular, the trajectory of a particle located on a closed isopotential line is expected to be closed.

This system is referred to as a Hamiltonian system where $H = \phi$ is the Hamiltonian. Hamiltonian systems possess specific properties [34–36]. The Jacobian matrix associated with the system is

$$J = \begin{pmatrix} -\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y} & -\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} \\ \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} & \frac{\partial^2\phi}{\partial y\partial x} \end{pmatrix}. \tag{2.5.5}$$

The Jacobian matrix appears when one looks at the separation in the phase space of two initially close trajectories: the differences δx and δy between the two trajectories in the x and the y directions respectively satisfy the equations

$$\begin{pmatrix} \dot{\delta x} \\ \dot{\delta y} \end{pmatrix} = J \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \end{pmatrix}, \tag{2.5.6}$$

called the tangent dynamics equations.

The eigenvalues of the matrix satisfy

$$-\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y} + \lambda\right)\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial y\partial x} - \lambda\right) + \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} = \lambda^2 - \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y}\right)^2 + \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} = 0, \tag{2.5.7}$$

and $\lambda_1 + \lambda_2 = 0$, this is the property of phase space volume conservation for a Hamiltonian system. This last property can also be established noting that $\lambda_1 + \lambda_2 = \mathrm{tr}(J) = -\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y\partial x} = 0$.

2.5.1.1 Application of interpolation methods: different versions

Here ϕ is supposed to be known on a uniform grid of size Δx, Δy. Given the form of the velocity field in Eq. (2.5.3), there are different ways to apply the interpolation methods: one can either approximate $\partial_x\phi$ and $\partial_y\phi$ on the grid points and then interpolate them or interpolate ϕ and then approximate $\partial_x\phi$ and $\partial_y\phi$. This leads to two versions that do not share the same properties:

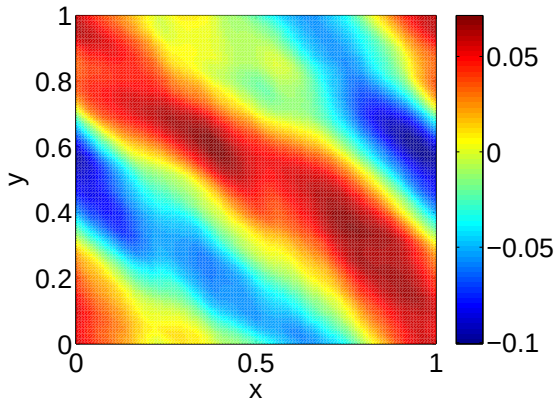


FIG. 2.5.1: Contour plot of $\phi(x, y, t)$ given by Eq. (2.5.2) for $t = 0$, $a = 1$, and $N = 25$.

2.5.1.1.1 Version 1: approximation of $\partial_x\phi$ and $\partial_y\phi$ on the initial grid and then interpolation This version consists, after approximation of the derivatives by finite differences (we call $\frac{\Delta\Phi}{\varepsilon_x}$ and $\frac{\Delta\Phi}{\varepsilon_y}$ these approximations) in integrating

$$\begin{pmatrix}\dot{x}\\ \dot{y}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\left(\frac{\Delta\Phi}{\varepsilon_y}\right)_{\text{interp}}(x,y)\\ \left(\frac{\Delta\Phi}{\varepsilon_x}\right)_{\text{interp}}(x,y)\end{pmatrix}. \tag{2.5.8}$$

The discrete Jacobian matrix associated with the system is

$$J_1 = \begin{pmatrix} -\frac{\Delta\left[\left(\frac{\Delta\Phi}{\varepsilon_y}\right)_{\text{interp}}\right]}{\varepsilon_x} & -\frac{\Delta\left[\left(\frac{\Delta\Phi}{\varepsilon_y}\right)_{\text{interp}}\right]}{\varepsilon_y} \\ \frac{\Delta\left[\left(\frac{\Delta\Phi}{\varepsilon_x}\right)_{\text{interp}}\right]}{\varepsilon_x} & \frac{\Delta\left[\left(\frac{\Delta\Phi}{\varepsilon_x}\right)_{\text{interp}}\right]}{\varepsilon_y} \end{pmatrix}. \tag{2.5.9}$$

Because in general $\operatorname{tr}(J_1) \neq 0$, the Hamiltonian structure is broken and the conservative property is not guaranteed.

2.5.1.1.2 Version 2: interpolation of ϕ and then approximation of $\partial_x\phi$ and $\partial_y\phi$ This second version consists in integrating

$$\begin{pmatrix}\dot{x}\\ \dot{y}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\frac{\Delta\Phi_{\text{interp}}}{\varepsilon_y}(x,y)\\ \frac{\Delta\Phi_{\text{interp}}}{\varepsilon_x}(x,y)\end{pmatrix}. \tag{2.5.10}$$

This version is "conservative": indeed a direct computation of $\Phi_{\text{interp}}(x_{n+1}, y_{n+1})$ shows that this quantity is asymptotically conserved at each step (i.e. when ε_x, ε_y, δt go to zero) and therefore remains almost constant on the trajectories. One should notice that the form (2.5.10) is moreover required to use symplectic schemes suited to Hamiltonian systems.

Remark 2.5.1. In practice, for version 1, the generation of the two sets $\frac{\Delta\Phi}{\varepsilon_x}$ and $\frac{\Delta\Phi}{\varepsilon_y}$ is first performed using interpolation on a fine grid. Then interpolation at each position is performed on the two sets.

For version 2, interpolation methods are first used to evaluate the potential at each position. The quantities $\frac{\Delta\Phi_{\text{interp}}}{\varepsilon_x}$ and $\frac{\Delta\Phi_{\text{interp}}}{\varepsilon_y}$ are then evaluated. These evaluations involve extra interpolations on a fine grid in the vicinity of each position. This extra interpolation is very expensive for classical interpolation methods but has a negligible cost for subdivision.

The aim of the next two parts is to show the advantage of the conservative version. Two criteria of trajectory quality are suggested in order to measure the performance of the methods: potential conservation and averaged errors.

2.5.1.2 Potential conservation along the trajectory

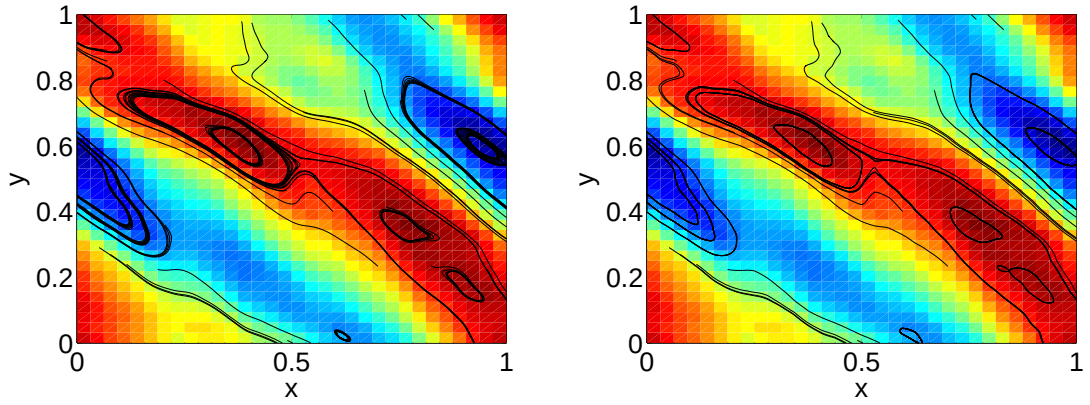
Here, interpolation methods are applied using coarse grids of size $\Delta x = \Delta y = \frac{1}{32}$. Tab. 2.5.1 summarizes the various parameters used. The time integration is performed using a fourth-order Runge-Kutta scheme with $\delta t = \frac{\Delta x}{6}$.

Fig. 2.5.2 shows the trajectories obtained using polynomial interpolation. One can already note that the conservative version (version 2) provides closed trajectories unlike version 1. Qualitatively, with the conservative method, the closed trajectories do not dissipate and energy is better conserved, whereas with the nonconservative version, the

Interpolation	Classical method			Subdivision scheme	
	Polynomial degree 3	Spectral	Cubic splines	Lagrange	PPH
Parameters version 1	–	–	–	$r = 2^{-22}$	$r = 2^{-22}$
Parameters version 2	$\varepsilon_x = \varepsilon_y = 2^{-17}$	$\varepsilon_x = \varepsilon_y = 2^{-17}$	$\varepsilon_x = \varepsilon_y = 2^{-17}$	$r = 2^{-16}$	$r = 2^{-16}$

TAB. 2.5.1: Parameters of the interpolation methods. r: final resolution of the grid after application of a subdivision scheme starting from a grid with spacing Δx (the number of iterations L satisfies $\frac{\Delta x}{2^L} = r$), $\varepsilon = \varepsilon_x = \varepsilon_y$: used step to approximate derivatives by second-order finite differences. We imposed $2\varepsilon = r$.

thickness of the curves expected to be closed shows that there is dissipation of energy over time. The same behavior is observed for the other interpolation methods. For instance, Fig. 2.5.3 represents the trajectories obtained for a selected particle by the PPH scheme: using the conservative version we obtain a closed trajectory, while with the nonconservative version, the energy dissipates as shown on the one hand by the trajectory (Fig. 2.5.3a) which is arranged in a spiral-shape and on the other hand by the x-coordinate (Fig. 2.5.3b) which oscillates with a decrease in the amplitude. Opposite, the conservative trajectory is very close to the exact one.



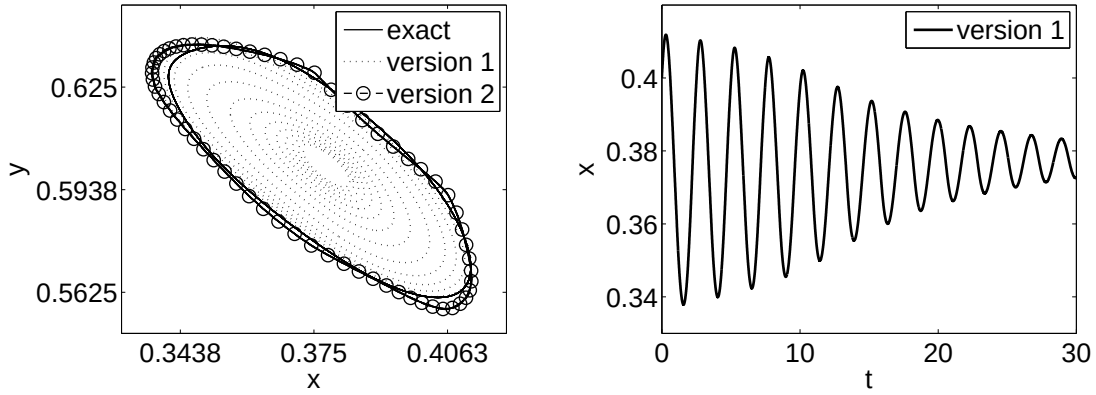
(a) Version 1: interpolation methods applied to $\partial_x \phi$ and $\partial_y \phi$

(b) Version 2: interpolation methods applied to ϕ

FIG. 2.5.2: Trajectories obtained using polynomial interpolation of degree 3 on grid(s) $\Delta x = \frac{1}{32}$.

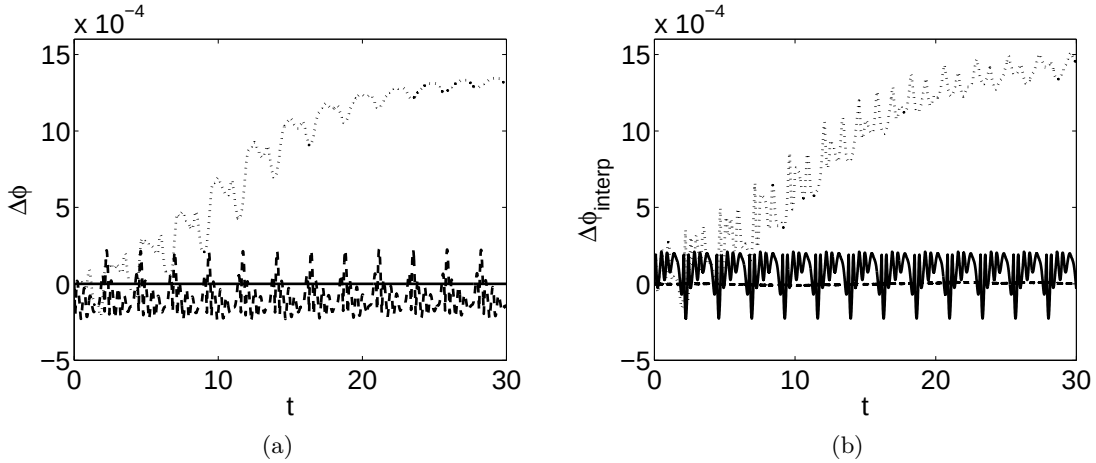
We have also plotted in Fig. 2.5.4a the variation $\Delta\phi = \phi(t) - \phi(0)$ of the potential along each trajectory: the exact one, the one obtained using PPH version 1, and that obtained using PPH version 2. As expected, the exact potential is conserved along the exact trajectory while it varies along the trajectory obtained by conservative interpolation (version 2) but remains centered around 0 in contrast to its variation along the trajectory obtained by nonconservative interpolation (version 1). Finally in Fig. 2.5.4b, the quantity $\Delta\phi_{\text{interp}} = \phi_{\text{interp}}(t) - \phi_{\text{interp}}(0)$ of the interpolated potential along each trajectory is plotted. As expected, the interpolated potential is conserved along the trajectory obtained using the conservative version.

Focusing now on a particular initial condition, we look at the conservation of the potential along the trajectories obtained by the different interpolation methods using the conservative version. Again, we can look at the conservation of the exact potential ϕ, or the conservation



(a) (b)

FIG. 2.5.3: Panel (a): Comparison of the numerical trajectories starting from a grid with $\Delta x = \frac{1}{32}$. Solid line: exact trajectory obtained using the analytical expression of the potential (Eq. (2.5.2)). Dashed line with circle marker: PPH subdivision for the reconstruction of $\partial_x \phi$, $\partial_y \phi$ (version 1). Dotted line: PPH subdivision for the reconstruction of ϕ followed by finite difference approximations for the derivatives (version 2). Panel (b): Time evolution of the x-coordinate of the trajectory obtained with the nonconservative version 1.



(a) (b)

FIG. 2.5.4: Panel (a): Variations $\Delta\phi = \phi - \phi(t=0)$ of the exact potential (Eq. (2.5.2)) along the trajectories shown on Fig. 2.5.3a. Panel(b): Variations $\Delta\phi_{\text{interp}} = \phi_{\text{interp}} - \phi_{\text{interp}}(t=0)$ of the interpolated potential using PPH subdivision along the trajectories shown on Fig. 2.5.3a. The value of the exact potential at the initial time is approximatively 0.034.

of the interpolated potential ϕ_{interp}. The trajectories obtained using spectral and cubic splines interpolations are shown in Fig. 2.5.5, and the corresponding conservation of the potential is shown in Fig. 2.5.6. The variations of the interpolated potential are small but show some dissipation due to the numerical integration, and a quasi-periodicity is observed due to the number of complete turns the particle performs in the simulation. Potential variations along the trajectories are found to be weak and periodic. Tab. 2.5.2 summarizes the results for the different interpolation methods, the best conservation of the interpolated potential obtained for spectral interpolation and cubic splines can be explained by the regularity of the interpolated potential using these methods, see Tab. 2.2.1.

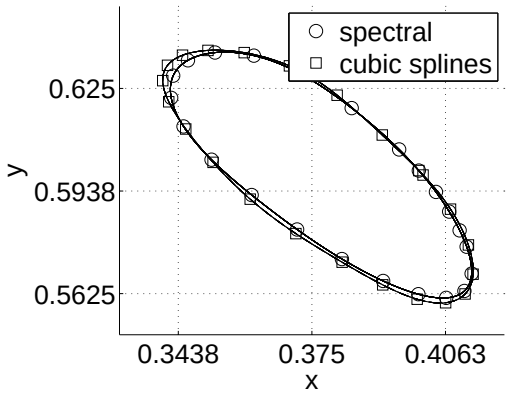


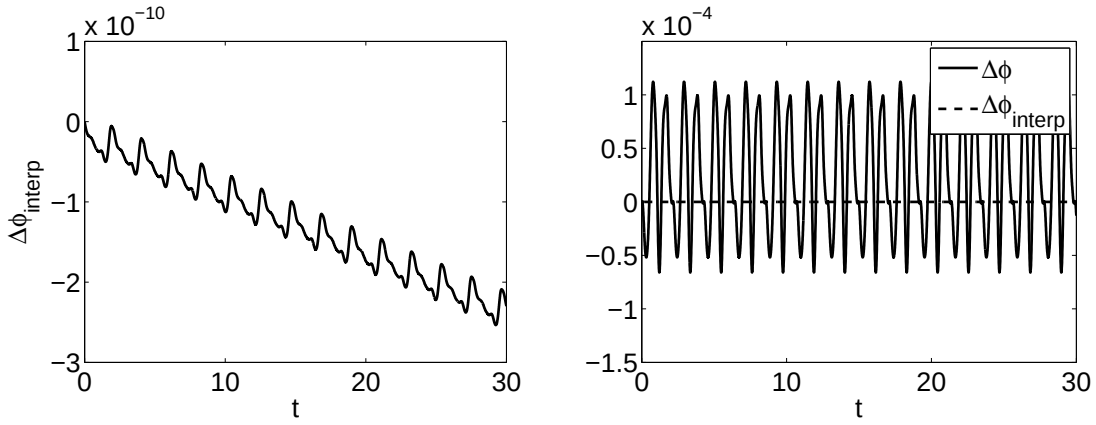
FIG. 2.5.5: Comparison of the numerical trajectories using the conservative version 2 starting from a grid with $\Delta x = \frac{1}{32}$ and an initial position $x_0 = 0.4$, $y_0 = 0.6$. Circle marker: spectral interpolation. Square marker: cubic splines.

Interpolation	Classical method			Subdivision scheme	
	Polynomial degree 3	Spectral	Cubic splines	Lagrange	PPH
$\max \lvert\Delta\phi\rvert$	2.5991e-004	1.1222e-004	1.3009e-004	2.4252e-004	2.3705e-004
$\max \lvert\Delta\phi_{\text{interp}}\rvert$	1.1517e-005	2.5352e-010	2.4442e-010	3.1077e-006	1.3625e-005

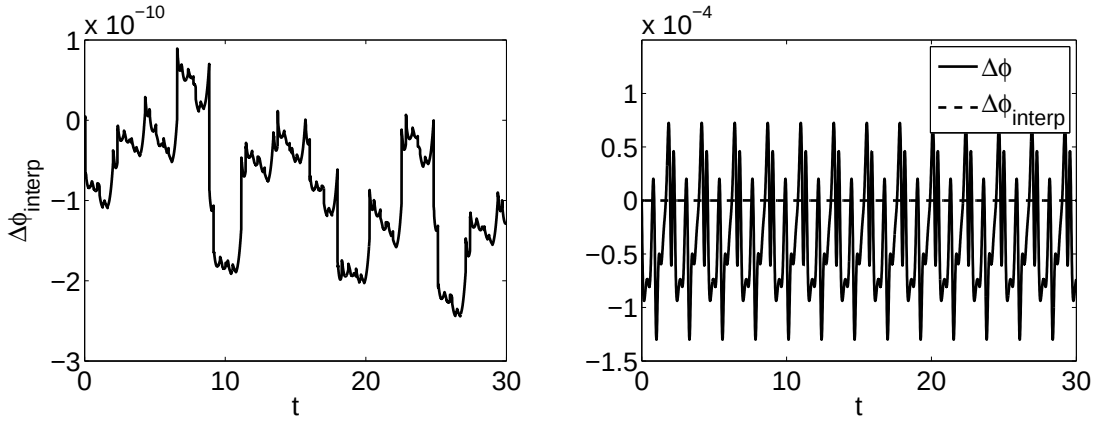
TAB. 2.5.2: Potential conservation along the trajectories obtained using different interpolation methods with the conservative version 2 starting from a grid with $\Delta x = \frac{1}{32}$ and for an initial condition given by $x_0 = 0.4$, $y_0 = 0.6$.

2.5.1.3 Averaged errors

Following Ref. [18] and in order to continue the comparison between the conservative and nonconservative versions, we consider sets of $N_p = 125$ particles with initial positions uniformly randomly distributed in $[0, 1] \times [0, 1]$, and compare at each instant the approximated trajectories using various interpolation methods to the true ones obtained using the analytic expressions of the velocities at each point. The exact trajectories $\mathbf{x}_{\text{exa}}$ are obtained without interpolation using a fourth-order Runge-Kutta scheme with a time step $\delta t = \frac{1}{6}\frac{1}{2^{10}}$, while the trajectories $\mathbf{x}_{\text{interp}}$ are obtained using a fourth-order Runge-Kutta scheme with $\delta t = \frac{\Delta x}{6}$ with Δx the sampling. Then, at each time $t \geq 0$, the errors are



(a)



(b)

FIG. 2.5.6: Variations of the interpolated and the exact potentials along the trajectories shown in Fig. 2.5.5. Panel (a): Spectral interpolation. Panel (b): Cubic splines. The value of the exact potential at the initial time is approximatively 0.034.

averaged over all the particles as follows

$$E(t) = \left(\frac{1}{N_p} \left(\sum_{n=1}^{N_p} \left| \mathbf{x}_{\text{interp}}(t) - \mathbf{x}_{\text{exa}}(t) \right|^2 \right) \right)^{1/2}. \tag{2.5.11}$$

Fig. 2.5.7 shows the results obtained using the PPH scheme, and Tab. 2.5.3 summarizes the results for the different interpolation methods.

Errors using the conservative version (version 2) are less important than using the nonconservative version (version 1) for which errors increase with time, indicating that particles stray from their correct trajectories. Clearly version 2 is the most suitable for our problem. The performance of spectral interpolation for a grid $\Delta x = \frac{1}{64}$ (almost zero error) is explained by the form of the potential (2.5.2) (with $\omega = 0$ and $N = 25$) considered here: the grid captures all the relevant modes (up to $N = 25$) and spectral interpolation therefore leads to an exact reconstruction. Tab. 2.5.4 shows the errors obtained in the case $\Delta x = \frac{1}{64}$ for different times steps. The value $\delta t = \frac{\Delta x}{6}$ ensures the convergence of the trajectories.

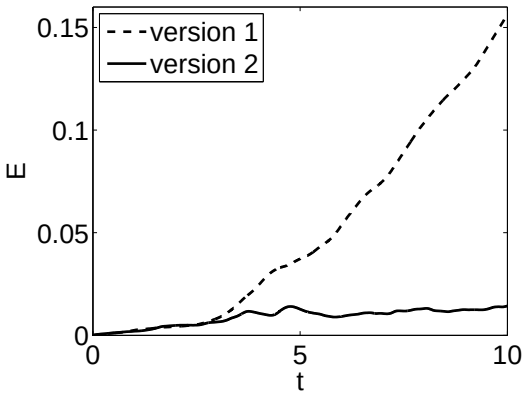


Fig. 2.5.7: Averaged errors (2.5.11) over $N_p = 125$ particles for $0 \leq t \leq 10$ starting from an initial grid with $\Delta x = \frac{1}{64}$. Solid line: PPH subdivision using conservative version 2. Dashed line: PPH subdivision using nonconservative version 1.

	Interpolation	Classical method			Subdivision scheme	
		Polynomial degree 3	Spectral	Cubic splines	Lagrange	PPH
$\Delta x = \frac{1}{16}$	Conservative	0.3237	0.3202	0.3099	0.3340	0.3297
	Nonconservative	0.5675	0.7092	0.6149	0.5468	0.6708
$\Delta x = \frac{1}{32}$	Conservative	0.2489	0.2372	0.2495	0.2458	0.2349
	Nonconservative	0.2578	0.2694	0.2663	0.2575	0.3275
$\Delta x = \frac{1}{64}$	Conservative	0.0110	2.5540e-008	0.0043	0.0105	0.0143
	Nonconservative	0.0849	9.5695e-012	0.0108	0.0915	0.1563

Tab. 2.5.3: Maximum of averaged errors (2.5.11) for $0 \leq t \leq 10$ over $N_p = 125$ particles using different interpolation methods with $\delta t = \frac{\Delta x}{6}$.

	Interpolation	Classical method			Subdivision scheme	
		Polynomial degree 3	Spectral	Cubic splines	Lagrange	PPH
$\delta t = \frac{\Delta x}{12}$	Conservative	0.0109	2.5540e-008	0.0042	0.0105	0.0143
	Nonconservative	0.0848	4.566e-013	0.0108	0.0915	0.1563
$\delta t = \frac{\Delta x}{24}$	Conservative	0.0109	2.5540e-008	0.0042	0.0105	0.0143
	Nonconservative	0.0848	3.259e-13	0.0108	0.0915	0.1562

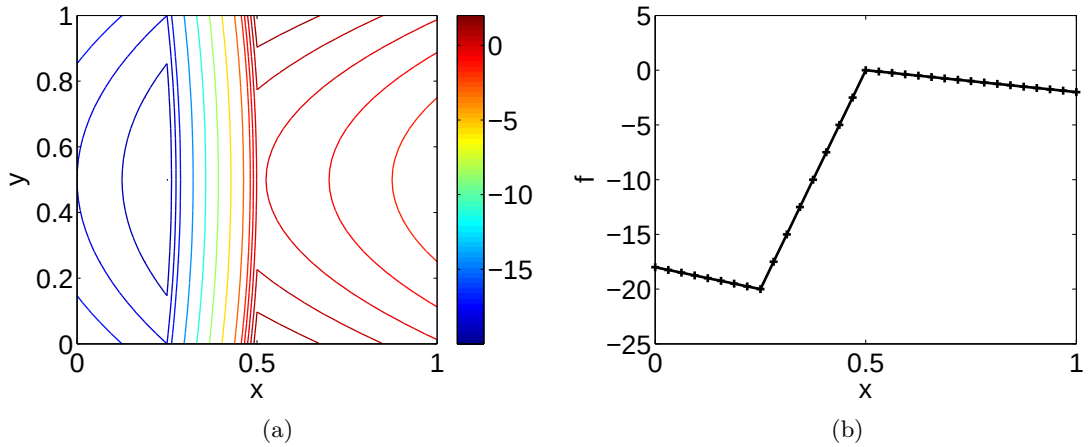
TAB. 2.5.4: Maximum of averaged errors (2.5.11) for $0 \leq t \leq 10$ over $N_p = 125$ particles using different interpolation methods with $\Delta x = \frac{1}{64}$.

2.5.2 Nonsmooth potential

We consider again a steady state potential but the potential ϕ is now supposed to be strongly varying. It is of the form:

$$\phi(x, y) = (4y - 2)^2/2 + f(x), \tag{2.5.12}$$

where f is a continuous piecewise linear function represented in Fig. 2.5.8b. The potential is illustrated in Fig. 2.5.8a.



(a) (b)

FIG. 2.5.8: Nonsmooth potential given by Eq. (2.5.12). Panel (a): Contour plot. Panel (b): Profile in the x-direction for $y = 0.5$.

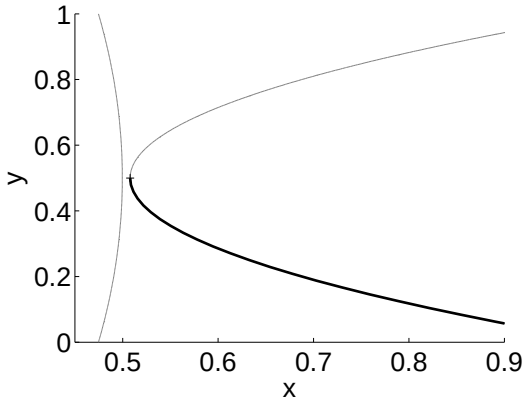
As shown in the figures, there are essentially two families of trajectories living either on the left or on the right of $x = 0.5$.

These two families are separated by a particular point corresponding to a local maximum in the x direction for $y = 0.5$.

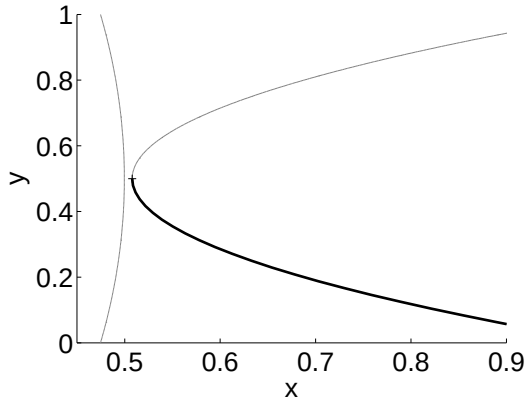
As previously, we consider that the potential is only known on a discrete grid. Interpolation is used to reconstruct the potential entirely in order to compare it to the real potential.

Let us focus first on the interpolated points in the x direction: while the PPH scheme reconstructs exactly the sections in this direction, the polynomial interpolation gives rise to a bump (quite similar to the oscillation encountered in the univariate case because of the Gibbs phenomenon) that shifts the local maximum that was mentioned earlier to the right. Reminding that this local maximum separates two different regions in the phase space, this means that using polynomial interpolation, a particle that theoretically belongs

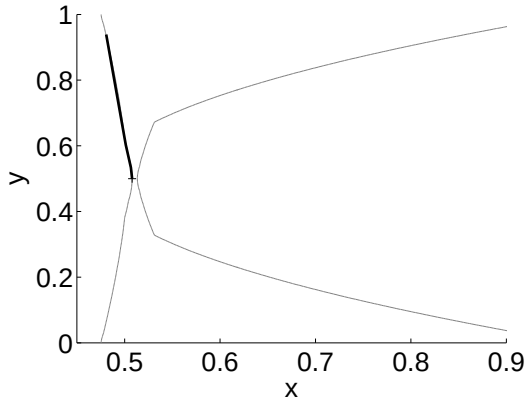
to the family of the right side, will belong numerically to the family of left side. This is exactly what is shown on Fig. 2.5.9 where the numerical integration was performed with $\Delta x = \frac{1}{32}$ and $\delta t = \frac{\Delta x}{6}$.



(a) Exact



(b) PPH scheme



(c) Polynomial interpolation degree 3

FIG. 2.5.9: Isovalues (thin line) and trajectories (thick line) obtained for a particle initially placed at the position $(x_0, y_0) = (0.5 + \frac{1}{2^7}, 0.5)$ in the nonsmooth potential (2.5.12).

2.5.3 Time dependent potential

We return to the general case of a time dependent potential $\phi(x, y, t)$ and the corresponding equations of motion given by Eq. (2.5.1). In this case, the potential is no longer conserved along the trajectory. Indeed $\frac{d\phi}{dt} = \partial_x\phi\,\dot{x} + \partial_y\phi\,\dot{y} + \partial_t\phi = \partial_t\phi \neq 0$. However by introducing a new variable E which evolves according to $\dot{E} = -\partial_t\phi(x, y, t)$, we restore the Hamiltonian structure. The autonomous Hamiltonian of the model is $H = E + \phi$ and $\frac{dH}{dt} = 0$ along the trajectory. Again given the conservative aspect of the problem, in the sequel we adopt the conservative interpolation version (version 2). The conservative approach when ϕ is only known on a grid consists in considering the following system

$$\begin{cases} \dot{x} = -\partial_y\phi_{\text{interp}}(x, y, t) \\ \dot{y} = \partial_x\phi_{\text{interp}}(x, y, t) \\ \dot{E} = -\partial_t\phi_{\text{interp}}(x, y, t), \end{cases}$$

where the interpolation is performed in the three directions (x, y, t). Note that the evaluation of E is only required if the conservation of $E + \phi_{\text{interp}}$ must be checked.

2.5.3.1 Applications to the analysis of particle transport in plasmas

To test the interpolation schemes on a realistic time-dependent potential, $\phi(x, y, t)$, we consider the electrostatic potential fields encountered in the edge turbulence of magnetically confined fusion plasmas. Turbulent transport [37] determines the confinement of high temperature plasmas encountered in fusion devices, and hence is of interest with regards to the efficiency of energy extraction.

Among the phenomena observed at the outer edge of fusion plasmas, we are interested in the trajectories of charged impurities produced by the interaction of the plasma with the main chamber, impurities that are carried by the turbulent velocity field according to

$$\begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\partial_y \phi(x, y, t) \\ \partial_x \phi(x, y, t) \end{pmatrix}. \tag{2.5.13}$$

Because of their very low concentration, these charged impurities do not modify the plasma electric potential ϕ, and consequently can be considered as passive scalars. However depending on their spreading in the plasma domain, they can deteriorate significantly the plasma confinement and stability and therefore the performance of the device. For these reasons it is important to understand as much as possible their dynamics [26–30].

The turbulent electric field from which they are advected is solution of the following 2D fluid equations [1, 38]:

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + [\phi, \cdot] - D_n \nabla^2 \right\} n = -\sigma n e^{\Lambda - \phi} + S_o(x), \tag{2.5.14a}$$

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + [\phi, \cdot] - \nu \nabla^2 \right\} \Omega = \sigma n (1 - e^{\Lambda - \phi}) - g \frac{\partial n}{\partial y}. \tag{2.5.14b}$$

These equations for plasma density n and vorticity $\Omega = \nabla \cdot (n \nabla \phi)$ model plasma electrostatic turbulence in the section transversal to the magnetic field in the peripheral region of the tokamak, the toroidal device where the plasma is magnetically confined. The study of electrostatic turbulence can be reduced to a 2D problem using the so called flute approximation, based on the fact that the fluctuations in the direction parallel to the magnetic field are much smaller than those in the perpendicular direction. In this case the computational domain, considered in a Cartesian geometry, is composed of a radial direction x and a poloidal one y. The radial direction is normalized such that $x = (r - a)/\rho_s$ with a the plasma minor radius, r the radius of the considered magnetic surface and ρ_s the hybrid Larmor radius. The poloidal direction $y = a\theta/\rho_s$ represents the poloidal angle on the magnetic surface, with θ the actual poloidal angle.

The first equation is obtained from the balance equation for plasma electron density n and the second one from charge conservation in the quasi neutral limit. More precisely, in the plasma density equation, one considers the advection term due to the electric drift velocity, expressed by the Poisson bracket $[\phi, n] = (\partial_x \phi \, \partial_y n - \partial_y \phi \, \partial_x n)$ and a small diffusion smoothing term with coefficient D_n. On the right hand side one has a density source term S_o, that is localized spatially at the entrance of the domain and that represents the source of density due to the plasma of the central region and that maintains the system out of the thermodynamic equilibrium.

The sink term is given by $-\sigma n e^{\Lambda - \phi}$ where σ is a control parameter proportional to the saturation current and where Λ is the plasma potential with respect to the reference

potential of the wall. Indeed this term takes into account the losses of plasma density produced by the interaction of the plasma with solid components. In this outer region of the tokamak, called Scrape-Off Layer (SOL), the plasma is in contact with solid objects, like the especially designed facing components for the extraction of particles called divertor or limiters. The interaction between the plasma and the solid objects results in the recombination of the charged plasma particles, that is translated with an appropriate loss term in the fluid equations (see [1]).

Concerning the vorticity equation, on the left hand side one has the same structure of the density equation with the advection term due to the $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ drift velocity and a relatively small viscosity term proportional to the coefficient ν. On the right hand side the loss term has a particular structure given by the physics of the SOL and governs the damping of the large scale structures. The g term is the driving turbulence term and is associated with the curvature drift and the separation of charges. It has been simplified to a coupling to the poloidal density gradient. It is equivalent to the gravity term when addressing buoyancy effects in a neutral fluid.

Numerically, density and potential fields are obtained from computations performed using the spectral code *TOKAM-2D* [1] in which Eqs. (2.5.14) are evolved in time using a second-order predictor-corrector scheme. Spatial derivatives are computed using spectral schemes based on Fourier approximations, thereby providing a reference case for comparing the results of various interpolation schemes.

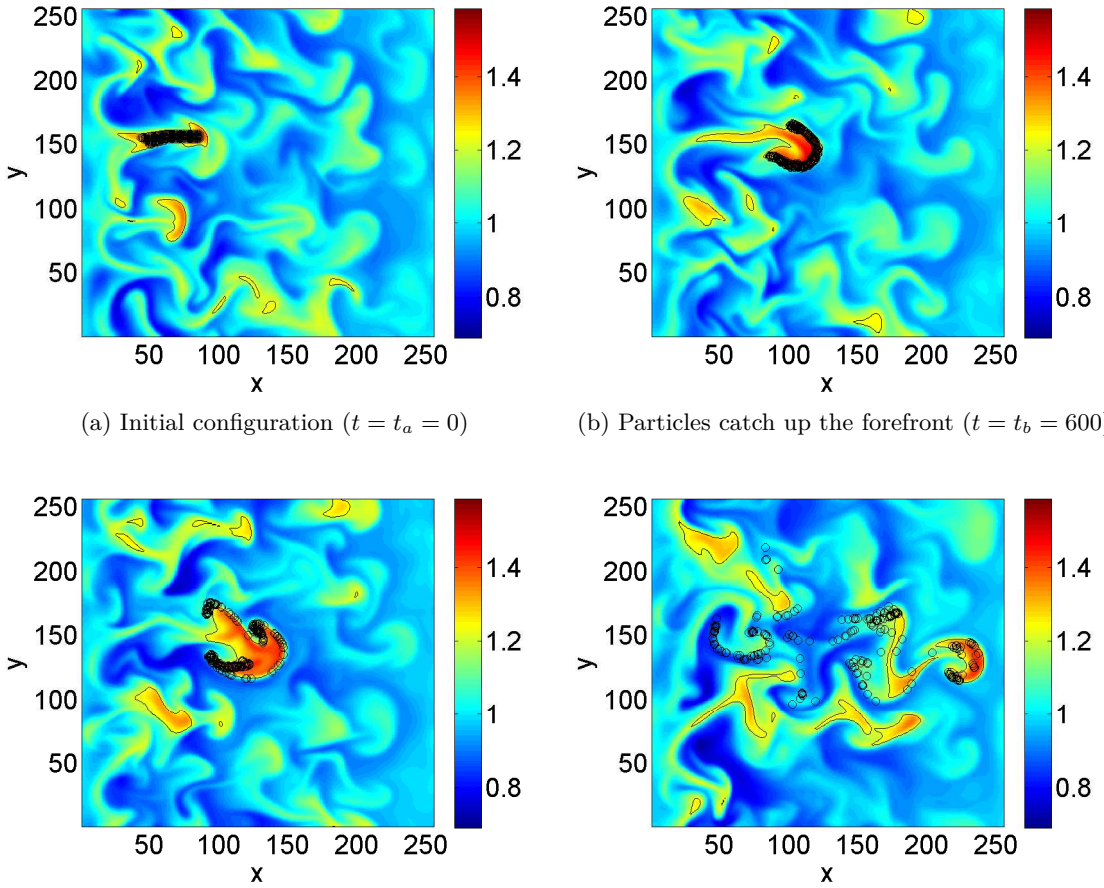
In the following sections, we consider two physical situations for charged test particle simulations. First we consider the behavior of charged test particles advected by the electric potential and initially located in one of the coherent structures [39] that appear in the density field. A comparison of their dynamics with the one of the structures is performed. Second, we analyze the influence of an external biasing of a probe [38] on the potential field and the dynamics of test particles initially located in this biased region.

2.5.3.2 Dynamics of structures versus dynamics of particles

The starting point of this study is the set of density and potential fields generated by TOKAM-2D flux driven simulations, as introduced in the previous section. Fig. 2.5.10 shows the normalized density fields $C(x, y, t) = n(x, y, t)/\langle n(x, y, t)\rangle_{y,t}$ at various times where the average over y and t is performed to take into account the strong radial decay of density due to the sink term and to allow one to have a better visualization of the regions in the far SOL (large radial coordinate). As shown on Fig. 2.5.11, the density field exhibits overdense and subdense regions whose limits are clearly identified by strongly varying zones. A simple threshold can be used to isolate these regions that will be called structures in the sequel. A structure can be easily followed during its time evolution. From Fig. 2.5.10 it appears that overdense structures move from the source (left) to the far SOL (right) while subdense structures propagate in the opposite direction. In the sequel and for sake of clarity, we focus on the structure located at time $t = 0$ around the point of maximum density found to be $(x, y) = (71, 156)$, and defined by the isocontour $C^* = 1.22$ (Fig. 2.5.10). Note that according to Fig. 2.5.11 any value of $1.17 \leq C^* \leq 1.32$ would give almost the same geometric structure.

Given this structure and its time evolution we now investigate the relation between its dynamics and the dynamics of particles initially located inside the structure. The dynamics of the structure is characterized by the trajectory of its center of mass that can be defined at each time by its coordinates $(x_g, y_g) = (\sum_j x_j C_j / \sum_j C_j, \sum_j y_j C_j / \sum_j C_j)$ where the sums are taken over all grid points contained in the structure under consideration, and by the evolution of its radial and poloidal dimensions calculated at the center of mass using

the isocontour defining the structure.



(a) Initial configuration ($t = t_a = 0$)

(b) Particles catch up the forefront ($t = t_b = 600$)

(c) Particles are pushed behind ($t = t_c = 1200$)

(d) Particles spread around ($t = t_d = 3300$)

FIG. 2.5.10: Propagation of particles and structures in the plasma density field.

Numerically 208 particles are randomly distributed in the structure at $t = 0$ and their trajectories are calculated integrating system (2.5.13) using a second-order Runge-Kutta scheme as for the fluid equations of TOKAM-2D. The potential field is given on a grid $N_x \times N_y = 256 \times 256$ at each time step $\Delta t = 1$, and the PPH scheme is used to interpolate the velocity field at the positions of the particles. To compute the trajectories, we used the same time step $\delta t = 1$ as for the integration of the potential field and all the grid points in order to benefit from all the information available. This time step is assumed to be adapted to the integration of trajectories given the small variation of the field between two successive instants (less than $4.2 \cdot 10^{-3}$).

Fig. 2.5.12 shows the number of particles remaining in the structure for $0 \leq t \leq 4000$. Clearly three regimes appear: up to $t = t_1$, the number of particles evolves very slowly exhibiting a plateau. It is followed by a very fast decay of the number of particles for $t > t_1$. Then the number of particles decays slowly for $t > t_2$. We call *coherence time* of this structure $t_1 \approx 716\Omega_i^{-1}$.

For particles in the core of the structure (i.e. far from the edges of the structure), coherence time corresponds to the time necessary to reach the top right of the structure. Indeed if a particle is set at position $x = 44$, $y = 155$ at $t = 0$ that correspond to the most left position of the core of the structure, our simulations show that it reaches the top right

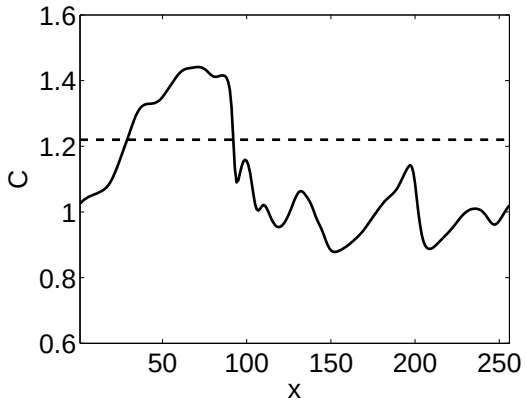


FIG. 2.5.11: Radial profile (x-direction) of the normalized density C at $y = 156$ and $t = 0$. Dashed line: $C^* = 1.22$.

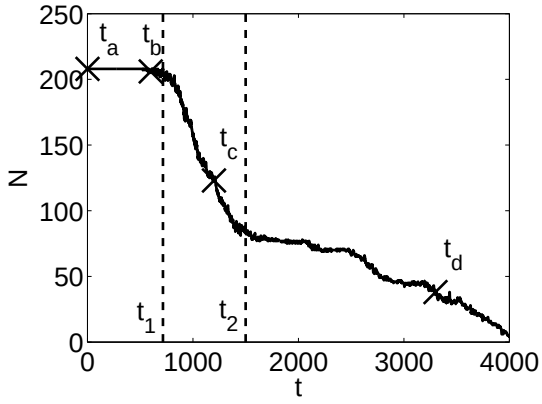


FIG. 2.5.12: Number of trapped particles in the structure versus time. The crosses correspond to the times (t_a, t_b, t_c, t_d) considered in Fig. 2.5.10.

of the structure at time $t \approx t_1$. Moreover, if V_s is the average velocity of the center of mass of the structure for $0 \leq t \leq t_1$, if V_p is the average velocity of the particle for the same interval of time and if $(V_p - V_s)t_1 = \Delta_s$, then Δ_s gives an average of the radial size of the structure. Indeed, we get $\Delta_s \approx 41.7\rho_s$ that is consistent with a direct estimation of the radial size of the structure by averaging the different sizes during the coherence time t_1 since that gives $\Delta_s \approx 46.5\rho_s$.

Fig. 2.5.13 shows that the trajectories of particles along a perpendicular to the velocity of the center of mass differ qualitatively: particles in the core move parallel to the center of mass and finally, as previously reach the top of the structure at $t \approx t_1$. Other particles reach more rapidly the edge of the structure in a movement parallel to the trajectory of the center of mass and then exhibit strongly curved trajectories maintaining the particles inside the structure for $t < t_1$. The plot of the radial velocity of each particle (Fig. 2.5.14) shows that each particle goes through a sequence of acceleration then deceleration down to a very small velocity. The precise velocities depend on the position of the particle on the perpendicular. The evolution of the standard deviation of the distribution of radial speeds on the perpendicular versus time shows that initial and final stage of coherence are separated by a period of wide distribution of velocities corresponding to the various times at which particles reach the edge of the structure. If we consider $\langle V_p \rangle_\Delta$ the radial velocity averaged on the perpendicular to the velocity of the center of mass at a distance Δ to the top right of the structure, it appears according to Fig. 2.5.15 that $\langle V_p \rangle_\Delta - V_s$ is overestimated by $\frac{\Delta}{t_1}$. This quantity is equal to $\langle V_p \rangle_\Delta - V_s$ when all particles move in a direction parallel to that of the structure.

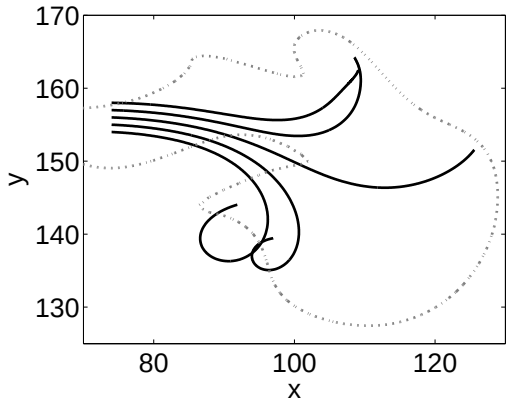
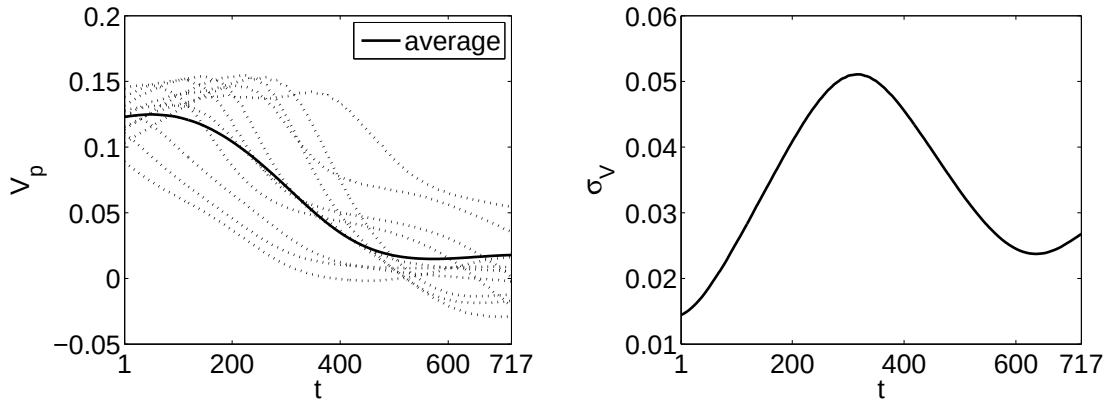


FIG. 2.5.13: Solid line: Trajectories of 5 particles starting from the same x-coordinate for $0 \leq t \leq t_1$. Dotted line: Contour of the structure at $t = t_1$. t_1 is the coherence time shown on Fig. 2.5.12.

The sketch that emerges from this analysis is the following: particles initially located into the structure tend first to move towards the forefront of the structure. Then up to $t < t_1$ their trajectories curve in the poloidal direction in such a way that the particles remain in the structure. For $t_1 \leq t \leq t_2$, particles located at the edge of the structure are ejected in the surrounding plasma. Neither the question of entering particles nor the capture of ejected particles by the other structures have been investigated in this paper. However, the velocity field plotted in Fig. 2.5.16 at two different times shows that the radial velocity is important inside the structure but decreases at the head of the structure, that explains the fact that the particles do not exceed the structure despite the fact that they are going faster. Moreover one observes that around the structure there are some



(a) (b)

FIG. 2.5.14: Panel (a): Instantaneous velocities in the x-direction of 11 particles during the coherence time (dotted line) and average of the velocities of the 208 particles (solid line). Panel (b): Measure of dispersion by standard deviation versus time.

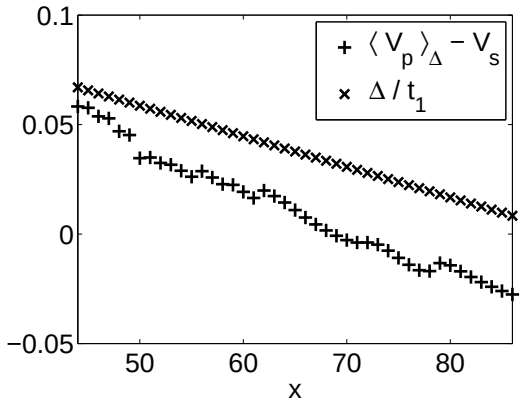
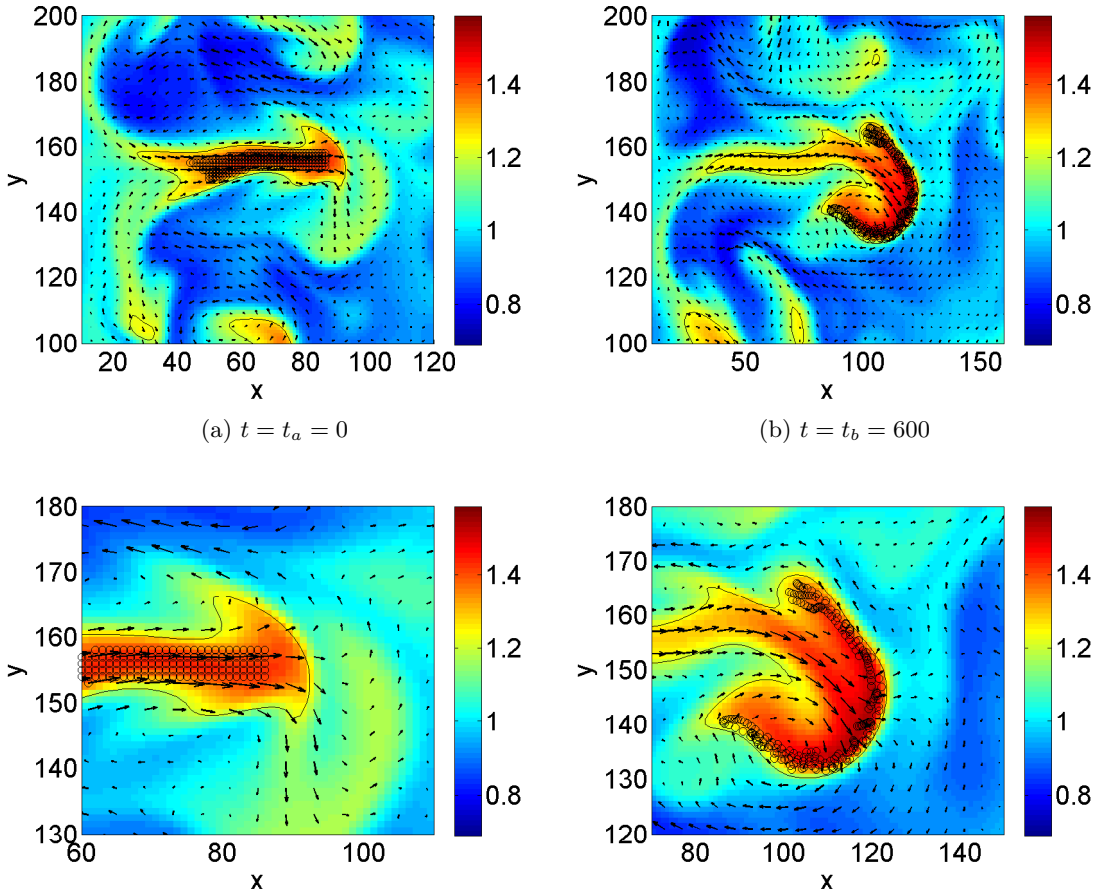


FIG. 2.5.15: Plus marker: Difference between the average radial velocity $\langle V_p \rangle_\Delta$ over particles initially at a distance Δ to the top right of the structure, and the velocity of the structure V_s. Cross marker: $\frac{\Delta}{t_1}$ with t_1 the coherence time. The plots are with respect to x which is the radial coordinate of the particles at $t = 0$.

exchange zones where the velocity field carries particles into the structure and other zones where the velocity field is almost zero creating a sort of barrier to the exchange of particles.



(a) $t = t_a = 0$ (b) $t = t_b = 600$

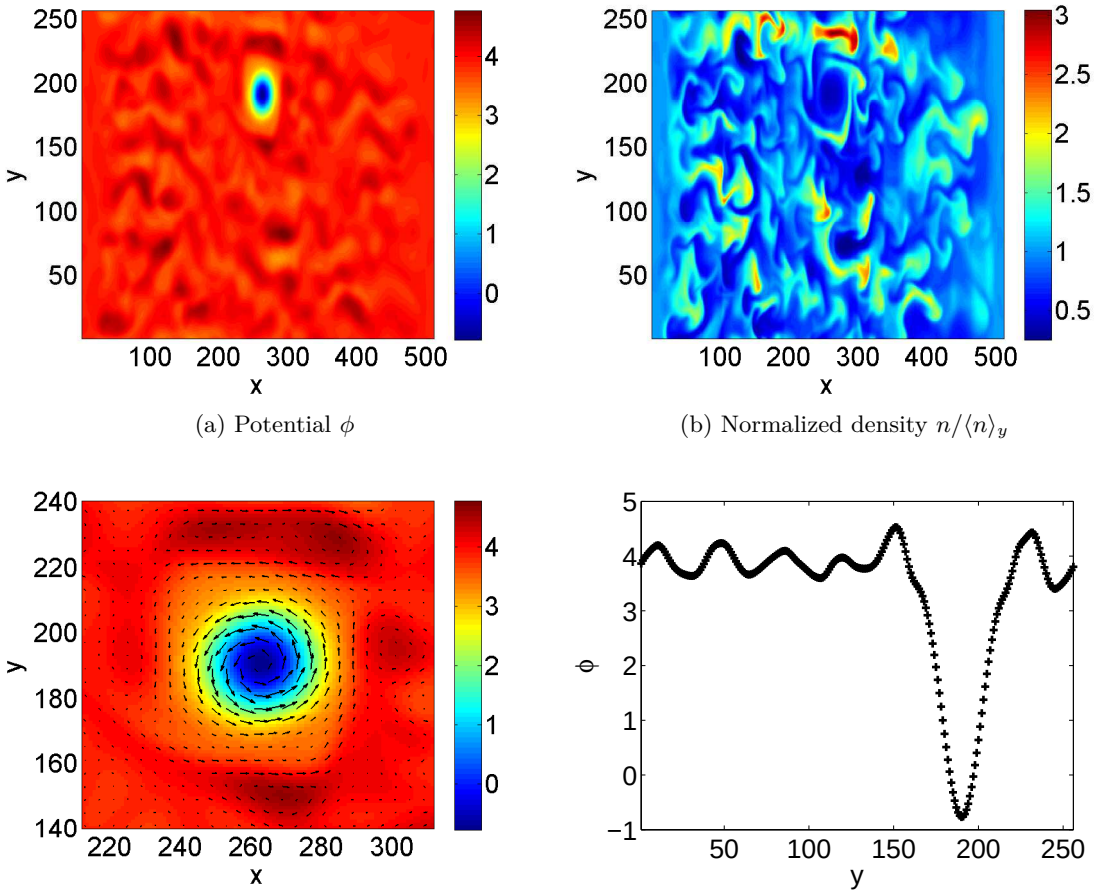
(c) $t = t_a = 0$ (d) $t = t_b = 600$

FIG. 2.5.16: Contour plot of the density field near the structure under consideration at two different times t_a and t_b. The velocity field is represented by arrows. Bottom panels are enlargement of top panels.

2.5.3.3 Particle tracking in the presence of a probe

We now consider the potential and density fields generated by TOKAM-2D when a probe is introduced in the field [38]. As can be seen on Fig. 2.5.17 the probe generates around its location a very low density region, a strong local minimum for the potential and a vortex velocity fields. In our simulation, the probe position is $x = 262$, $y = 190$. This situation is related to Section 2.5.2 and to Section 2.5.3 since the nonstationary potential exhibits rather strong variations. From a physical point of view, the majority of the particles initially in the region defined by the local minimum potential remains trapped in the vicinity of the probe. However, due to nonstationarity, some of them may leave their initial region. A precise analysis of the influence of the probe on the surrounding plasma is of interest. The behavior of impurities can be used as an indicator of the degree of invasiveness of the probe. Clearly, according to the results of Sections 2.5.2 and 2.5.3, the tracking of particles in such a flow is a real challenge for spatial as well as temporal

interpolators.



(a) Potential ϕ

(b) Normalized density $n/\langle n\rangle_y$

(c) Potential ϕ and velocity field near the probe

(d) Potential section in the y-direction at $x = 262$

FIG. 2.5.17: Potential and density fields generated by TOKAM-2D in the presence of a probe centered at $x = 262$, $y = 190$. Note that $\langle n\rangle_y$ is a function of x and t.

A reference simulation for the particle tracking has been performed using potential fields sampled spatially on a grid $N_x \times N_y = 512 \times 256$ with $\Delta x = 1$, $\Delta y = 1$ and temporally with $\Delta t = 1$ for 7000 time steps. Trajectories of 100 particles initially in the probe region (Fig. 2.5.18) have been simulated using spectral interpolation for the potential and second-order Runge-Kutta time integration scheme with $\delta t = 1$. Subsampled fields have been used to test the interpolators. They correspond to a grid $N'_x \times N'_y = 256 \times 128$ defined by $\Delta x = 2$ and $\Delta y = 2$, with $\Delta t = 50$. Trajectories of the same particles have then been simulated for PPH interpolation with the same time integration scheme and time step $\delta t = 1$. Note that interpolation is required in both space and time domains.

Defining the probe region as the disk of radius $R = 25$ centered at $(x, y) = (262, 190)$ as shown in Fig. 2.5.18, we have plotted in Fig. 2.5.19 the number of particles trapped in the probe region versus time for the reference simulation and the subsampled/PPH interpolated simulation. We note that the PPH interpolation reproduces quite well the results of the spectral interpolation even if a drastically reduced information of the potential field has been used.

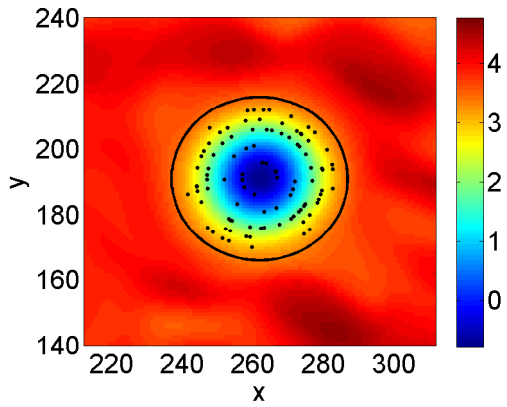


FIG. 2.5.18: Contour plot of the potential field in the probe region and initial conditions for test particles inside the probe (black dots), the circle is a representation of the edge of the probe.

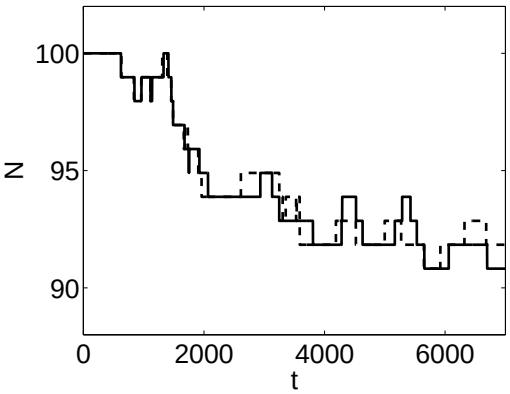


FIG. 2.5.19: Number of trapped particles in the probe versus time. Solid line: Spectral interpolation (reference simulation). Dashed line: PPH subdivision with subsampled data.

2.6 Conclusion

The simulation of the propagation of particles in a discrete velocity field strongly relies on interpolation operators as shown by the theoretical and numerical results of this paper. Such a situation of discrete velocity field is often found if the field is the result of a numerical code or an experimental measurement. The situation may be all the more drastic as the field has discontinuities or at least strong gradients. In that framework, it has been shown that nonlinear subdivision schemes can advantageously be substituted to classical linear operators. This advantage has been highlighted first on a critical univariate velocity field with a discontinuity leading to the Gibbs phenomenon when classical linear interpolation methods are used, and then on a bivariate velocity field deriving from a nonsmooth potential where the separation of different regions in the phase space may not be recovered with accuracy using classical methods. In these two situations, particles can be deflected from their correct trajectories if one uses classical methods.

We have emphasized the use of a conservative interpolation version since when dealing

with a velocity field deriving from a potential (stream function) it allows to keep the Hamiltonian structure of the problem: practically that consists in interpolating the discrete potential and then differentiating the interpolated potential. A quantitative comparison was made between conservative and nonconservative versions on an analytical test potential.

The proposed interpolation operator for tracking based on the nonlinear Piecewise Parabolic Harmonic (PPH) subdivision scheme was applied to turbulent time-dependent potential fields related to magnetically confined plasmas. The method has been used to study the dynamics of particles inside coherent structures. The case of a potential perturbed in the presence of a probe has also been investigated.

From a physical point of view, the comparison of the propagation of density structures through plasma with the dynamics of passive particles showed that various transfer regimes occur in the structure and more generally that different exchange scenarii model the interaction between the structure and the plasma.

Acknowledgments

This work was supported by the European Community under the contract of Association between EURATOM, CEA, and the French Research Federation for Fusion study. The views and opinions expressed herein do not necessarily reflect those of the European Commission. This work was financially supported by the ESPOIR project, ANR-09-BLAN-0035-01, http://sites.google.com/site/anrespoir/.

Bibliographie de la partie I

[1] Y. Sarazin and P. Ghendrih. Intermittent particle transport in two-dimensional edge turbulence. *Phys. Plasmas*, 5(12):4214–4228, 1998. 3, 11, 36, 37, 110

[2] B. Bensiali, K. Bodi, G. Ciraolo, P. Ghendrih, and J. Liandrat. Comparison of different interpolation operators including nonlinear subdivision schemes in the simulation of particle trajectories. *J. Comput. Phys.*, 236:346–366, 2013. 5

[3] M. Priego, O. E. Garcia, V. Naulin, and J. J. Rasmussen. Anomalous diffusion, clustering, and pinch of impurities in plasma edge turbulence. *Phys. Plasmas*, 12(6):062312, 2005. 5

[4] M. J. Rubel, J. P. Coad, K. Stenström, P. Wienhold, J. Likonen, G. F. Mattews, and V. Philipps. Overview of tracer techniques in studies of material erosion, re-deposition and fuel inventory in tokamaks. *J. Nucl. Mater.*, 329–333:795–799, 2004. 5

[5] L. Biferale, G. Boffetta, A. Celani, A. Lanotte, and F. Toschi. Particle trapping in three-dimensional fully developed turbulence. *Phys. Fluids*, 17:021701, 2005. 5, 15

[6] G. Ciraolo, F. Briolle, C. Chandre, E. Floriani, R. Lima, M. Vittot, M. Pettini, C. Figarella, and P. Ghendrih. Control of Hamiltonian chaos as a possible tool to control anomalous transport in fusion plasmas. *Phys. Rev. E*, 69:056213, 2004. 5, 6, 11, 26

[7] B. Kadoch, W. J. T. Bos, and K. Schneider. Extreme Lagrangian acceleration in confined turbulent flow. *Phys. Rev. Lett.*, 100:184503, 2008. 5

[8] P. K. Yeung. Lagrangian investigations of turbulence. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 34:115–142, 2002. 5

[9] Y. Sarazin, P. Ghendrih, G. Attuel, C. Clément, X. Garbet, V. Grandgirard, M. Ottaviani, S. Benkadda, P. Beyer, N. Bian, and C. Figarella. Theoretical understanding of turbulent transport in the SOL. *J. Nucl. Mater.*, 313–316:796–803, 2003. Plasma-Surface Interactions in Controlled Fusion Devices 15. 6

[10] O. Izacard, N. Tronko, C. Chandre, G. Ciraolo, M. Vittot, and P. Ghendrih. Transport barrier for the radial diffusion due to the $E \times B$ drift motion of guiding centers in cylindrical confinement geometry. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 53(12):125008, 2011. 6

[11] P. Tamain. *Etude des flux de matière dans le plasma de bord des tokamaks : alimentation, transport et turbulence.* PhD thesis, Université de Provence Aix-Marseille 1, 2007. 6, 51

[12] N. Dyn. Subdivision schemes in computer-aided geometric design. In *Advances in Numerical Analysis*, pages 36–104, 1992. 7, 17

[13] S. Amat. A review on the piecewise polynomial harmonic interpolation. *Appl. Numer. Math.*, 58:1168–1185, 2008. 7, 15, 17

[14] S. Amat and J. Liandrat. On the stability of the PPH nonlinear multiresolution. *Appl. Comput. Harmon. Anal.*, 18:198–206, 2005. 7, 17, 18

[15] J. P. Boyd. *Chebyshev and Fourier spectral methods.* Dover Publications, 2001. 7, 16

[16] C. K. Chui. *An introduction to wavelets.* Academic Press, 1992. 7, 17

[17] V. Perrier and C. Basdevant. La décomposition en ondelettes périodiques, un outil pour l'analyse de champs inhomogènes. Théories et algorithmes. *Rech. Aérosp.*, 3:53–67, 1989. 7, 17

[18] A. L. Rovelstad, R. A. Handler, and P. S. Bernard. The effect of interpolation errors on the Lagrangian analysis of simulated turbulent channel flow. *J. Comput. Phys.*, 110:190–195, 1994. 11, 15, 31

[19] P. K. Yeung and S. B. Pope. An algorithm for tracking fluid particles in numerical simulations of homogeneous turbulence. *J. Comput. Phys.*, 79:373–416, 1988. 15

[20] S. Balachandar and M. R. Maxey. Methods for evaluating fluid velocities in spectral simulations of turbulence. *J. Comput. Phys.*, 83:96–125, 1989. 15

[21] H. Homann, J. Dreher, and R. Grauer. Impact of the floating-point precision and interpolation scheme on the results of DNS of turbulence by pseudo-spectral codes. *Comput. Phys. Commun.*, 177:560–565, 2007. 15

[22] B. L. Sawford and P. K. Yeung. Eulerian acceleration statistics as a discriminator between Lagrangian stochastic models in uniform shear flow. *Phys. Fluids*, 12:2033, 2000. 15

[23] A. La Porta, G. A. Voth, A. M. Crawford, J. Alexander, and E. Bodenschatz. Fluid particle accelerations in fully developed turbulence. *Nature*, 409:1017–1019, 2001. 15

[24] H. Homann, R. Grauer, A. Busse, and W. C. Müller. Lagrangian statistics of Navier-Stokes and MHD turbulence. *J. Plasma Phys.*, 73:821–830, 2007. 15

[25] W. J. T. Bos, B. Kadoch, S. Neffaa, and K. Schneider. Lagrangian dynamics of drift-wave turbulence. *Physica D*, 239:1269–1277, 2010. 15

[26] G. Manfredi and R. O. Dendy. Test-particle transport in strong electrostatic drift turbulence with finite Larmor radius effects. *Phys. Rev. Lett.*, 76:4360–4363, 1996. 16, 36

[27] V. Naulin and K. H. Spatschek. Nonlinear drift-wave structures and their influence on particle transport. *Phys. Rev. E*, 55(5):5883–5893, 1997. 16, 36

[28] V. Naulin, A. H. Nielsen, and J. J. Rasmussen. Dispersion of ideal particles in a two-dimensional model of electrostatic turbulence. *Phys. Plasmas*, 6(12):4575–4585, 1999. 16, 36

[29] R. Basu, T. Jessen, V. Naulin, and J. J. Rasmussen. Turbulent flux and the diffusion of passive tracers in electrostatic turbulence. *Phys. Plasmas*, 10(7):2696–2703, 2003. 16, 36

[30] R. J. McKay, K. G. McClements, A. Thyagaraja, and L. Fletcher. Test-particle simulations of collisional impurity transport in rotating spherical tokamak plasmas. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 50:065017, 2008. 16, 36

[31] M. Crouzeix and A. L. Mignot. *Analyse numérique des équations différentielles*. Masson, 1984. 20

[32] C. Lobry and T. Sari. Équations différentielles à second membre discontinu. In *Contrôle non linéaire et Applications*, 2005. 21

[33] A. F. Filippov. *Differential equations with discontinuous righthand sides*. Kluwer Academic Publishers, 1988. 21

[34] R. J. Goldston and P. H. Rutherford. *Introduction to plasma physics*. Institute of Physics Pub., 1995. 27

[35] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, and C. Ligny. *Physique théorique*, volume 1 : Mécanique. Mir, 1982. 27

[36] L. Casetti, M. Pettini, and E. G. D. Cohen. Geometric approach to Hamiltonian dynamics and statistical mechanics. *Phys. Rep.*, 337:237–341, 2000. 27

[37] R. Marchand. Test-particle simulation of space plasmas. *Commun. Comput. Phys.*, 8(3):471–483, 2010. 36

[38] P. Ghendrih, Y. Sarazin, G. Attuel, S. Benkadda, P. Beyer, G. Falchetto, C. Figarella, X. Garbet, V. Grandgirard, and M. Ottaviani. Theoretical analysis of the influence of external biasing on long range turbulent transport in the scrape-off layer. *Nucl. Fusion*, 43:1013–1022, 2003. 36, 37, 42

[39] D. A. D'Ippolito, J. R. Myra, and S. J. Zweben. Convective transport by intermittent blob-filaments: Comparison of theory and experiment. *Phys. Plasmas*, 18:060501, 2011. 37

Deuxième partie

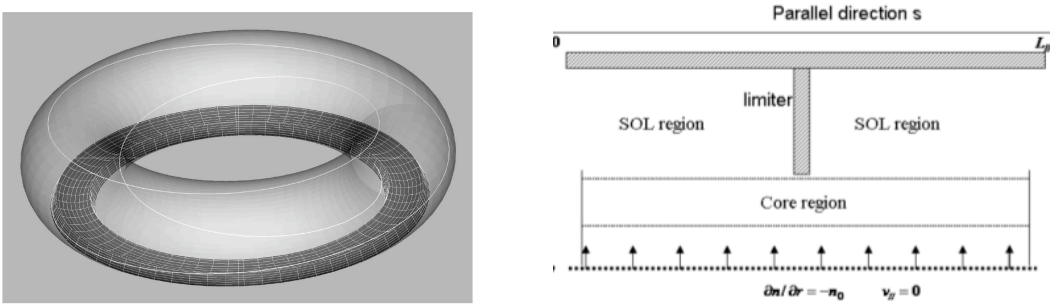
Pénalisation et conditions aux limites de type Neumann/Robin

3 Introduction et motivations

Cette partie est consacrée à la définition et à l'analyse d'une méthode de pénalisation pour la prise en compte de conditions aux limites de type Neumann ou Robin (aussi appelées conditions de Fourier). Cette étude est motivée par la modélisation de l'interaction plasma-paroi dans un tokamak. Dans ce chapitre d'introduction, nous présentons la problématique physique ainsi qu'un aperçu général des méthodes de pénalisation.

3.1 Problématique physique

Une des difficultés de la réalisation de la fusion nucléaire contrôlée dans les appareils de confinement magnétique de type tokamak réside dans l'existence d'interactions entre le plasma et la paroi du tokamak, conduisant à une perte de confinement du plasma. Dans ce contexte, la modélisation et la simulation numérique de la région de bord du tokamak constituent un outil précieux pour la prédiction et l'étude de stratégies de contrôle des interactions plasma-paroi. Cette thématique a été initiée au M2P2 en 2007 en collaboration avec l'Institut de Recherche sur la Fusion par confinement Magnétique de Cadarache. Un projet ANR (ESPOIR http://sites.google.com/site/anrespoir/) a permis de mener de nombreuses études dans ce cadre et de développer plusieurs codes de simulation numérique. Les fruits du travail que nous présentons dans cette partie sont utilisés dans certains de ces codes.



(a) Géométrie tokamak

(b) Géométrie bidimensionnelle

FIG. 3.1.1: Représentations d'un tokamak avec limiteur toroïdal. (a) La ligne blanche représente une ligne de champ magnétique. (b) Géométrie bidimensionnelle de la région de bord, obtenue en déroulant la ligne de champ.

La figure 3.1.1a représente la géométrie d'un tokamak, qui est un appareil destiné au confinement d'un plasma d'hydrogène à l'intérieur d'une chambre torique à l'aide de champs magnétiques. Dans cette configuration, les particules se déplacent le long des lignes de champ magnétique. Au centre du tokamak, ces lignes de champ sont fermées. Nous nous intéressons ici à la région de bord du tokamak, appelée Scrape-Off Layer (SOL), dans laquelle les lignes de champ sont ouvertes et interceptent des obstacles solides. C'est

cette région de bord qui est le siège des interactions plasma-paroi. Une représentation bidimensionnelle de la géométrie, obtenue en "déroulant" les lignes de champ, est donnée sur la Fig. 3.1.1b. Voir [1] pour plus de détails.

En sélectionnant une seule ligne de champ dans la région de bord, on peut considérer en négligeant la courbure, la géométrie unidimensionnelle adimensionnée représentée sur la Fig. 3.1.2 : le domaine fluide $\omega =]0, x_l[\cup]x_r, 1[$ est en contact avec un obstacle placé en $]x_l, x_r[$ centré en $x = 0.5$ avec $x_l = 0.5(1-d)$ et $x_r = 0.5(1+d)$, d étant la taille de l'obstacle.

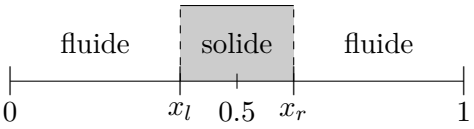


FIG. 3.1.2: Schéma de la géométrie étudiée. Le plasma (domaine fluide) est en contact avec un obstacle (domaine solide).

Dans le cadre d'une description fluide du plasma, un modèle simplifié du plasma de bord dans la direction parallèle à une ligne de champ a été dérivé dans [2]. Il est donné par le système :

$$\begin{cases} \partial_t n + \partial_x \Gamma = S_n \\ \partial_t \Gamma + \partial_x \Big(\dfrac{\Gamma^2}{n} + n \Big(\dfrac{T_i + T_e}{m_i} \Big) \Big) = S_\Gamma \\ \partial_t \Big(\dfrac{3}{2} n T_i \Big) + \partial_x \Big(\dfrac{5}{2} \Gamma T_i \Big) + \dfrac{\Gamma}{n} \partial_x (n T_i) = \partial_x (\kappa_{0i} T_i^{5/2} \partial_x T_i) + S_i \\ \partial_t \Big(\dfrac{3}{2} n T_e \Big) + \partial_x \Big(\dfrac{5}{2} \Gamma T_e \Big) + \dfrac{\Gamma}{n} \partial_x (n T_e) = \partial_x (\kappa_{0e} T_e^{5/2} \partial_x T_e) + S_e, \end{cases} \tag{3.1.1}$$

où n est la densité du plasma, Γ est la quantité de mouvement dans la direction parallèle et T_i (resp. T_e) est la température ionique (resp. électronique). La variable x décrit la direction suivant la ligne de champ, m_i est la masse des ions, κ_{0i} et κ_{0e} sont des coefficients de diffusion de chaleur dans cette direction. Enfin, les termes sources S_n, S_Γ, S_i et S_e représentent des flux de matière ou de chaleur dans la direction perpendiculaire à la ligne de champ par transport diffusif ou convectif.

Ce système d'équations est complété par des conditions aux limites. En considérant la géométrie de la Fig. 3.1.2, toutes les inconnues du système sont périodiques en $x = 0$ et $x = 1$. En revanche, les conditions diffèrent sur le bord de l'obstacle i.e. en $x = x_l$ et $x = x_r$. Toujours d'après [2] :

– Pour n et Γ, on impose des conditions dites de Bohm [3] :

$$\begin{cases} \dfrac{\Gamma}{n}(x_l) = \sqrt{\dfrac{T_i + T_e}{m_i}}, \quad \dfrac{\Gamma}{n}(x_r) = -\sqrt{\dfrac{T_i + T_e}{m_i}} \\ \partial_x^2 n(x_l) = \partial_x^2 n(x_r) = 0. \end{cases} \tag{3.1.2}$$

– Pour les températures T_i et T_e, on a des conditions de type Robin en $x = x_l$ et $x = x_r$:

$$-\kappa_{0i,e} T_{i,e}^{5/2} \partial_x T_{i,e} + \Big(\frac{5}{2} - \gamma_{i,e} \Big) \Gamma T_{i,e} = 0. \tag{3.1.3}$$

Les valeurs de $\gamma_{i,e}$ couramment utilisées sont $\gamma_i = \frac{5}{2}$ et $\gamma_e = \frac{9}{2}$ [3], ce qui conduit aux conditions suivantes sur le bord de l'obstacle :

$$\begin{cases} \partial_x T_i = 0 & \text{(conditions de Neumann homogènes)} \\ -\kappa_{0e} T_e^{5/2} \partial_x T_e = 2\Gamma T_e & \text{(conditions de type Robin générales).} \end{cases} \tag{3.1.4}$$

Dans [4], une méthode de pénalisation volumique du système (3.1.1)-(3.1.2) se limitant à n et Γ dans le cas isotherme, a été proposée. Les conditions aux limites associées ont été imposées par pénalisation de conditions aux limites de type Dirichlet, laquelle a permis de retrouver automatiquement les conditions de Bohm. L'avantage de l'utilisation d'une méthode de pénalisation pour le traitement des conditions aux limites est de permettre une résolution numérique des équations dans un domaine sans obstacle, permettant de retrouver dans le cas présent une géométrie complètement périodique. Plus de détails sur les méthodes de pénalisation sont donnés dans la Section 3.2.

Dans ce travail, nous nous focalisons sur les équations du système (3.1.1) portant sur les températures. Les équations des températures sont de type parabolique et les conditions aux limites associées sont de type Neumann/Robin. L'objectif est de définir une méthode de pénalisation pour ce type d'équations et de conditions aux limites, de faire son analyse mathématique et d'étudier sa convergence numérique.

Dans ce but, nous nous intéressons successivement aux problèmes modèles suivants, posés dans la géométrie représentée sur la Fig. 3.1.2 avec des conditions aux limites de Neumann/Robin sur le bord de l'obstacle $\{x_l, x_r\}$ et des conditions périodiques en $\{0, 1\}$:

– Problème elliptique : équation de réaction-diffusion linéaire (Chapitre 4)

$$\begin{cases} -u'' + u = f \quad \text{dans }]0, x_l[\cup]x_r, 1[\\ u'(x_l) + \alpha u(x_l) = g(x_l), \ -u'(x_r) + \alpha u(x_r) = g(x_r) \\ \text{conditions périodiques : } u(0) = u(1), \ u'(0) = u'(1). \end{cases}$$

– Problème parabolique : équation de la chaleur linéaire (Chapitre 5)

$$\begin{cases} \partial_t u - \partial_x^2 u = f & x \in]0, x_l[\cup]x_r, 1[, \ t \in]0, T[\\ \partial_x u(x_l, t) + \alpha u(x_l, t) = g(x_l, t) & t \in]0, T[\\ -\partial_x u(x_r, t) + \alpha u(x_r, t) = g(x_r, t) & t \in]0, T[\\ u(0, t) = u(1, t), \ \partial_x u(0, t) = \partial_x u(1, t) & t \in]0, T[\\ u(x, 0) = u_0(x) & x \in]0, x_l[\cup]x_r, 1[. \end{cases}$$

– Problème parabolique non linéaire : équation d'advection-diffusion (Chapitre 6)

$$\begin{cases} \partial_t u + \partial_x (v(x) u) = \nu \partial_x (u^{5/2} \partial_x u) + f & x \in]0, x_l[\cup]x_r, 1[, \ t \in]0, T[\\ u^{5/2} \partial_x u(x_l, t) + \alpha u(x_l, t) = g(x_l, t) & t \in]0, T[\\ -u^{5/2} \partial_x u(x_r, t) + \alpha u(x_r, t) = g(x_r, t) & t \in]0, T[\\ u(0, t) = u(1, t), \ \partial_x u(0, t) = \partial_x u(1, t) & t \in]0, T[\\ u(x, 0) = u_0(x) & x \in]0, x_l[\cup]x_r, 1[. \end{cases}$$

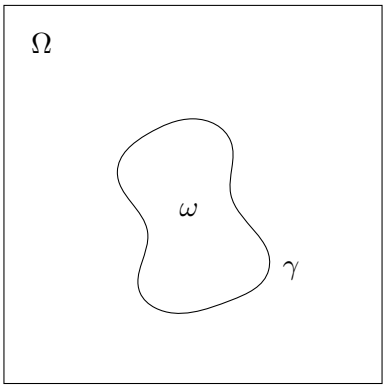


FIG. 3.2.1: Schéma des méthodes de domaines fictifs. Le domaine initial ω, de géométrie complexe, est plongé dans un domaine plus grand Ω mais plus simple.

3.2 Méthodes de domaines fictifs et méthodes de pénalisation

La simulation numérique du plasma de bord requiert la prise en compte de géométries complexes : parois du tokamak, limiteur, antennes de chauffage par exemple. Des méthodes basées sur des changements de coordonnées ne sont pas envisageables et le développement d'un maillage adapté à la géométrie complète serait fastidieux. D'autre part, les conditions aux limites qui doivent être imposées aux frontières des obstacles physiques ne sont pas classiques, densité nulle ou conditions de Robin pour les températures par exemple, et leur prise en compte dans une méthode numérique n'est généralement pas facile.

Pour mener à bien ces deux objectifs, nous nous sommes tournés vers les méthodes de domaines fictifs. Le principe général consiste à étendre le problème initial posé dans une géométrie complexe (ω sur la Fig. 3.2.1) à un ouvert simple (Ω sur la Fig. 3.2.1). Les avantages sont alors multiples. La discrétisation de cet ouvert Ω peut être faite à partir d'un maillage structuré, ce qui rend possible l'utilisation de méthodes numériques robustes et efficaces. Les conditions aux limites au bord du domaine Ω sont choisies de type homogène ou périodiques par exemple et ne présentent pas de difficultés quant à leur discrétisation. Toute la difficulté réside dans la définition du problème à résoudre dans Ω pour que sa solution approche ou coïncide avec celle du problème initial dans ω avec conditions aux limites sur γ.

L'approche généralement utilisée consiste à introduire une formulation modifiée du problème, faisant apparaître de nouvelles inconnues définies comme des multiplicateurs de Lagrange sur la frontière γ par exemple [5, 6]. L'approximation numérique de cette formulation est souvent délicate car elle nécessite, entre autres, une représentation précise de la frontière en vue de la discrétisation de certaines de ces nouvelles variables sur cette frontière.

Nous nous sommes intéressés aux méthodes de domaines fictifs de type pénalisation. Ces méthodes, généralement très simples à mettre en œuvre, ont été introduites par Arquis et Caltagirone [7] dans les années 80. Elles connaissent depuis un succès grandissant et ont été appliquées à de nombreux problèmes issus de la mécanique des fluides principalement [8–21].

Le problème initial — équations aux dérivées partielles dans ω + conditions aux limites sur γ — est remplacé par un système d'équations défini dans Ω. Les conditions aux limites sur γ sont prises en compte par l'ajout de termes sources ne vivant que sur γ (pénalisation surfacique) ou dans $\Omega \setminus \bar{\omega}$ (pénalisation volumique). Dans le cas des équations de Navier-Stokes incompressibles avec condition d'adhérence à la paroi par exemple, le système initial

est modifié par l'ajout d'un terme supplémentaire de la forme $\frac{1}{\eta}\chi_{\Omega\setminus\bar{\omega}}\overrightarrow{U}$ où $\chi_{\Omega\setminus\bar{\omega}}$ est la fonction caractéristique de l'obstacle (1 à l'intérieur, 0 à l'extérieur) et $\overrightarrow{U}$ représente le vecteur vitesse. Le paramètre de pénalisation η étant pris très petit devant 1 en pratique, le terme de forçage devient prépondérant dans l'obstacle devant les autres termes du système et conduit à $\overrightarrow{U} = 0$, qui est la condition de vitesse nulle à la paroi généralement utilisée. Le système pénalisé est alors discrétisé sur Ω et des méthodes numériques performantes de type pseudospectral [11], différences/volumes finis [8, 22, 23] ou encore ondelettes [12, 16, 24] se révèlent très efficaces quant à l'approximation de la solution. Des obstacles mobiles peuvent même être envisagés [17–20] sans remaillage en modifiant la fonction caractéristique χ.

La première question qui se pose quant à ces méthodes de pénalisation est celle de la convergence de la solution du système pénalisé lorsque $\eta \to 0$ vers la solution du problème initial. Pour des conditions aux limites de type Dirichlet, plusieurs résultats théoriques ont été établis. Le cas d'une équation parabolique a été traité dans [11], celui d'équations hyperboliques dans [23, 25–27]. Pour les équations de Navier-Stokes incompressibles, la convergence a été démontrée initialement dans [8]. L'erreur théorique est majorée par $\eta^{1/4}$ dans le domaine fluide et $\eta^{3/4}$ dans le solide. Généralement, les estimations d'erreurs théoriques ne sont pas optimales (surtout pour les équations de Navier-Stokes) et la convergence numérique observée est meilleure. D'autre part, la méthode de pénalisation introduit une couche limite autour de l'obstacle de largeur proportionnelle à $\sqrt{\eta}$ [11, 13]. Si aucun point de calcul n'est présent dans cette couche limite, l'erreur entre les solutions exacte et numérique est de l'ordre de η, sinon elle se comporte comme $\sqrt{\eta}$.

Dans la première partie du projet ANR ESPOIR, la modélisation du plasma de bord était obtenue à partir d'un système hyperbolique régissant l'évolution de la densité et de la quantité de mouvement sur une ligne de champ magnétique. Ce système a été pénalisé pour imposer des conditions de Dirichlet (densité nulle et quantité de mouvement imposée) sur la frontière de l'obstacle [4]. Bien qu'aucune estimation théorique n'ait été réalisée, les résultats numériques font également état d'une convergence proportionnelle à η. Une modification de cette méthode a été apportée dans [28, 29] pour éliminer la présence de la couche limite artificielle.

Comme évoqué dans la section précédente, l'enrichissement du modèle physique passe par la prise en compte de l'évolution des températures ionique et électronique et de leurs conditions aux limites associées. Celles-ci sont de type Neumann et Robin respectivement et à notre connaissance, les seules méthodes de pénalisation pour ce type de conditions ont été proposées dans [18,30–32]. Dans [30–32], des conditions de Robin sont obtenues en modifiant les flux dans un schéma de volumes finis et l'extension à d'autres types de méthodes numériques semble complexe. Dans [18], seules des conditions de Neumann homogènes sont envisagées, en modifiant par pénalisation la viscosité du fluide dans l'obstacle. Il n'est pas possible avec cette technique d'envisager des conditions non homogènes ou de type Robin.

Nous proposons ici une méthode qui permette d'imposer des conditions de Neumann ou de Robin indépendamment du type de schéma numérique utilisé. Des résultats de convergence théoriques sont établis pour des équations elliptiques puis paraboliques en dimension 1. Les résultats numériques obtenus en utilisant un schéma aux différences finies confirment ces estimations. Cette méthode est ensuite appliquée à une équation d'advection-diffusion. Elle est également utilisée maintenant dans le code SolEdge2D qui permet la simulation du plasma de bord dans des géométries complexes et qui a été développé dans le cadre de la thèse d'H. Bufferand [33].

3.3 Les différentes géométries considérées

Dans cette seconde partie, le problème physique fait référence à un problème, elliptique ou parabolique, posé en espace dans l'ouvert $]0, x_l[\cup]x_r, 1[$ (voir la géométrie représentée sur la Fig. 3.1.2) avec des conditions aux limites de Neumann ou Robin sur le bord de l'obstacle $\{x_l, x_r\}$ et des conditions périodiques en $x = 0$ et $x = 1$.

Par périodicité, on peut considérer de façon équivalente que le problème est posé dans l'intervalle $]x_r-1, x_l[$ avec des conditions aux limites de Neumann ou Robin sur le bord $\{x_r-1, x_l\}$. Cela est obtenu en identifiant $]x_r, 1[$ à $]x_r-1, 0[$ comme représenté sur la Fig. 3.3.1.

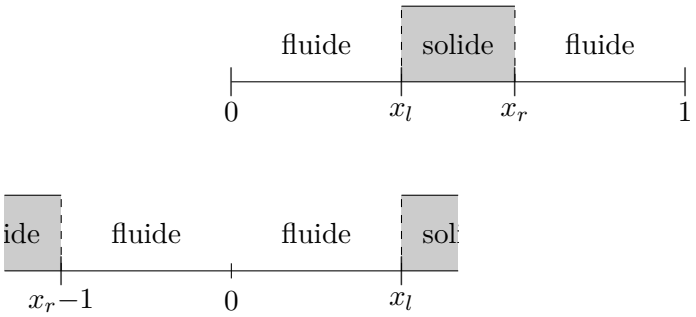


FIG. 3.3.1: Équivalence entre les domaines $]0, x_l[\cup]x_r, 1[$ et $]x_r-1, x_l[$ par périodicité.

On peut alors se ramener sur l'intervalle $]0, 1[$ par dilatation et translation en effectuant le changement de variable $X = \frac{x-(x_r-1)}{x_l-(x_r-1)}$ pour $x \in]x_r-1, x_l[$ (voir la Fig. 3.3.2 pour une représentation schématique). Le problème vérifié dans cette nouvelle géométrie est du même type que le problème physique, mais avec des coefficients modifiés par le changement de variable. Les conditions de Neumann ou Robin sont alors imposées aux bords 0 et 1.

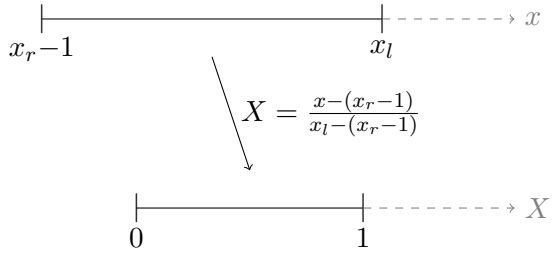


FIG. 3.3.2: Passage du domaine $]x_r-1, x_l[$ au domaine $]0, 1[$ par dilatation et translation.

En vue des applications, la méthode de pénalisation que nous proposons sera testée numériquement dans le domaine physique (Fig. 3.1.2). Dans ce cas, le problème physique est posé dans $\omega =]0, x_l[\cup]x_r, 1[$ et le domaine fictif est $\Omega =]0, 1[$:

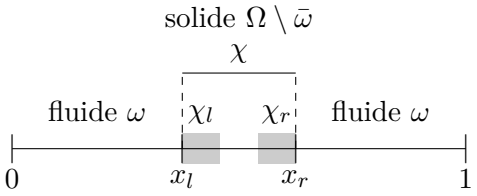


FIG. 3.3.3: Schéma des domaines considérés dans l'étude numérique de la pénalisation. $\omega =]0, x_l[\cup]x_r, 1[$ est le domaine original et $\Omega =]0, 1[$ est le domaine fictif.

En ce qui concerne l'étude théorique de cette méthode, par souci de simplification, le problème initial sera posé dans $\omega =]0, 1[$ et le domaine fictif sera défini par $\Omega =]0, 2[$:

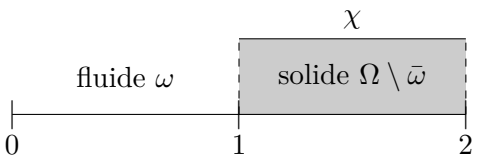


FIG. 3.3.4: Schéma des domaines considérés dans l'étude théorique de la pénalisation. $\omega =]0, 1[$ est le domaine original et $\Omega =]0, 2[$ est le domaine fictif.

Nous aurons besoin de calculer des solutions exactes pour valider les résultats numériques. Elles seront calculées sur le domaine $]0, 1[$ avant de remonter au problème physique suivant les correspondances indiquées sur les Fig. 3.3.1 et 3.3.2. Notons enfin que l'on considère l'obstacle $]x_l, x_r[$ centré en $x = 0.5$, i.e. $x_l + x_r = 1$. Ainsi on peut exprimer les correspondances uniquement en fonction de x_l : $]x_r - 1, x_l[=]-x_l, x_l[$ et $X = \frac{x}{2x_l} + \frac{1}{2}$ pour $x \in]-x_l, x_l[$.

4 Problème elliptique

L'objet de ce chapitre est l'étude d'une méthode de pénalisation pour des conditions aux limites de type Neumann ou Robin dans le cas d'un problème elliptique modèle.

Après la définition du problème, la méthode de pénalisation est présentée (Section 4.1) puis analysée d'un point de vue théorique (Section 4.2). Des résultats de convergence, d'estimation d'erreur et de stabilité sont obtenus. Dans la partie suivante, les équations issues de la méthode de pénalisation sont discrétisées par différences finies et la méthode numérique qui en découle est analysée théoriquement (Section 4.4). Cette méthode est implémentée et testée dans la Section 4.5. Les résultats numériques sont comparés aux estimations théoriques obtenues précédemment, pour différents choix de conditions aux limites.

4.1 Définition du problème

Un problème modèle d'équations aux dérivées partielles elliptiques avec des conditions aux limites de Robin est l'équation de réaction-diffusion linéaire suivante :

$$\begin{cases} -\Delta u + u = f & \text{dans } \omega \\ \dfrac{\partial u}{\partial n} + \alpha u = g & \text{sur } \partial\omega, \end{cases}$$

où ω est un ouvert borné régulier de $\mathbb{R}^N$, n est la normale unitaire sortante au bord $\partial\omega$, $f \in L^2(\omega)$, $g \in L^2(\partial\omega)$ et $\alpha \geq 0$ sont donnés. Le cas $\alpha = 0$ correspond à des conditions aux limites de Neumann. Le théorème de Lax-Milgram [34, 35] s'applique à ce problème aux limites et fournit l'existence et l'unicité de la solution $u \in H^1(\omega)$ de sa formulation variationnelle :

$$\left| \begin{array}{l} \text{Trouver } u \in H^1(\omega) \text{ tel que } \forall v \in H^1(\omega) \\ \displaystyle\int_\omega (\nabla u \cdot \nabla v + uv)\, dx + \alpha \int_{\partial\omega} uv\, d\sigma = \int_\omega fv\, dx + \int_{\partial\omega} gv\, d\sigma. \end{array} \right.$$

Dans le cas particulier $N = 1$ et $\omega =]0, 1[$, le problème s'écrit

$$\begin{cases} -u'' + u = f \quad \text{dans }]0, 1[\\ -u'(0) + \alpha u(0) = g(0),\ u'(1) + \alpha u(1) = g(1). \end{cases} \tag{4.1.1}$$

L'unique solution $u \in H^1(]0, 1[)$ de la formulation variationnelle (4.1.2) de (4.1.1) :

$$\left| \begin{array}{l} \text{Trouver } u \in H^1(]0, 1[) \text{ tel que } \forall v \in H^1(]0, 1[) \\ \displaystyle\int_0^1 (u'v' + uv)\, dx + \alpha\big(u(0)v(0) + u(1)v(1)\big) = \int_0^1 fv\, dx + \big(g(0)v(0) + g(1)v(1)\big), \end{array} \right. \tag{4.1.2}$$

appartient en fait à l'espace $H^2(]0, 1[)$ puisque $u'' = u - f \in L^2(]0, 1[)$. Il s'ensuit en utilisant l'injection de Sobolev $H^2(]0, 1[) \hookrightarrow C^1([0, 1])$ que $u \in C^1([0, 1])$ et si $f \in C^0([0, 1])$ que $u \in C^2([0, 1])$.

Pour définir un problème pénalisé associé au problème (4.1.1), on plonge le domaine $\omega =]0,1[$ dans un domaine plus grand $\Omega =]0,2[$ comme représenté sur la Fig. 3.3.4. Ω joue le rôle du domaine fictif. En notant χ la fonction caractéristique (indicatrice) de $\Omega \setminus \bar{\omega} =]1,2[$ et en introduisant un paramètre réel $\eta > 0$, le problème pénalisé que nous proposons est le suivant :

$$\begin{cases} -u_\eta'' + u_\eta + \dfrac{\chi}{\eta}(u_\eta' + \alpha u_\eta - g(1)) = (1-\chi)f \quad \text{dans }]0,2[\\ -u_\eta'(0) + \alpha u_\eta(0) = g(0),\ u_\eta'(2) + \alpha u_\eta(2) = g(1). \end{cases} \tag{4.1.3}$$

Ce problème pénalisé permet d'imposer la condition limite en $x = 1$ par pénalisation, les conditions aux limites en 0 et en 2 étant imposées classiquement. Formellement, ce choix de pénalisation est dicté par les remarques suivantes :

- Pour $x \in]0,1[$, $\chi(x) = 0$ et on retrouve l'équation du problème original (4.1.1) avec la condition de Robin en $x = 0$ inchangée.
- Pour $x \in]1,2[$, $\chi(x) = 1$ et prendre une valeur très petite du paramètre η implique que le terme dominant dans l'équation du problème pénalisé (4.1.3) est $\frac{1}{\eta}(u_\eta' + \alpha u_\eta - g(1))$ ce qui impose $u_\eta' + \alpha u_\eta - g(1) \approx 0$. En supposant la solution C^1 en $x = 1$, on retrouve alors la condition de Robin en $x = 1$ du problème original (4.1.1).

Dans la section suivante, on prouve que le problème pénalisé (4.1.3) ainsi défini est bien posé sous sa forme faible :

$$\begin{array}{l} \text{Trouver } u_\eta \in H^1(]0,2[) \text{ tel que } \forall v \in H^1(]0,2[) \\ \displaystyle\int_0^2 \Big(u_\eta' v' + u_\eta v + \frac{\chi}{\eta}(u_\eta' + \alpha u_\eta)v\Big)\,dx + \alpha(u_\eta(0)v(0) + u_\eta(2)v(2)) \\ \qquad\qquad = \displaystyle\int_0^2 \Big((1-\chi)fv + \frac{\chi}{\eta}g(1)v\Big)\,dx + (g(0)v(0) + g(1)v(2)), \end{array} \tag{4.1.4}$$

et que son unique solution u_η converge, quand η tend vers 0, vers une fonction $\bar{u}$ dont la restriction à $]0,1[$ coïncide avec u la solution du problème original (4.1.1).

4.2 Résultats théoriques

4.2.1 Existence et unicité

Nous commençons par établir l'existence et l'unicité de la solution du problème pénalisé. L'hypothèse de coercivité de la forme bilinéaire associée à la formulation faible (4.1.4) n'étant pas satisfaite pour tout $\eta > 0$, on ne peut pas appliquer le théorème de Lax-Milgram pour montrer l'existence et l'unicité de la solution u_η.

Nous allons démontrer le résultat suivant :

Proposition 4.2.1 (Existence et unicité)**.**

Pour tout $\eta > 0$, il existe une unique solution $u_\eta \in H^1(]0,2[)$ de la formulation faible (4.1.4) du problème pénalisé (4.1.3). De plus, $u_\eta \in C^1([0,2])$.

Démonstration. On commence par établir le résultat de régularité. Si $u_\eta \in H^1(]0,2[)$ est solution de la formulation faible (4.1.4) alors $u_\eta \in H^2(]0,2[)$ puisque $u''_\eta = u_\eta + \frac{\chi}{\eta}(u'_\eta + \alpha u_\eta - g(1)) - (1-\chi)f \in L^2(]0,2[)$, la formulation variationnelle impliquant que l'équation est vérifiée au sens des distributions. Il s'ensuit en utilisant encore l'injection de Sobolev $H^2(]0,2[) \hookrightarrow C^1([0,2])$ que $u_\eta \in C^1([0,2])$. On cherche donc une solution de classe C^1.

Si $u_\eta \in C^1([0,2])$ est une solution faible de (4.1.3) alors en examinant les équations vérifiées dans les domaines $]0,1[$ et $]1,2[$ respectivement, u_η a pour expression :

$$u_\eta(x) = \begin{cases} \lambda_1 e^x + \mu_1 e^{-x} + u(x) & \text{si } x \in]0,1[\\ \lambda_2 e^{r_1 x} + \mu_2 e^{r_2 x} + \dfrac{g(1)}{\eta+\alpha} & \text{si } x \in]1,2[, \end{cases} \tag{4.2.1}$$

avec

$$r_1 = \frac{1}{2}\Big(\frac{1}{\eta} + \sqrt{\frac{1}{\eta^2} + 4\Big(1+\frac{\alpha}{\eta}\Big)}\Big) \quad \text{et} \quad r_1 r_2 = -\Big(1+\frac{\alpha}{\eta}\Big).$$

En prenant en compte les conditions aux limites de Robin en $x=0$ et $x=2$ ainsi que le caractère C^1 de u_η en $x=1$, on obtient le système linéaire suivant pour les constantes λ_1, μ_1, λ_2 et μ_2 :

$$\begin{pmatrix} \alpha-1 & \alpha+1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (\alpha+r_1)e^{2r_1} & (\alpha+r_2)e^{2r_2} \\ e & e^{-1} & -e^{r_1} & -e^{r_2} \\ e & -e^{-1} & -r_1 e^{r_1} & -r_2 e^{r_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \mu_1 \\ \lambda_2 \\ \mu_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ g(1) - \alpha\frac{g(1)}{\eta+\alpha} \\ \frac{g(1)}{\eta+\alpha} - u(1) \\ \alpha u(1) - g(1) \end{pmatrix}. \tag{4.2.2}$$

La matrice M du système vérifie

$$\det(M) = e^{(-1+r_1+r_2)}(A + \alpha B + \alpha^2 C),$$

avec $\alpha \geq 0$ et

$$\begin{aligned} A &= (e^2-1)(r_1 e^{r_1} - r_2 e^{r_2}) + (1+e^2) r_1 r_2 (e^{r_2} - e^{r_1}), \\ B &= (1+e^2)(e^{r_1}+e^{r_2})(r_1 - r_2) + (e^2-1)(r_1 r_2 - 1)(e^{r_2} - e^{r_1}), \\ C &= (e^2-1)(r_1 e^{r_2} - r_2 e^{r_1}) + (1+e^2)(e^{r_1} - e^{r_2}). \end{aligned}$$

Comme $r_1 > 0$ et $r_2 = -(1+\frac{\alpha}{\eta})/r_1 < 0$, on a $r_1 r_2 < 0$, $r_1 > r_2$ et $e^{r_1} > e^{r_2}$. On en déduit $A > 0$, $B > 0$ et $C > 0$ d'où $\det(M) > 0$.

Le système (4.2.2) admet donc une unique solution $(\lambda_1, \mu_1, \lambda_2, \mu_2)^T$, ce qui prouve l'existence et l'unicité de la solution u_η du problème pénalisé (4.1.3). □

4.2.2 Convergence

On s'intéresse ici à la limite de u_η lorsque le paramètre de pénalisation η tend vers 0. Celle-ci est donnée par la proposition suivante :

Proposition 4.2.2 (Convergence)**.**

La solution u_η du problème pénalisé (4.1.3) converge simplement, quand $\eta \to 0^+$, vers $\bar{u}$ avec

- $\bar{u}_{|]0,1[} = u$ solution du problème original (4.1.1),
- $\bar{u}_{|]1,2[} = v$ solution de $\begin{cases} v' + \alpha v = g(1) & \text{dans }]1,2[\\ v(1) = u(1). \end{cases}$

Autrement dit,

$$\lim_{\eta\to 0^+} u_\eta(x) = \begin{cases} u(x) & \text{si } x \in [0,1] \\ \dfrac{(\alpha u(1) - g(1))e^{\alpha}}{\alpha} e^{-\alpha x} + \dfrac{g(1)}{\alpha} & \text{si } x \in [1,2] \text{ et } \alpha > 0 \\ g(1)x + (u(1) - g(1)) & \text{si } x \in [1,2] \text{ et } \alpha = 0. \end{cases} \tag{4.2.3}$$

Démonstration. Comme $r_1 = \frac{1}{2\eta}(1 + \sqrt{1 + 4(\eta^2 + \alpha\eta)})$ et $r_2 = -(1 + \frac{\alpha}{\eta})/r_1$, on a

$$\lim_{\eta\to 0^+} r_1 = +\infty \left(r_1 \sim \frac{1}{\eta}\right) \quad \text{et} \quad \lim_{\eta\to 0^+} r_2 = -\alpha.$$

Ainsi certains coefficients de la matrice M du système précédent (4.2.2) divergent vers l'infini quand η tend vers 0. De même, le troisième élément du second membre du système diverge vers l'infini pour $\alpha = 0$ et $g(1) \neq 0$. Pour pouvoir passer à la limite et prouver la convergence de u_η, on écrit le système vérifié par $(\lambda_1, \mu_1, \lambda_2^*, \mu_2^*)^T$ avec

$$u_\eta(x) = \begin{cases} \lambda_1 e^x + \mu_1 e^{-x} + u(x) & \text{si } x \in [0,1] \\ \lambda_2^* \dfrac{1}{r_1 e^{2r_1}} e^{r_1 x} + \mu_2^* e^{r_2 x} - \dfrac{g(1)}{\eta+\alpha} e^{r_2 x} + \dfrac{g(1)}{\eta+\alpha} & \text{si } x \in [1,2], \end{cases} \tag{4.2.4}$$

(on a posé $\lambda_2^* = \lambda_2 r_1 e^{2r_1}$ et $\mu_2^* = \mu_2 + \frac{g(1)}{\eta+\alpha}$) de sorte que pour $x \in [1,2]$,

$$\begin{aligned} &\frac{1}{r_1 e^{2r_1}} e^{r_1 x} = \frac{1}{r_1} e^{r_1(x-2)} \xrightarrow[\eta\to 0^+]{} 0, \\ &\frac{g(1)}{\eta+\alpha} - \frac{g(1)}{\eta+\alpha} e^{r_2 x} \xrightarrow[\eta\to 0^+]{} g(1)\frac{1 - e^{-\alpha x}}{\alpha} && \text{si } \alpha > 0, \\ &\frac{g(1)}{\eta+\alpha} - \frac{g(1)}{\eta+\alpha} e^{r_2 x} = g(1)\frac{e^{r_2 x} - 1}{r_2}\frac{r_2}{-\eta} \xrightarrow[\eta\to 0^+]{} g(1)x && \text{si } \alpha = 0. \end{aligned}$$

Le nouveau système s'écrit

$$\begin{pmatrix} \alpha - 1 & \alpha + 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\alpha}{r_1} + 1 & (\alpha + r_2)e^{2r_2} \\ e & e^{-1} & -\frac{1}{r_1 e^{r_1}} & -e^{r_2} \\ e & -e^{-1} & -\frac{1}{e^{r_1}} & -r_2 e^{r_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \mu_1 \\ \lambda_2^* \\ \mu_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ g(1) - \alpha\frac{g(1)}{\eta+\alpha} + \frac{g(1)}{\eta+\alpha} r_2 e^{2r_2} + \alpha\frac{g(1)}{\eta+\alpha} e^{2r_2} \\ \frac{g(1)}{\eta+\alpha} - u(1) - \frac{g(1)}{\eta+\alpha} e^{r_2} \\ \alpha u(1) - g(1) - \frac{g(1)}{\eta+\alpha} r_2 e^{r_2} \end{pmatrix}, \tag{4.2.5}$$

que l'on note $A_\eta X_\eta = b_\eta$.

La matrice A_η est inversible car $\det(A_\eta) = \frac{1}{r_1 e^{2r_1}} \det(M) \neq 0$. De plus $A_\eta \xrightarrow[\eta\to 0^+]{} A$ avec

$$A = \begin{pmatrix} \alpha - 1 & \alpha + 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ e & e^{-1} & 0 & -e^{-\alpha} \\ e & -e^{-1} & 0 & \alpha e^{-\alpha} \end{pmatrix},$$

et $b_\eta \xrightarrow[\eta\to 0^+]{} b$ avec

$$b = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{g(1)}{\alpha} - u(1) - \frac{g(1)}{\alpha} e^{-\alpha} \\ \alpha u(1) - g(1) + g(1) e^{-\alpha} \end{pmatrix} \text{ si } \alpha > 0 \qquad b = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ g(1) - u(1) \\ 0 \end{pmatrix} \text{ si } \alpha = 0.$$

A est inversible car $\det(A) = \frac{(e-e^{-1}) + 2\alpha(e+e^{-1}) + \alpha^2(e-e^{-1})}{e^\alpha} > 0$.

On en déduit, en utilisant $A_\eta^{-1} \xrightarrow[\eta\to 0^+]{} A^{-1}$ par continuité de la fonction $M \mapsto M^{-1}$ définie sur $GL_n(\mathbb{R})$, que $X_\eta = A_\eta^{-1} b_\eta \xrightarrow[\eta\to 0^+]{} A^{-1} b = X$. On en déduit :

$$X = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{(\alpha u(1) - g(1) + g(1) e^{-\alpha}) e^\alpha}{\alpha} \end{pmatrix} \text{ si } \alpha > 0 \qquad X = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ u(1) - g(1) \end{pmatrix} \text{ si } \alpha = 0.$$

Finalement, on obtient le résultat escompté en passant à la limite dans (4.2.4). □

Remarque 4.2.3. Le signe positif devant le terme de pénalisation dans le problème pénalisé (4.1.3) est un point important : le problème pénalisé avec le signe opposé admet aussi une unique solution u_η pour tout $\eta > 0$, mais cette solution ne converge pas en général vers la solution u de (4.1.1) dans $[0, 1]$. Le signe détermine le sens d'advection $(\frac{\chi}{\eta} u'_\eta)$, le signe positif signifie donc une convection vers la droite de sorte que ce qui se passe dans le domaine $[1, 2]$ n'influence pas le comportement de la solution dans $[0, 1]$ lorsque η tend vers 0. Pour la pénalisation avec un signe négatif devant le terme de pénalisation :

$$\begin{cases} -u''_\eta + u_\eta - \dfrac{\chi}{\eta}(u'_\eta + \alpha u_\eta - g(1)) = (1 - \chi) f \quad \text{dans }]0, 2[\\ -u'_\eta(0) + \alpha u_\eta(0) = g(0),\ u'_\eta(2) + \alpha u_\eta(2) = g(1), \end{cases} \tag{4.2.6}$$

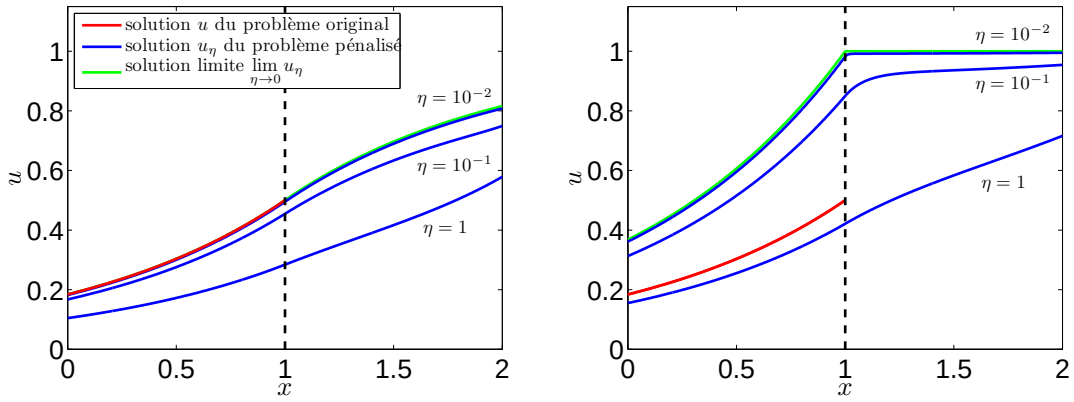
l'existence et l'unicité de la solution se traite comme précédemment. En effet, on obtient la même expression (4.2.1) pour la solution u_η avec ici

$$r_2 = -\frac{1}{2}\Big(\frac{1}{\eta} + \sqrt{\frac{1}{\eta^2} + 4\Big(1 + \frac{\alpha}{\eta}\Big)}\Big) < 0 \quad \text{et} \quad r_1 = -\Big(1 + \frac{\alpha}{\eta}\Big)/r_2 > 0.$$

On est donc conduit au même système linéaire (4.2.2) qui est encore inversible pour tout $\eta > 0$, car $\det(M) > 0$ en utilisant $r_1 > 0 > r_2$. L'étude de convergence fonctionne de façon semblable au cas précédent pour $\alpha > 0$ et donne

$$\lim_{\eta\to 0^+} u_\eta(x) = \begin{cases} \dfrac{(g(1) - \alpha u(1))((\alpha + 1)e^x - (\alpha - 1)e^{-x})}{\alpha(\alpha(e - e^{-1}) + (e + e^{-1}))} + u(x) & \text{si } x \in [0, 1] \\ \dfrac{g(1)}{\alpha} & \text{si } x \in [1, 2]. \end{cases}$$

Cette différence de comportement suivant le signe devant le terme de pénalisation est illustrée sur la Fig. 4.2.1. Pour la pénalisation avec un signe + devant le terme de pénalisation, la fonction limite de u_η quand $\eta \to 0$ coïncide avec la solution u du problème original dans le domaine $]0,1[$, contrairement à la pénalisation avec un signe − pour laquelle u_η converge vers une fonction différente de u.



(a) Pénalisation « + » (4.1.3)

(b) Pénalisation « − » (4.2.6)

FIG. 4.2.1: Comparaison entre la solution u du problème original (4.1.1), pour $f = 0$, $g(0) = 0$, $g(1) = 1$ et $\alpha = 1$, et la solution u_η du problème pénalisé pour $\eta \in \{1, 10^{-1}, 10^{-2}\}$.

4.2.3 Estimation d'erreur

On établit ici le résultat suivant concernant le comportement de l'erreur $\|u_\eta - u\|$ lorsque η tend vers 0 :

Proposition 4.2.4 (Estimation d'erreur)**.**

Dans le domaine $[0,1]$,

$$\|u_\eta - u\| = \underset{\eta\to 0^+}{O}(\eta) \tag{4.2.7}$$

en normes L^∞, L^1, L^2 et H^1.

Démonstration. D'après (4.2.4), on a pour $x \in [0,1]$, $u_\eta(x) - u(x) = \lambda_1 e^x + \mu_1 e^{-x}$ et $u'_\eta(x) - u'(x) = \lambda_1 e^x - \mu_1 e^{-x}$. De plus, $(\alpha-1)\lambda_1 + (\alpha+1)\mu_1 = 0$ d'après (4.2.5) et λ_1 est donné en utilisant la règle de Cramer par

$$\lambda_1 = \frac{\det(A_{\eta\lambda_1})}{\det(A_\eta)} = \frac{\begin{vmatrix} 0 & \alpha+1 & 0 & 0 \\ g(1)(1+\frac{(r_2+\alpha)e^{2r_2}-\alpha}{\eta+\alpha}) & 0 & \frac{\alpha}{r_1}+1 & (\alpha+r_2)e^{2r_2} \\ g(1)\frac{1-e^{r_2}}{\eta+\alpha} - u(1) & e^{-1} & -\frac{1}{r_1 e^{r_1}} & -e^{r_2} \\ \alpha u(1) - g(1)(1+\frac{r_2 e^{r_2}}{\eta+\alpha}) & -e^{-1} & -\frac{1}{e^{r_1}} & -r_2 e^{r_2} \end{vmatrix}}{\det(A_\eta)}. \tag{4.2.8}$$

En utilisant des développements limités ou asymptotiques lorsque $\eta \to 0^+$, on obtient

$$\begin{aligned} r_1 &= \frac{1}{\eta}(1 + \alpha\eta + (1-\alpha^2)\eta^2 + o(\eta^2)), \\ \frac{1}{r_1} &= \eta - \alpha\eta^2 + (2\alpha^2 - 1)\eta^3 + o(\eta^3), \\ -\frac{1+\frac{\alpha}{\eta}}{r_1} = r_2 &= -\alpha + (\alpha^2 - 1)\eta + 2\alpha(1-\alpha^2)\eta^2 + o(\eta^2), \\ \det(A_\eta) &= \det(A) + o(1). \end{aligned}$$

Il est ensuite possible d'exprimer tous les coefficients de la matrice $A_{\eta\lambda_1}$ comme des développements limités pour $\eta \to 0^+$. On obtient

$$\det(A_{\eta\lambda_1}) = \begin{vmatrix} 0 & \alpha+1 & & \\ g(1)\frac{e^{-2\alpha}(\alpha^2-1)+1}{\alpha}\eta + o(\eta) & 0 & \dots & \\ g(1)\frac{1-e^{-\alpha}}{\alpha} - u(1) - g(1)(\frac{e^{-\alpha}(\alpha^2-1)}{\alpha} + \frac{1-e^{-\alpha}}{\alpha^2})\eta + o(\eta) & e^{-1} & & \\ \alpha u(1) - g(1)(1-e^{-\alpha}) + g(1)e^{-\alpha}(\alpha^2 - \alpha - 1)\eta + o(\eta) & -e^{-1} & & \end{vmatrix} \tag{4.2.9}$$

$$\begin{vmatrix} 0 & 0 \\ \dots \quad 1 + \alpha\eta + o(\eta) & e^{-2\alpha}(\alpha^2-1)\eta + o(\eta) \\ o(\eta^n) & -e^{-\alpha} - e^{-\alpha}(\alpha^2-1)\eta + o(\eta) \\ o(\eta^n) & \alpha e^{-\alpha} + e^{-\alpha}(\alpha^2-1)(\alpha-1)\eta + o(\eta) \end{vmatrix}$$

si $\alpha > 0$, et

$$\det(A_{\eta\lambda_1}) = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 2g(1)\eta + o(\eta) & 0 & 1 + o(\eta) & -\eta + o(\eta) \\ (g(1) - u(1)) - \frac{g(1)}{2}\eta + o(\eta) & e^{-1} & o(\eta^n) & -1 + \eta + o(\eta) \\ -g(1)\eta + o(\eta) & -e^{-1} & o(\eta^n) & \eta + o(\eta) \end{vmatrix} \tag{4.2.10}$$

si $\alpha = 0$. En développant le déterminant suivant la première ligne puis la seconde colonne, on obtient après simplifications

$$\det(A_{\eta\lambda 1}) = -(\alpha+1)e^{-\alpha}(g(1)\alpha + u(1)(1-\alpha^2))\eta + o(\eta)$$

dans les deux cas $\alpha > 0$ ou $\alpha = 0$. Finalement,

$$\lambda_1 = -\frac{(\alpha+1)(g(1)\alpha + u(1)(1-\alpha^2))}{(1+\alpha^2)(e-e^{-1}) + 2\alpha(e+e^{-1})}\eta + o(\eta) \quad \text{et} \quad \mu_1 = \frac{1-\alpha}{1+\alpha}\lambda_1.$$

Le résultat de la Proposition 4.2.4 est alors une conséquence directe des estimations $\lambda_1 = O(\eta)$ et $\mu_1 = O(\eta)$ lorsque $\eta \to 0^+$, que l'on utilise pour majorer $\|u_\eta - u\| \leq |\lambda_1| \, \|e^x\| + |\mu_1| \, \|e^{-x}\|$. □

4.2.4 Stabilité

Le résultat de stabilité suivant renseigne sur la dépendance continue de la solution u_η vis-à-vis des données f et g :

Proposition 4.2.5 (Stabilité).

Pour tout $\eta > 0$, l'application $(f, g) \in L^2(]0,1[) \times L^2(\{0,1\}) \mapsto u_{\eta\,|]0,1[} \in H^1(]0,1[)$ est linéaire continue. De plus,

$$\|u_\eta\|_{H^1(]0,1[)} \underset{\eta \to 0^+}{\leq} C(\|f\|_{L^2} + \|g\|_{L^2(\{0,1\})}),$$

où C ne dépend pas de η.

Démonstration. La linéarité de l'application est une conséquence de la linéarité du problème pénalisé (4.1.3). D'après (4.2.4), on a $u_\eta(x) = \lambda_1 e^x + \mu_1 e^{-x} + u(x)$ pour $x \in [0,1]$. En développant le déterminant au numérateur de (4.2.8) suivant la première colonne et en notant que le déterminant au dénominateur ne dépend que de η (α étant fixé), on peut écrire $\lambda_1 = g(1)D^1_\eta + u(1)D^2_\eta$. Ainsi, en utilisant aussi $\mu_1 = \frac{1-\alpha}{1+\alpha}\lambda_1$, il vient

$$\begin{aligned}
\|u_\eta\|_{H^1(]0,1[)} &= \|\lambda_1 e^x + \mu_1 e^{-x} + u\|_{H^1(]0,1[)} \\
&\leq |\lambda_1| \|e^x + \tfrac{1-\alpha}{1+\alpha} e^{-x}\|_{H^1(]0,1[)} + \|u\|_{H^1(]0,1[)} \\
&\leq C_1 D_\eta (|g(1)| + |u(1)|) + \|u\|_{H^1(]0,1[)}, \qquad (4.2.11)
\end{aligned}$$

avec $D_\eta = \max(|D^1_\eta|, |D^2_\eta|)$.

D'un autre côté, l'application $(f, g) \in L^2(]0,1[) \times L^2(\{0,1\}) \mapsto u \in H^1(]0,1[)$ est linéaire continue. En effet, en prenant u comme fonction test dans la formulation faible (4.1.2) du problème original (4.1.1), on obtient

$$\int_0^1 ((u')^2 + u^2)\, dx + \alpha(u(0)^2 + u(1)^2) = \int_0^1 f u\, dx + (g(0)u(0) + g(1)u(1)),$$

d'où

$$\begin{aligned}
\|u\|^2_{H^1} &\leq \|f\|_{L^2}\|u\|_{L^2} + \|g\|_{L^2(\{0,1\})}\|u\|_{L^2(\{0,1\})} \\
&\leq \|f\|_{L^2}\|u\|_{H^1} + C_2\|g\|_{L^2(\{0,1\})}\|u\|_{H^1}
\end{aligned}$$

en utilisant la continuité de l'application trace. Ainsi

$$\|u\|_{H^1} \leq C_3(\|f\|_{L^2} + \|g\|_{L^2(\{0,1\})}),$$

avec $C_3 = \max(1, C_2)$.

En utilisant également

$$|g(1)| \leq \sqrt{g^2(0) + g^2(1)} \leq \|g\|_{L^2(\{0,1\})}$$

et

$$|u(1)| \leq \sqrt{u^2(0) + u^2(1)} \leq \|u\|_{L^2(\{0,1\})} \leq C_2\|u\|_{H^1},$$

(4.2.11) devient

$$\|u_\eta\|_{H^1(]0,1[)} \leq C_\eta(\|f\|_{L^2} + \|g\|_{L^2(\{0,1\})}),$$

avec $C_\eta = C_1 D_\eta(1 + C_2 C_3) + C_3$, ce qui prouve la continuité de l'application linéaire considérée pour tout $\eta > 0$.

En reprenant le développement du déterminant $\det(A_{\eta\lambda_1})$ suivant la première colonne, cette fois-ci à partir des expressions obtenues par développements limités lorsque $\eta \to 0$, (4.2.9) pour $\alpha > 0$ et (4.2.10) pour $\alpha = 0$, on obtient

$$D_\eta^2 = \begin{cases} \dfrac{-(\alpha+1)(1+\alpha\eta+o(\eta))(-e^{-\alpha}(\alpha^2-1)\eta+o(\eta))}{\det(A)+o(1)} & \text{si } \alpha > 0 \\ \dfrac{-\eta+o(\eta)}{\det(A)+o(1)} & \text{si } \alpha = 0. \end{cases}$$

Ainsi $D_\eta^2 \xrightarrow[\eta\to 0^+]{} 0$. Comme $\lambda_1 \xrightarrow[\eta\to 0^+]{} 0$ et $\lambda_1 = g(1)D_\eta^1 + u(1)D_\eta^2$, on en déduit $D_\eta^1 \xrightarrow[\eta\to 0^+]{} 0$ si $g(1) \neq 0$. Cela reste vrai également si $g(1) = 0$ car on peut alors prendre $D_\eta^1 = 0$. On a donc $D_\eta \xrightarrow[\eta\to 0^+]{} 0$, d'où $C_\eta \xrightarrow[\eta\to 0^+]{} C_3$ la constante de continuité du problème original. On obtient donc bien l'inégalité

$$\|u_\eta\|_{H^1(]0,1[)} \underset{\eta\to 0^+}{\leq} C(\|f\|_{L^2} + \|g\|_{L^2(\{0,1\})})$$

avec une constante $C = C_3 + \varepsilon$ indépendante de η. □

4.3 Pénalisation du problème physique

Le problème physique modèle auquel on s'intéresse est l'équation de réaction-diffusion linéaire :

$$\begin{cases} -u'' + u = f \quad \text{dans }]0, x_l[\cup]x_r, 1[\\ u'(x_l) + \alpha u(x_l) = g(x_l), \ -u'(x_r) + \alpha u(x_r) = g(x_r) \\ \text{conditions périodiques : } u(0) = u(1), \ u'(0) = u'(1), \end{cases} \tag{4.3.1}$$

posée dans le domaine physique (Fig. 3.1.2 ou 3.3.1).

La méthode de pénalisation précédente s'étend avec les mêmes techniques au problème physique (4.3.1). Le problème pénalisé associé est le suivant :

$$\begin{cases} -u_\eta'' + u_\eta + \dfrac{\chi_l}{\eta}(u_\eta' + \alpha u_\eta - g(x_l)) + \dfrac{\chi_r}{\eta}(-u_\eta' + \alpha u_\eta - g(x_r)) = (1-\chi)f \quad \text{dans }]0,1[\\ \text{conditions périodiques : } u_\eta(0) = u_\eta(1), \ u_\eta'(0) = u_\eta'(1), \end{cases} \tag{4.3.2}$$

où $\eta > 0$ est le paramètre de pénalisation, χ est la fonction caractéristique de tout l'obstacle $]x_l, x_r[$, χ_l (resp. χ_r) est la fonction caractéristique de la partie gauche $]x_l, x_l + \Delta_l[$ de l'obstacle (resp. de la partie droite $]x_r - \Delta_r, x_r[$). On choisit Δ_l et Δ_r vérifiant $\Delta_l + \Delta_r < d = x_r - x_l$ pour avoir deux intervalles disjoints (voir Fig. 3.3.3).

Ici, le domaine fluide $\omega =]0, x_l[\cup]x_r, 1[$ est plongé dans $\Omega =]0,1[$. Les formulations faibles des problèmes (4.3.1) et (4.3.2) sont respectivement :

$$\begin{aligned} &\text{Trouver } u \in H^1(]-x_l, x_l[) \text{ tel que } \forall v \in H^1(]-x_l, x_l[) \\ &\int_{-x_l}^{x_l} (u'v' + uv)\,dx + \alpha(u(-x_l)v(-x_l) + u(x_l)v(x_l)) \\ &\qquad = \int_{-x_l}^{x_l} fv\,dx + (g(-x_l)v(-x_l) + g(x_l)v(x_l)). \end{aligned} \tag{4.3.3}$$

$$\left|\begin{array}{l}\text{Trouver } u_\eta \in H^1_{per}(]0,1[) \text{ tel que } \forall v \in H^1_{per}(]0,1[)\\ \displaystyle\int_0^1 \Big(u'_\eta v' + u_\eta v + \frac{\chi_l}{\eta}(u'_\eta + \alpha u_\eta)v + \frac{\chi_r}{\eta}(-u'_\eta + \alpha u_\eta)v\Big)\,dx\\ \qquad\qquad = \displaystyle\int_0^1 \Big((1-\chi)fv + \frac{\chi_l}{\eta}g(x_l)v + \frac{\chi_r}{\eta}g(x_r)v\Big)\,dx.\end{array}\right. \tag{4.3.4}$$

On peut établir une adaptation des résultats théoriques obtenus pour le problème (4.1.1) et sa pénalisation (4.1.3). En particulier, le problème pénalisé (4.3.2) est bien posé pour tout $\eta > 0$, et son unique solution u_η converge, quand η tend vers 0, vers $\bar{u}$ avec

- $\bar{u}_{|]0,x_l[\cup]x_r,1[} = u$ solution du problème original (4.3.1),
- $\bar{u}_{|]x_l,x_l+\Delta_l[} = u_l$ solution de $\begin{cases} v' + \alpha v = g(x_l) & \text{dans }]x_l, x_l+\Delta_l[\\ v(x_l) = u(x_l), \end{cases}$
- $\bar{u}_{|]x_r-\Delta_r,x_r[} = u_r$ solution de $\begin{cases} -v' + \alpha v = g(x_r) & \text{dans }]x_r-\Delta_r, x_r[\\ v(x_r) = u(x_r), \end{cases}$
- $\bar{u}_{|]x_l+\Delta_l,x_r-\Delta_r[} = v$ solution de $\begin{cases} -v'' + v = 0 & \text{dans }]x_l+\Delta_l, x_r-\Delta_r[\\ v(x_l+\Delta_l) = u_l(x_l+\Delta_l)\\ v(x_r-\Delta_r) = u_r(x_r-\Delta_r). \end{cases}$

Remarque 4.3.1. Dans le même sens que la Remarque 4.2.3, les signes considérés dans (4.3.2) pour l'introduction de la pénalisation ont été choisis afin d'avoir une advection qui va du domaine fluide vers le domaine solide. En outre, une partie libre a été introduite au milieu de l'obstacle pour éviter la communication entre les deux côtés gauche et droit de l'obstacle quand η tend vers 0.

4.4 Méthode numérique

Pour l'approximation numérique de la solution du problème pénalisé (4.3.2), on considère une subdivision uniforme $(x_i)_{1\le i\le N+1}$ de $[0,1]$ de pas h ($x_i = (i-1)h = \frac{i-1}{N}$) et on utilise un schéma aux différences finies. Dans un premier temps, la convergence du schéma est établie puis les résultats théoriques obtenus précédemment sont validés sur des exemples numériques dans la section suivante.

4.4.1 Discrétisation d'ordre 1

On considère le schéma suivant :

$$\begin{cases} -\dfrac{U_{i+1}-2U_i+U_{i-1}}{h^2} + U_i + \dfrac{\chi_l(x_i)}{\eta}\Big(\dfrac{U_i-U_{i-1}}{h} + \alpha U_i - g_l\Big)\\ \qquad + \dfrac{\chi_r(x_i)}{\eta}\Big(-\dfrac{U_{i+1}-U_i}{h} + \alpha U_i - g_r\Big) = (1-\chi(x_i))f(x_i) \quad i = 1,\dots,N\\ U_0 = U_N,\ U_1 = U_{N+1}. \end{cases} \tag{4.4.1}$$

Pour simplifier les notations, on utilise U, g_l et g_r au lieu de u_η, $g(x_l)$ et $g(x_r)$ respectivement. Le terme de diffusion a été discrétisé de façon centrée tandis que les termes de pénalisation,

correspondant à des termes d'advection, ont été discrétisés de façon décentrée suivant le sens d'advection.

Le système linéaire associé à (4.4.1) fait intervenir une matrice tridiagonale périodique :

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 & a_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ c_N & 0 & \cdots & 0 & a_N & b_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ U_{N-1} \\ U_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ r_{N-1} \\ r_N \end{pmatrix}, \tag{4.4.2}$$

avec

- $a_i = -\frac{1}{h^2} - \frac{\chi_l(x_i)}{\eta}\frac{1}{h}$;
- $b_i = 1 + \frac{2}{h^2} + \frac{\chi_l(x_i)+\chi_r(x_i)}{\eta}(\frac{1}{h} + \alpha)$;
- $c_i = -\frac{1}{h^2} - \frac{\chi_r(x_i)}{\eta}\frac{1}{h}$;
- $r_i = (1 - \chi(x_i))f(x_i) + \frac{\chi_l(x_i)}{\eta}g_l + \frac{\chi_r(x_i)}{\eta}g_r$.

On note ce système $A_h U_h = r_h$. On montre dans ce qui suit la consistance et la stabilité de ce schéma aux différences finies, ce qui implique sa convergence.

Lemme 4.4.1 (Existence et unicité)**.**

Pour tous $\eta, h > 0$, le système (4.4.2) admet une unique solution.

Démonstration. Pour $1 \leq i \leq N$, on a $b_i > 0$, $a_i < 0$ et $c_i < 0$, ainsi

$$\begin{aligned} |b_i| = b_i &= 1 - a_i - c_i + \frac{\chi_l(x_i) + \chi_r(x_i)}{\eta}\alpha \\ &= 1 + |a_i| + |c_i| + \frac{\chi_l(x_i) + \chi_r(x_i)}{\eta}\alpha \\ &\geq 1 + |a_i| + |c_i| > |a_i| + |c_i|. \end{aligned}$$

La matrice A_h du système est donc à diagonale strictement dominante, A_h est donc inversible via le lemme d'Hadamard. □

Lemme 4.4.2 (Stabilité)**.**

Pour tous $\eta, h > 0$, le schéma aux différences finies (4.4.2) est stable en norme $\|\cdot\|_\infty$ avec $\|A_h^{-1}\|_\infty \leq 1$.

Démonstration. L'argument principal est le fait que la matrice A_h est à diagonale strictement dominante avec $|(A_h)_{ii}| - \sum_{j\neq i}|(A_h)_{ij}| \geq \delta > 0$ où δ ne dépend pas de h.

Soit $M \in \{1,\dots,N\}$ tel que $|U_M| = \max_{1\le i\le N}|U_i| = \|U_h\|_\infty$, alors

$$|r_M| = \begin{cases} |b_1U_1 + c_1U_2 + a_1U_N| \ge |b_1U_1| - |a_1U_N| - |c_1U_2| & \text{si } M = 1 \\ |a_MU_{M-1} + b_MU_M + c_MU_{M+1}| \ge |b_MU_M| - |a_MU_{M-1}| - |c_MU_{M+1}| & \text{si } 2 \le M \le N-1 \\ |c_NU_1 + a_NU_{N-1} + b_NU_N| \ge |b_NU_N| - |a_NU_{N-1}| - |c_NU_1| & \text{si } M = N, \end{cases}$$

ainsi en utilisant $|b_M| - |a_M| - |c_M| \ge 1$, $-|U_i| \ge -|U_M|$ et $|r_M| \le \|r_h\|_\infty$, on obtient $\|U_h\|_\infty \le \|r_h\|_\infty$ soit $\|A_h^{-1}\|_\infty \le 1$. □

Lemme 4.4.3 (Consistance)**.**

Pour tout $\eta > 0$, si la solution u_η de (4.3.2) vérifie $u_\eta \in C^3(\mathbb{R})$ alors le schéma (4.4.2) est consistant à l'ordre 1 et

$$\|\varepsilon_h\|_\infty = \|A_h\mathcal{U}_h - r_h\|_\infty \le h\Big(\frac{1}{\eta}\max_{0\le x\le 1}|u_\eta''(x)| + \frac{1}{3}\max_{0\le x\le 1}|u_\eta^{(3)}(x)|\Big),$$

où $\mathcal{U}_h = (u_\eta(x_1),\dots,u_\eta(x_N))^T$.

Démonstration. En supposant $u_\eta \in C^3$, la formule de Taylor-Lagrange permet d'écrire, pour $1 \le i \le N$,

$$\begin{aligned} u_\eta(x_{i+1}) &= u_\eta(x_i) + hu_\eta'(x_i) + \frac{h^2}{2}u_\eta''(x_i) + \frac{h^3}{6}u_\eta^{(3)}(\xi_i) \\ &= u_\eta(x_i) + hu_\eta'(x_i) + \frac{h^2}{2}u_\eta''(\gamma_i), \\ u_\eta(x_{i-1}) &= u_\eta(x_i) - hu_\eta'(x_i) + \frac{h^2}{2}u_\eta''(x_i) - \frac{h^3}{6}u_\eta^{(3)}(\nu_i) \\ &= u_\eta(x_i) - hu_\eta'(x_i) + \frac{h^2}{2}u_\eta''(\zeta_i), \end{aligned}$$

avec $\xi_i, \gamma_i, \nu_i, \zeta_i \in [0,1]$. L'erreur de consistance ε_i au point x_i s'écrit donc

$$\begin{aligned} \varepsilon_i &= -\frac{u_\eta(x_{i+1}) - 2u_\eta(x_i) + u_\eta(x_{i-1})}{h^2} + u_\eta(x_i) \\ &\quad + \frac{\chi_l(x_i)}{\eta}\Big(\frac{u_\eta(x_i) - u_\eta(x_{i-1})}{h} + \alpha u_\eta(x_i) - g_l\Big) \\ &\quad + \frac{\chi_r(x_i)}{\eta}\Big(-\frac{u_\eta(x_{i+1}) - u_\eta(x_i)}{h} + \alpha u_\eta(x_i) - g_r\Big) - (1-\chi(x_i))f(x_i) \\ &= -\frac{1}{h^2}\big(h^2u_\eta''(x_i) + \frac{h^3}{6}u_\eta^{(3)}(\xi_i) - \frac{h^3}{6}u_\eta^{(3)}(\nu_i)\big) + u_\eta(x_i) \\ &\quad + \frac{\chi_l(x_i)}{\eta}\Big(\frac{1}{h}\big(hu_\eta'(x_i) - \frac{h^2}{2}u_\eta''(\zeta_i)\big) + \alpha u_\eta(x_i) - g_l\Big) \\ &\quad + \frac{\chi_r(x_i)}{\eta}\Big(-\frac{1}{h}\big(hu_\eta'(x_i) + \frac{h^2}{2}u_\eta''(\gamma_i)\big) + \alpha u_\eta(x_i) - g_r\Big) - (1-\chi(x_i))f(x_i) \\ &= -u_\eta''(x_i) + u_\eta(x_i) + \frac{\chi_l(x_i)}{\eta}(u_\eta'(x_i) + \alpha u_\eta(x_i) - g_l) \\ &\quad + \frac{\chi_r(x_i)}{\eta}(-u_\eta'(x_i) + \alpha u_\eta(x_i) - g_r) - (1-\chi(x_i))f(x_i) \\ &\quad - \frac{h}{6}(u_\eta^{(3)}(\xi_i) - u_\eta^{(3)}(\nu_i)) - \frac{h}{2\eta}(\chi_l(x_i)u_\eta''(\zeta_i) + \chi_r(x_i)u_\eta''(\gamma_i)). \end{aligned}$$

u_η étant la solution exacte de (4.3.2), on a

$$-u_\eta'' + u_\eta + \frac{\chi_l}{\eta}(u_\eta' + \alpha u_\eta - g_l) + \frac{\chi_r}{\eta}(-u_\eta' + \alpha u_\eta - g_r) = (1-\chi)f \quad \text{p.p. dans }]0,1[,$$

ainsi si $u_\eta \in C^3$, on a

$$-u_\eta''(x) + u_\eta(x) = \begin{cases} f(x) & \text{si } x \in [0, x_l[\\ -\dfrac{1}{\eta}(u_\eta'(x) + \alpha u_\eta(x) - g_l) & \text{si } x \in]x_l, x_l + \Delta_l[\\ 0 & \text{si } x \in]x_l + \Delta_l, x_r - \Delta_r[\\ -\dfrac{1}{\eta}(-u_\eta'(x) + \alpha u_\eta(x) - g_r) & \text{si } x \in]x_r - \Delta_r, x_r[\\ f(x) & \text{si } x \in]x_r, 1], \end{cases}$$

l'égalité étant vérifiée en chaque point. Par continuité de $-u_\eta'' + u_\eta$, on obtient qu'il faut imposer $\chi(x_l) = \chi_l(x_l)$ et $\chi(x_r) = \chi_r(x_r)$ pour avoir

$$-u_\eta'' + u_\eta + \frac{\chi_l}{\eta}(u_\eta' + \alpha u_\eta - g_l) + \frac{\chi_r}{\eta}(-u_\eta' + \alpha u_\eta - g_r) = (1-\chi)f \quad \text{en chaque point de } [0,1].$$

Dans ce cas, les deux premières lignes de la dernière égalité portant sur ε_i s'annulent pour tout x_i. On en déduit, si les conditions précédentes sur χ, χ_l et χ_r sont respectées, que

$$|\varepsilon_i| \leq h\Big(\frac{1}{\eta}\max_{0\leq x\leq 1}|u_\eta''(x)| + \frac{1}{3}\max_{0\leq x\leq 1}|u_\eta^{(3)}(x)|\Big),$$

et la consistance est prouvée. □

Proposition 4.4.4 (Convergence)**.**

Pour tout $\eta > 0$, si la solution u_η de (4.3.2) vérifie $u_\eta \in C^3(\mathbb{R})$ alors le schéma (4.4.2) est convergent en norme $\|\cdot\|_\infty$ à l'ordre 1 avec

$$\|e_h\|_\infty = \|\mathcal{U}_h - U_h\|_\infty \leq C_\eta h,$$

où $\mathcal{U}_h = (u_\eta(x_1), \ldots, u_\eta(x_N))^T$ et C_η est une constante indépendante de h.

Démonstration. La convergence est une conséquence du théorème de Lax : un schéma aux différences finies stable et consistant est convergent. En effet à partir de $A_h U_h = r_h$ et $\varepsilon_h = A_h\mathcal{U}_h - r_h$, on déduit $A_h(\mathcal{U}_h - U_h) = A_h e_h = \varepsilon_h$, ainsi $\|e_h\|_\infty = \|A_h^{-1}\varepsilon_h\|_\infty \leq \|A_h^{-1}\|_\infty\|\varepsilon_h\|_\infty$ et le résultat s'ensuit en utilisant la stabilité (Lemme 4.4.2) et la consistance (Lemme 4.4.3). □

Une autre propriété du schéma aux différences finies utilisé est qu'il vérifie le principe du maximum discret :

Proposition 4.4.5 (Principe du maximum discret)**.**

Soit U_h l'unique solution du système (4.4.2) $A_h U_h = r_h$. Si $r_h \geq 0$ alors $U_h \geq 0$.

Démonstration. L'argument principal, en plus de la propriété de diagonale strictement dominante de la matrice A_h, est le fait que ses éléments diagonaux sont strictement positifs $(A_h)_{ii} > 0$ et que ses coefficients extra-diagonaux sont négatifs $(A_h)_{ij} \leq 0$ pour $j \neq i$.

Si U_h vérifie $A_h U_h = r_h \geq 0$ alors en considérant $m \in \{1, \dots, N\}$ tel que $U_m = \min_{1 \leq i \leq N} U_i$, on obtient en utilisant $b_i > 0$, $a_i \leq 0$, $c_i \leq 0$ et $-U_i \leq -U_m$,

$$\begin{cases} 0 \leq |b_1|U_1 - |c_1|U_2 - |a_1|U_N \leq (|b_1| - |a_1| - |c_1|)U_1 & \text{si } m = 1 \\ 0 \leq -|a_m|U_{m-1} + |b_m|U_m - |c_m|U_{m+1} \leq (|b_m| - |a_m| - |c_m|)U_m & \text{si } 2 \leq m \leq N-1 \\ 0 \leq |c_N|U_1 - |a_N|U_{N-1} + |b_N|U_N \leq (|b_N| - |a_N| - |c_N|)U_N & \text{si } m = N, \end{cases}$$

d'où $U_m \geq 0$ puisque $|b_m| - |a_m| - |c_m| > 0$, ainsi $U_h \geq 0$. □

4.4.2 Discrétisation d'ordre 2

Pour des raisons de précision numérique, il est également souhaitable de définir un schéma d'ordre 2. La discrétisation des termes de pénalisation peut être faite à l'ordre 2 par un schéma centré ou décentré. Ces deux cas sont considérés ici puis étudiés :

Schéma centré

Le schéma « tout centré » s'écrit

$$\begin{cases} -\dfrac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + U_i + \dfrac{\chi_l(x_i)}{\eta}\Big(\dfrac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h} + \alpha U_i - g_l\Big) \\ \qquad + \dfrac{\chi_r(x_i)}{\eta}\Big(-\dfrac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h} + \alpha U_i - g_r\Big) = (1 - \chi(x_i))f(x_i) \quad i = 1, \dots, N \\ U_0 = U_N,\ U_1 = U_{N+1}, \end{cases} \tag{4.4.3}$$

et fait aussi intervenir une matrice tridiagonale périodique (a, b, c) avec

- $a_i = -\frac{1}{h^2} + \frac{-\chi_l(x_i) + \chi_r(x_i)}{\eta}\frac{1}{2h}$;
- $b_i = 1 + \frac{2}{h^2} + \frac{\chi_l(x_i) + \chi_r(x_i)}{\eta}\alpha$;
- $c_i = -\frac{1}{h^2} + \frac{\chi_l(x_i) - \chi_r(x_i)}{\eta}\frac{1}{2h}$;
- $r_i = (1 - \chi(x_i))f(x_i) + \frac{\chi_l(x_i)}{\eta}g_l + \frac{\chi_r(x_i)}{\eta}g_r$.

Pour ce schéma centré, on obtient des résultats d'inversibilité, de stabilité et de convergence à l'ordre 2, mais sous une condition liant le pas de discrétisation h et le paramètre de pénalisation η. Plus précisément,

Lemme 4.4.6 (Inversibilité et stabilité conditionnelles)**.**

Pour $h \leq 2\eta$, le schéma centré (4.4.3) admet une unique solution et est stable en norme $\|\cdot\|_\infty$ avec $\|A_h^{-1}\|_\infty \leq 1$ (A_h étant la matrice associée au schéma).

Démonstration. Une condition suffisante pour avoir l'existence et l'unicité de la solution du schéma (4.4.3) est d'avoir la matrice A_h associée à diagonale strictement dominante.

On s'intéresse donc à $|b_i| - |a_i| - |c_i|$. En distinguant différentes zones du domaine, on obtient

$$|b_i|-|a_i|-|c_i| = \begin{cases} \left|1+\frac{2}{h^2}\right| - \left|-\frac{1}{h^2}\right| - \left|-\frac{1}{h^2}\right| = 1 > 0 & \text{dans les zones } \chi_l = \chi_r = 0 \\ \left|1+\frac{2}{h^2}+\frac{1}{\eta}\alpha\right| - \left|-\frac{1}{h^2}-\frac{1}{\eta}\frac{1}{2h}\right| - \left|-\frac{1}{h^2}+\frac{1}{\eta}\frac{1}{2h}\right| & \text{dans la zone } \chi_l = 1 \\ \left|1+\frac{2}{h^2}+\frac{1}{\eta}\alpha\right| - \left|-\frac{1}{h^2}+\frac{1}{\eta}\frac{1}{2h}\right| - \left|-\frac{1}{h^2}-\frac{1}{\eta}\frac{1}{2h}\right| & \text{dans la zone } \chi_r = 1. \end{cases}$$

Ainsi, dans les zones $\chi_l = 1$ ou $\chi_r = 1$, on a

$$|b_i| - |a_i| - |c_i| = \Big(1+\frac{2}{h^2}+\frac{1}{\eta}\alpha\Big) - \Big(\frac{1}{h^2}+\frac{1}{\eta}\frac{1}{2h}\Big) - \Big|-\frac{1}{h^2}+\frac{1}{\eta}\frac{1}{2h}\Big|,$$

d'où pour $-\frac{1}{h^2}+\frac{1}{\eta}\frac{1}{2h} \leq 0$ (i.e. $h \leq 2\eta$),

$$|b_i| - |a_i| - |c_i| = 1 + \frac{1}{\eta}\alpha \geq 1 > 0,$$

et la matrice est alors à diagonale strictement dominante.

La stabilité $\|A_h^{-1}\|_\infty \leq 1$ pour $h \leq 2\eta$ se prouve comme dans la démonstration du Lemme 4.4.2 (pour le schéma décentré d'ordre 1) en utilisant $|b_i| - |a_i| - |c_i| \geq 1$. □

Lemme 4.4.7 (Consistance)**.**

Pour tout $\eta > 0$, si la solution u_η de (4.3.2) vérifie $u_\eta \in C^4(\mathbb{R})$ alors le schéma (4.4.3) est consistant à l'ordre 2 avec

$$\|\varepsilon_h\|_\infty = \|A_h\mathcal{U}_h - r_h\|_\infty \leq h^2\Big(\frac{1}{3\eta}\max_{0\leq x\leq 1}|u_\eta^{(3)}(x)| + \frac{1}{12}\max_{0\leq x\leq 1}|u_\eta^{(4)}(x)|\Big),$$

où $\mathcal{U}_h = (u_\eta(x_1), \ldots, u_\eta(x_N))^T$.

Démonstration. Démonstration semblable à celle du Lemme 4.4.3 pour le schéma décentré d'ordre 1. □

Proposition 4.4.8 (Convergence conditionnelle)**.**

Pour tout $\eta > 0$, si la solution u_η de (4.3.2) vérifie $u_\eta \in C^4(\mathbb{R})$ alors le schéma (4.4.3) est convergent en norme $\|\cdot\|_\infty$ à l'ordre 2 avec, pour $h \leq 2\eta$,

$$\|e_h\|_\infty = \|\mathcal{U}_h - U_h\|_\infty \leq C_\eta h^2,$$

où $\mathcal{U}_h = (u_\eta(x_1), \ldots, u_\eta(x_N))^T$ et C_η est une constante indépendante de h.

Démonstration. Théorème de Lax. □

Le schéma centré (4.4.3) vérifie aussi le principe du maximum discret sous la même condition précédente liant h et η.

Proposition 4.4.9 (Principe du maximum discret conditionnel)**.**

Pour $h \leq 2\eta$, soit U_h l'unique solution du schéma (4.4.3) $A_h U_h = r_h$. Si $r_h \geq 0$ alors $U_h \geq 0$.

Démonstration. Démonstration semblable à celle de la Proposition 4.4.5 (pour le schéma décentré d'ordre 1) en utilisant le fait que, pour $h \leq 2\eta$, A_h est à diagonale strictement dominante avec $a_i > 0$, $b_i \leq$ et $c_i \leq 0$. □

La condition $h \leq 2\eta$ du schéma centré peut être très restrictive en pratique car le paramètre de pénalisation doit être pris très petit devant 1 pour approcher la solution du problème original (4.3.1), d'où le recours au schéma décentré d'ordre 2 appelé schéma LUD (linear upwind differencing scheme).

Schéma décentré

Le schéma décentré LUD s'écrit

$$\begin{cases} -\dfrac{U_{i+1}-2U_i+U_{i-1}}{h^2} + U_i + \dfrac{\chi_l(x_i)}{\eta}\Big(\dfrac{3U_i-4U_{i-1}+U_{i-2}}{2h} + \alpha U_i - g_l\Big) \\ \qquad + \dfrac{\chi_r(x_i)}{\eta}\Big(-\dfrac{-U_{i+2}+4U_{i+1}-3U_i}{2h} + \alpha U_i - g_r\Big) = (1-\chi(x_i))f(x_i) \quad i = 1,\dots,N \\ U_i = U_{N+i}, \end{cases} \tag{4.4.4}$$

et fait intervenir une matrice pentadiagonale périodique $(c_{-2}, c_{-1}, c_0, c_1, c_2)$ avec

- $c_{-2i} = \frac{\chi_l(x_i)}{\eta}\frac{1}{2h}$;
- $c_{-1i} = -\frac{1}{h^2} - \frac{\chi_l(x_i)}{\eta}\frac{2}{h}$;
- $c_{0i} = 1 + \frac{2}{h^2} + \frac{\chi_l(x_i)+\chi_r(x_i)}{\eta}(\frac{3}{2h} + \alpha)$;
- $c_{1i} = -\frac{1}{h^2} - \frac{\chi_r(x_i)}{\eta}\frac{2}{h}$;
- $c_{2i} = \frac{\chi_r(x_i)}{\eta}\frac{1}{2h}$;
- $r_i = (1-\chi(x_i))f(x_i) + \frac{\chi_l(x_i)}{\eta}g_l + \frac{\chi_r(x_i)}{\eta}g_r$.

La matrice n'étant pas à diagonale strictement dominante, les résultats théoriques concernant l'inversion, la stabilité et la convergence sont plus difficiles à obtenir. Nous montrerons dans la partie suivante qu'ils sont vérifiés numériquement sur les exemples traités.

Quelques remarques.

- Les résultats de convergence obtenus sont valables pour tout η fixé et renseignent sur la convergence de la solution du schéma numérique vers la solution u_η du problème pénalisé (4.3.2). Ils ne donnent pas d'information a priori sur la convergence de la solution du schéma (dans le domaine fluide) vers la solution u du problème original (4.3.1) lorsque le pas de discrétisation h et le paramètre de pénalisation η tendent vers 0 indépendamment ou dépendamment. Cette dernière convergence sera examinée numériquement dans la section suivante.

– Les résultats de convergence obtenus supposent la solution u_η du problème pénalisé très régulière (C^3 pour l'ordre 1, C^4 pour l'ordre 2), mais il n'est pas clair qu'il existe des solutions aussi régulières du problème pénalisé à cause des coefficients discontinus.

– On verra numériquement que pour les schémas d'ordre 2, l'ordre 2 est obtenu si la discrétisation contient les points du bord x_l, x_r et si $\chi_l(x_l) = \chi_r(x_r) = 1$. Ce fait se comprend aisément car dans le cas contraire, on fait une erreur d'ordre 1 sur la position du bord par rapport à la position réelle, cette erreur de type représentation géométrique est inhérente à la pénalisation et indépendante du schéma utilisé.

4.5 Résultats numériques

Dans cette section, nous présentons des tests numériques effectués pour valider l'approximation de la solution du problème original (4.3.1) par la solution numérique du problème pénalisé (4.3.2) discrétisé par les schémas aux différences finies décrits précédemment.

Conditions aux limites

Trois types de conditions aux limites sont considérés :

1. Conditions de Neumann homogènes : $u'(x_l) = u'(x_r) = 0$;
2. Conditions de Neumann non homogènes : $u'(x_l) = 1$, $u'(x_r) = 2$;
3. Conditions de Robin : $u'(x_l) + u(x_l) = 0$, $-u'(x_r) + u(x_r) = 0$.

Solutions exactes

En se ramenant sur le domaine $]0, 1[$, le problème (4.3.1) s'écrit

$$\begin{cases} -\Big(\dfrac{1}{2x_l}\Big)^2 U'' + U = F \quad \text{dans }]0,1[\\ -\dfrac{1}{2x_l}U'(0) + \alpha U(0) = g_r, \ \dfrac{1}{2x_l}U'(1) + \alpha U(1) = g_l, \end{cases}$$

les correspondances avec le problème physique étant données par $X = \frac{x}{2x_l} + \frac{1}{2}$, $u(x) = U(X)$ et $f(x) = F(X)$ pour $x \in]-x_l, x_l[$. Voir Fig. 3.3.1 et 3.3.2 pour un rappel des transformations effectuées.

On considère pour les tests numériques le terme source $F(X) = -(\frac{1}{2x_l})^2 U_0''(X) + U_0(X)$ avec $U_0(X) = -2X^3 + 3X^2 - \frac{1}{2}$. Les solutions exactes pour les conditions aux limites choisies correspondent alors à

$$U(X) = A\exp(2x_l X) + B\exp(-2x_l X) + U_0(X),$$

avec respectivement :

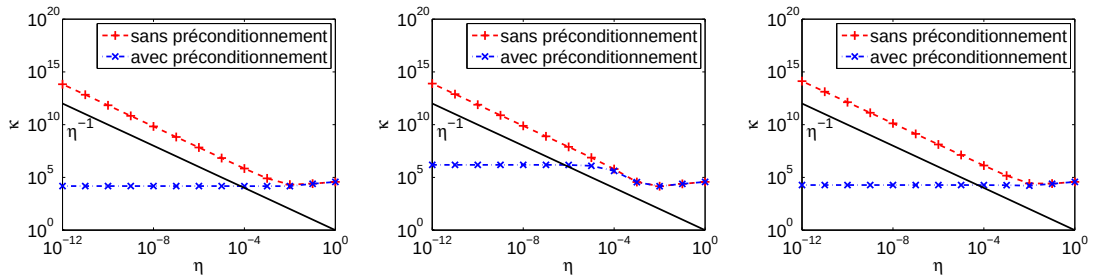
1. $A = 0$ et $B = 0$;
2. $A = \frac{2\exp(-2x_l)-1}{\exp(-2x_l)-\exp(2x_l)}$ et $B = \frac{2\exp(2x_l)-1}{\exp(-2x_l)-\exp(2x_l)}$;
3. $A = -\frac{1}{4}\exp(-2x_l)$ et $B = \frac{1}{4}$.

4.5.1 Conditionnement

Pour chacun des trois schémas numériques présentés dans la section précédente, à savoir le schéma décentré d'ordre 1 (4.4.1), le schéma centré d'ordre 2 (4.4.3) et le schéma décentré d'ordre 2 (4.4.4), les termes de pénalisation introduisent des termes en $1/\eta$ dans la matrice A_h, ce qui conduit à une matrice mal conditionnée pour des petites valeurs du paramètre de pénalisation η. La Fig. 4.5.1 montre la variation du conditionnement $\kappa(A_h) = \|A_h\|\|A_h^{-1}\|$ en norme 2 pour les différents schémas en fonction de η, pour un pas de discrétisation h fixé. Ce conditionnement varie linéairement par rapport à η^{-1} pour $\eta \ll 1$.

Pour améliorer le conditionnement, on remplace en général le système $A_h U_h = r_h$ par le système équivalent $C^{-1}A_h U_h = C^{-1} r_h$, appelé système préconditionné, avec C une matrice telle que $\kappa(C^{-1}A_h) < \kappa(A_h)$. L'application d'un préconditionnement diagonal, correspondant à $C = \mathrm{diag}(A_h)$, permet dans le cas étudié d'obtenir un conditionnement $\kappa(C^{-1}A_h)$ presque indépendant de η, comme représenté sur la Fig. 4.5.1. Le préconditionnement diagonal est efficace pour les matrices à diagonale dominante, ce qui est le cas du schéma décentré d'ordre 1.

Ce préconditionnement diagonal ne résout cependant pas le mauvais conditionnement associé à la dérivée seconde qui induit un conditionnement résultant $\kappa(C^{-1}A_h) = O(h^{-2})$. Néanmoins, il est possible de rendre le conditionnement indépendant du pas de discrétisation h en utilisant un préconditionneur classique approprié aux opérateurs elliptiques.



(a) Ordre 1 (4.4.1) (b) Ordre 2 centré (4.4.3) (c) Ordre 2 décentré (4.4.4)

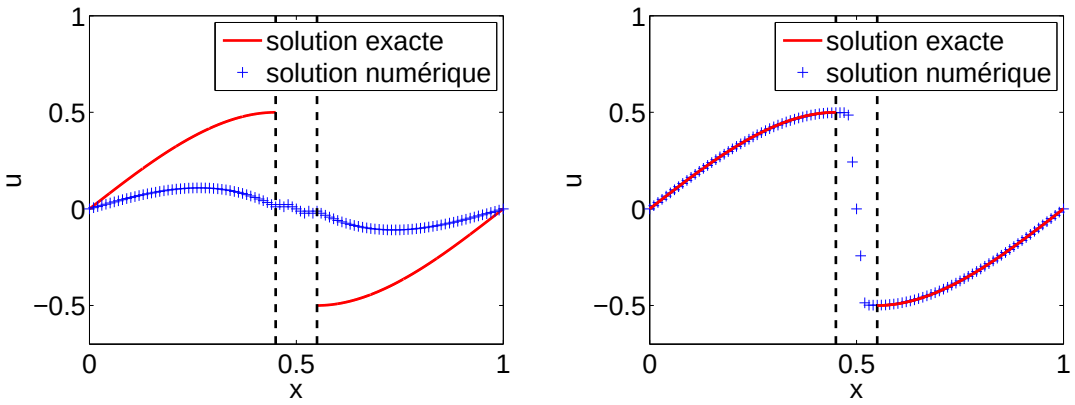
FIG. 4.5.1: Conditionnement en norme 2 de la matrice A_h du schéma en fonction du paramètre de pénalisation η pour $\alpha = 1$, $d = 0.1$, $\Delta_l = \Delta_r = 0.3d$ et $h = 10^{-2}$.

4.5.2 Schéma centré

On a vu dans la section précédente que le schéma centré (4.4.3) est stable sous la condition suffisante $h \leq 2\eta$. Cela est vérifié ici numériquement sur la Fig. 4.5.2. En effet, pour $\eta = 10^{-10}$ et $h = 10^{-2}$, la solution numérique est loin d'approcher la solution exacte. Pour $h = \eta = 10^{-3}$ en revanche, la solution numérique se comporte mieux vis-à-vis de la solution exacte dans le domaine fluide.

Ainsi, la condition $h \leq 2\eta$ semble nécessaire pour garantir la stabilité du schéma centré dans le cas étudié. Cette condition étant trop restrictive pour des applications réalistes, nous nous contenterons dans la suite de présenter les résultats numériques obtenus avec les schémas décentrés (ordre 1 ou ordre 2).

Un autre désavantage du schéma centré concerne son conditionnement dans le cas $\alpha = 0$ (conditions de Neumann), sur lequel le préconditionnement diagonal n'a aucun effet, la diagonale de la matrice du schéma étant alors constante (voir Fig. 4.5.3).



(a) $\eta = 10^{-10}$, $h = 10^{-2}$ (b) $h = \eta = 10^{-3}$

FIG. 4.5.2: Comparaison entre la solution numérique du problème pénalisé (4.3.2) en utilisant le schéma centré (4.4.3) et la solution exacte du problème original (4.3.1) avec des conditions de Neumann homogène $u'(x_l) = u'(x_r) = 0$. On a choisi $d = 0.1$, $\Delta_l = \Delta_r = 0.3d$. Les lignes pointillées représentent les frontières de l'obstacle.

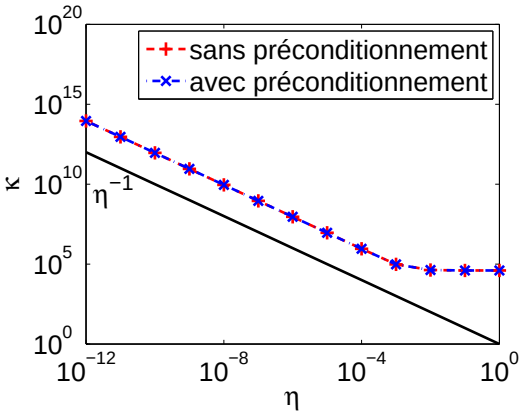


FIG. 4.5.3: Conditionnement en norme 2 de la matrice A_h du schéma centré (4.4.3) en fonction du paramètre de pénalisation η pour $\alpha = 0$, $d = 0.1$, $\Delta_l = \Delta_r = 0.3d$ et $h = 10^{-2}$.

4.5.3 Tests numériques

Cette série de tests numériques vise à vérifier les estimations théoriques établies précédemment et les bonnes propriétés de la méthode de pénalisation / différences finies proposée.

Les solutions numériques du problème pénalisé (4.3.2), obtenues par les schémas décentrés (4.4.1) et (4.4.4), sont comparées à la solution exacte du problème original (4.3.1) dans le domaine fluide pour différents types de conditions aux limites :

- Test 1 : conditions de Neumann homogènes en Fig. 4.5.4 et 4.5.5.
- Test 2 : conditions de Neumann non homogènes en Fig. 4.5.6 et 4.5.7.
- Test 3 : conditions de Robin en Fig. 4.5.8 et 4.5.9.

On a choisi pour tous les tests $d = 0.1$ (i.e. $x_l = 0.45$ et $x_r = 0.55$ pour les bords de l'obstacle) et $\Delta_l = \Delta_r = 0.3d$. Les différents masques sont ici $\chi = \chi_{[x_l,x_r]}$, $\chi_l = \chi_{[x_l,x_l+\Delta_l]}$ et $\chi_r = \chi_{[x_r-\Delta_r,x_r]}$ (avec des intervalles pris tous fermés pour vérifier en particulier $\chi(x_l) = \chi_l(x_l)$ et $\chi(x_r) = \chi_r(x_r)$).

L'erreur d'approximation (dans le domaine fluide) est quantifiée par différentes normes en calculant $\|u(x_i) - U_{h,i}\|$ pour i parcourant l'ensemble des entiers tels que $x_i \in [0, x_l] \cup [x_r, 1]$. Cette erreur est une fonction de η et h. Pour une norme fixée, on peut écrire

$$\|u(x_i) - U_{h,i}\| \leq \|u(x_i) - u_\eta(x_i)\| + \|u_\eta(x_i) - U_{h,i}\|,$$

faisant ainsi apparaître deux sources d'erreur :

- $\|u(x_i) - u_\eta(x_i)\|$ est une erreur liée à la pénalisation,
- $\|u_\eta(x_i) - U_{h,i}\|$ est une erreur introduite par la discrétisation.

Pour la norme infini par exemple, on obtient à la lumière des estimations théoriques obtenues précédemment

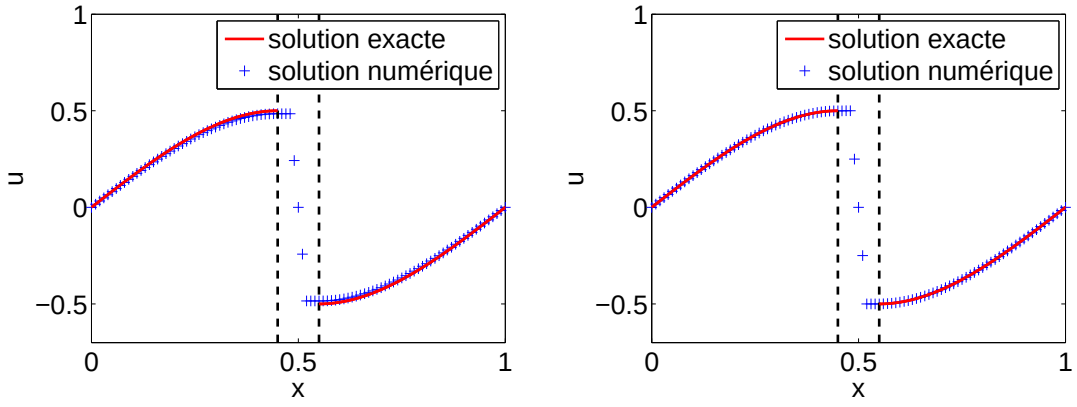
$$\|u(x_i) - U_{h,i}\|_\infty \leq C\eta + C_\eta h^p,$$

avec $p = 1$ pour le schéma d'ordre 1 (4.4.1) et $p = 2$ pour le schéma d'ordre 2 (4.4.4).

Ces erreurs sont tracées ci-après en fonction du pas de discrétisation h d'une part et du paramètre de pénalisation η d'autre part :

- En fixant η assez petit de façon à avoir une erreur de pénalisation négligeable, l'erreur mesurée en fonction de h (Fig. 4.5.5a, 4.5.7a et 4.5.9a) est d'ordre 1 pour le schéma (4.4.1) et d'ordre 2 pour le schéma (4.4.4), ce qui est consistant avec les discrétisations choisies. On note aussi que la constante C_η est proche de 1 pour $\eta = 10^{-10}$, ce qui laisse conjecturer que C_η est majorée par une constante uniformément en $\eta > 0$ entraînant alors la convergence de la solution numérique U_h vers la solution exacte u dans le domaine fluide quand $\eta, h \to 0$.
- En fixant h assez petit de façon à rendre l'erreur de discrétisation négligeable, l'erreur mesurée en fonction de η permet d'accéder à l'ordre de convergence de u_η vers u dans le domaine fluide (erreur de pénalisation). Les erreurs obtenues pour $h = 10^{-5}$ (Fig. 4.5.5b, 4.5.7b et 4.5.9b) montrent une diminution de l'erreur de façon linéaire en η quand $\eta \to 0$ comme obtenu théoriquement. Cette décroissance en η est plus visible avec le schéma d'ordre 2 car le schéma d'ordre 1 arrive plus rapidement à la saturation en h.

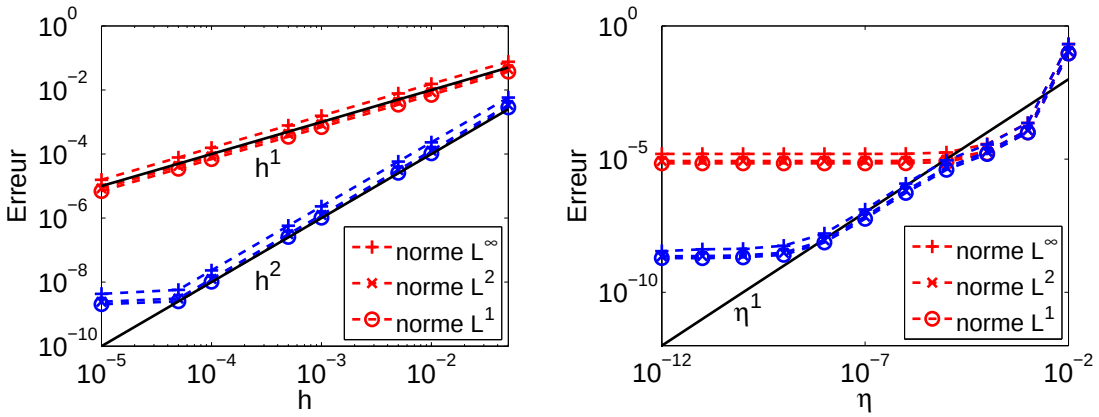
Test 1. Conditions de Neumann homogènes



(a) Schéma d'ordre 1 (4.4.1)

(b) Schéma d'ordre 2 (4.4.4)

FIG. 4.5.4: Comparaison entre la solution numérique du problème pénalisé (4.3.2) en utilisant un schéma aux différences finies et la solution exacte du problème original (4.3.1) avec des conditions de Neumann homogènes $u'(x_l) = u'(x_r) = 0$. On a choisi $\eta = 10^{-10}$ et $h = 10^{-2}$. Les lignes pointillées représentent les frontières de l'obstacle.

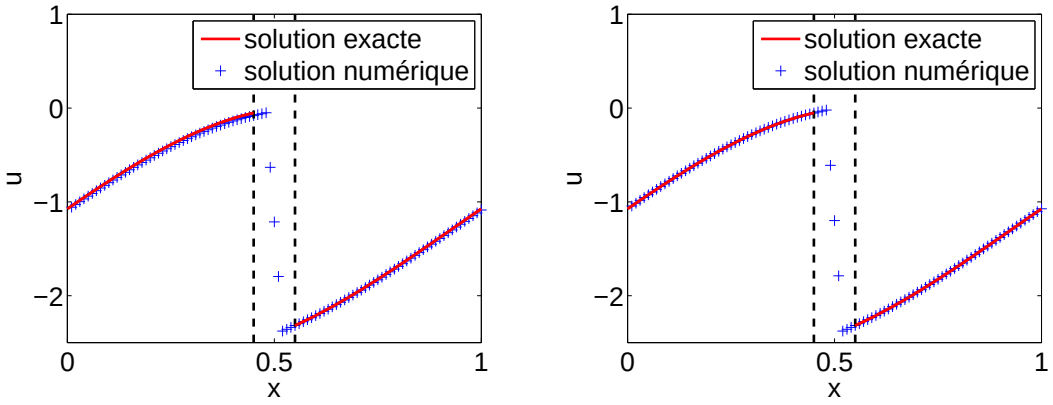


(a) $\eta = 10^{-10}$

(b) $h = 10^{-5}$

FIG. 4.5.5: Erreur dans le domaine fluide entre la solution numérique du problème pénalisé (4.3.2) en utilisant le schéma d'ordre 1 (4.4.1) (en rouge) ou le schéma d'ordre 2 (4.4.4) (en bleu) et la solution exacte du problème original (4.3.1) avec des conditions de Neumann homogènes $u'(x_l) = u'(x_r) = 0$.

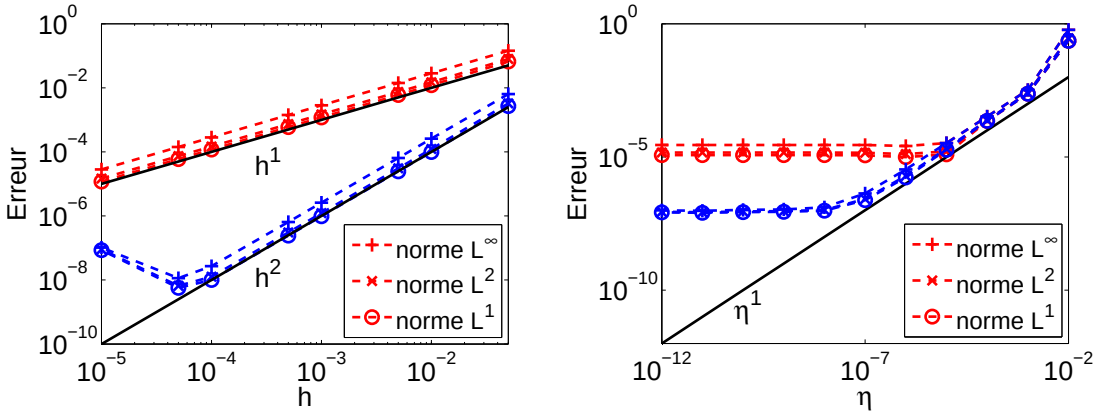
Test 2. Conditions de Neumann non homogènes



(a) Schéma d'ordre 1 (4.4.1)

(b) Schéma d'ordre 2 (4.4.4)

FIG. 4.5.6: Comparaison entre la solution numérique du problème pénalisé (4.3.2) en utilisant un schéma aux différences finies et la solution exacte du problème original (4.3.1) avec des conditions de Neumann non homogènes $u'(x_l) = 1$, $u'(x_r) = 2$. On a choisi $\eta = 10^{-10}$ et $h = 10^{-2}$.

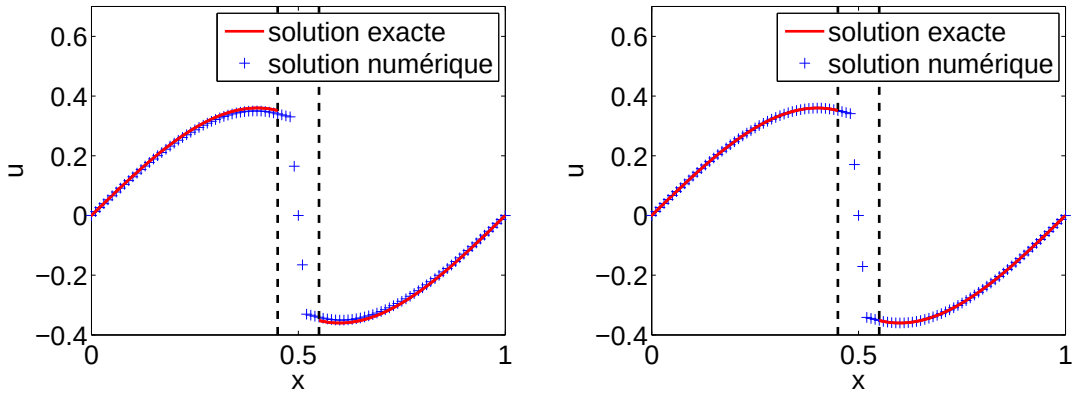


(a) $\eta = 10^{-10}$

(b) $h = 10^{-5}$

FIG. 4.5.7: Erreur dans le domaine fluide entre la solution numérique du problème pénalisé (4.3.2) en utilisant le schéma d'ordre 1 (4.4.1) (en rouge) ou le schéma d'ordre 2 (4.4.4) (en bleu) et la solution exacte du problème original (4.3.1) avec des conditions de Neumann non homogènes $u'(x_l) = 1$, $u'(x_r) = 2$.

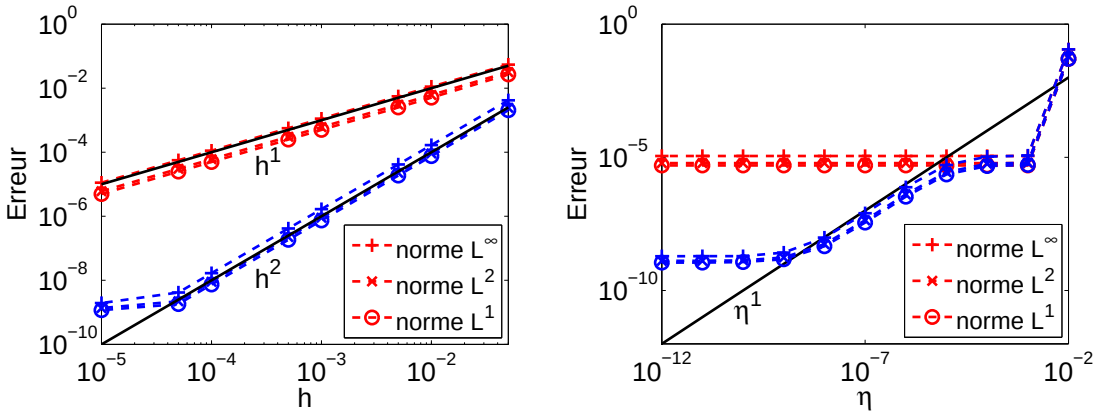
Test 3. Conditions de Robin



(a) Schéma d'ordre 1 (4.4.1)

(b) Schéma d'ordre 2 (4.4.4)

FIG. 4.5.8: Comparaison entre la solution numérique du problème pénalisé (4.3.2) en utilisant un schéma aux différences finies et la solution exacte du problème original (4.3.1) avec des conditions de Robin $u'(x_l)+u(x_l) = 0$, $-u'(x_r)+u(x_r) = 0$. On a choisi $\eta = 10^{-10}$ et $h = 10^{-2}$.



(a) $\eta = 10^{-10}$

(b) $h = 10^{-5}$

FIG. 4.5.9: Erreur dans le domaine fluide entre la solution numérique du problème pénalisé (4.3.2) en utilisant le schéma d'ordre 1 (4.4.1) (en rouge) ou le schéma d'ordre 2 (4.4.4) (en bleu) et la solution exacte du problème original (4.3.1) avec des conditions de Robin $u'(x_l) + u(x_l) = 0$, $-u'(x_r) + u(x_r) = 0$.

5 Problème parabolique

Au chapitre précédent, nous avons présenté et analysé une méthode de pénalisation permettant d'imposer des conditions aux limites de type Neumann ou Robin dans le cas d'un problème elliptique, stationnaire. L'objectif de ce chapitre est de faire de même pour un problème d'évolution en temps de type parabolique.

Après le rappel de quelques résultats connus concernant l'équation de la chaleur, prise comme modèle des équations paraboliques (Section 5.1), la méthode de pénalisation est présentée (Section 5.2). Celle-ci repose sur la discrétisation en temps du problème parabolique permettant de se ramener à une succession de problèmes elliptiques et d'utiliser les résultats du chapitre précédent. Après discrétisation en espace, l'approximation numérique du problème pénalisé par différences finies est analysée théoriquement (Section 5.4) et testée numériquement (Section 5.5) pour divers choix de conditions aux limites.

5.1 Équation de la chaleur

L'équation de la chaleur avec des conditions aux limites de Robin peut s'écrire

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = f & \text{dans } \omega \times]0,T[\\ \dfrac{\partial u}{\partial n} + \alpha u = g & \text{sur } \partial\omega \times]0,T[\\ u(x,0) = u_0(x) & \text{dans } \omega, \end{cases} \tag{5.1.1}$$

où ω est un ouvert borné régulier de $\mathbb{R}^N$, n est la normale unitaire sortante au bord $\partial\omega$, $T > 0$ est un temps final, u_0 est une donnée initiale, f et g sont des termes sources, et $\alpha \geq 0$. Le cas $\alpha = 0$ correspond à des conditions aux limites de Neumann.

5.1.1 Existence et unicité

Notre objectif étant de mettre l'accent sur le forçage de conditions aux limites de Robin par pénalisation, nous nous plaçons dans un cadre favorable où l'existence et l'unicité peut se prouver en utilisant la méthode classique de Fourier ou de diagonalisation [34, 36]. Nous avons le résultat suivant :

Proposition 5.1.1.

L'équation de la chaleur avec des conditions aux limites de Robin (5.1.1) où $u_0 \in L^2(\omega)$, $f \in L^2(]0,T[; L^2(\omega))$ et $g \in C^1([0,T]; H^{1/2}(\partial\omega))$ admet une unique solution $u \in L^2(]0,T[; H^1(\omega)) \cap C([0,T]; L^2(\omega))$.

Démonstration. Dans un premier temps, on se ramène à des conditions aux limites homogènes en utilisant un relèvement. D'après [37, Théorème 8.3], il existe un relèvement linéaire continu $\mathcal{R}\colon H^{3/2}(\partial\omega) \times H^{1/2}(\partial\omega) \to H^2(\omega)$ tel que $\mathcal{R}(h_1,h_2)|_{\partial\omega} = h_1$ et

$\frac{\partial}{\partial n}\mathcal{R}(h_1,h_2)|_{\partial\omega} = h_2$. Ainsi pour tout $t \in [0,T]$, il existe $v(t) = \mathcal{R}(0,g(t)) \in H^2(\omega)$ vérifiant $v(t)|_{\partial\omega} = 0$ et $\frac{\partial v(t)}{\partial n}|_{\partial\omega} = g(t)$, de sorte que $\frac{\partial v}{\partial n} + \alpha v = g$ sur $\partial\omega\times]0,T[$. En posant $u = v+w$, l'équation (5.1.1) se réécrit formellement

$$\begin{cases} \dfrac{\partial w}{\partial t} - \Delta w = f - \dfrac{\partial v}{\partial t} + \Delta v & \text{dans } \omega\times]0,T[\\ \dfrac{\partial w}{\partial n} + \alpha w = 0 & \text{sur } \partial\omega\times]0,T[\\ w(x,0) = u_0(x) - v(x,0) & \text{dans } \omega. \end{cases} \tag{5.1.2}$$

Posons $f^* = f - \frac{\partial v}{\partial t} + \Delta v$ et $u_0^* = u_0 - v(0)$. On veut montrer $f^* \in L^2(]0,T[;L^2(\omega))$ et $u_0^* \in L^2(\omega)$. Pour cela, montrons que $v \in C^1([0,T];H^2(\omega))$. En notant $v_d(t) = \mathcal{R}(0,\frac{dg}{dt}(t))$, on a par linéarité et continuité du relèvement l'existence d'une constante $C \geq 0$ telle que pour tous $t, t_0 \in [0,T]$ avec $t \neq t_0$,

$$\left\| \frac{v(t)-v(t_0)}{t-t_0} - v_d(t) \right\|_{H^2(\omega)} \leq C \left\| \frac{g(t)-g(t_0)}{t-t_0} - \frac{dg}{dt}(t) \right\|_{H^{1/2}(\omega)}. \tag{5.1.3}$$

En faisant tendre t vers t_0 dans (5.1.3), on déduit la dérivabilité de v et $\frac{dv}{dt}(t) = v_d(t) = \mathcal{R}(0,\frac{dg}{dt}(t))$. La continuité de $\frac{dv}{dt}$ découle ensuite de façon similaire de l'inégalité

$$\left\| \frac{dv}{dt}(t) - \frac{dv}{dt}(t_0) \right\|_{H^2(\omega)} \leq C \left\| \frac{dg}{dt}(t) - \frac{dg}{dt}(t_0) \right\|_{H^{1/2}(\omega)}. \tag{5.1.4}$$

Ainsi $v \in C^1([0,T];H^2(\omega))$, en particulier $v(0) \in L^2(\omega)$, $\frac{\partial v}{\partial t} \in L^2(]0,T[;L^2(\omega))$ et $\Delta v \in L^2(]0,T[;L^2(\omega))$. Par conséquent, on a bien $f^* \in L^2(]0,T[;L^2(\omega))$ et $u_0^* \in L^2(\omega)$.

Dans un second temps, on montre que l'équation

$$\begin{cases} \dfrac{\partial w}{\partial t} - \Delta w = f^* & \text{dans } \omega\times]0,T[\\ \dfrac{\partial w}{\partial n} + \alpha w = 0 & \text{sur } \partial\omega\times]0,T[\\ w(x,0) = u_0^*(x) & \text{dans } \omega, \end{cases} \tag{5.1.5}$$

avec $f^* \in L^2(]0,T[;L^2(\omega))$ et $u_0^* \in L^2(\omega)$, admet une unique solution w dans l'espace $L^2(]0,T[;H^1(\omega)) \cap C^0([0,T];L^2(\omega))$. En effectuant le changement de fonction inconnue $w^*(t) = e^{-t}w(t)$, l'équation (5.1.5) est équivalente à

$$\begin{cases} \dfrac{\partial w^*}{\partial t} - \Delta w^* + w^* = f^{**} & \text{dans } \omega\times]0,T[\\ \dfrac{\partial w^*}{\partial n} + \alpha w^* = 0 & \text{sur } \partial\omega\times]0,T[\\ w^*(x,0) = u_0^{**}(x) & \text{dans } \omega, \end{cases} \tag{5.1.6}$$

avec $f^{**} = f^* e^{-t} \in L^2(]0,T[;L^2(\omega))$ et $u_0^{**} = u_0^* \in L^2(\omega)$.

On considère la formulation faible suivante de l'équation (5.1.6) :

$$\left| \begin{array}{l} \text{Trouver } w^* \in L^2(]0,T[;H^1(\omega)) \cap C^0([0,T];L^2(\omega)) \text{ tel que} \\ \begin{cases} \dfrac{d}{dt}\langle w^*(t),v\rangle_{L^2(\omega)} + a(w^*(t),v) = \langle f^{**}(t),v\rangle_{L^2(\omega)} \quad \forall v \in H^1(\omega) \\ \qquad\qquad \text{(au sens des distributions dans }]0,T[) \\ w^*(t=0) = u_0^{**}, \end{cases} \end{array} \right. \tag{5.1.7}$$

avec

$$\forall u, v \in H^1(\omega), \quad a(u,v) = \int_\omega \nabla u \cdot \nabla v \, dx + \int_\omega uv \, dx + \alpha \int_{\partial\omega} uv \, d\sigma,$$
$$\forall u, v \in L^2(\omega), \quad \langle u, v \rangle_{L^2(\omega)} = \int_\omega uv \, dx.$$

L'application de [34, Théorème 8.2.3] (dont la preuve est basée sur une approche spectrale) donne l'existence et l'unicité de la solution $w^* \in L^2(]0,T[; H^1(\omega)) \cap C^0([0,T]; L^2(\omega))$ de la formulation faible (5.1.7). □

5.1.2 Discrétisation en temps

En supposant que les données sont régulières $f \in C(\bar{\omega} \times [0,T])$ et $g \in C^1(\partial\omega \times [0,T])$, on discrétise en temps le problème (5.1.1) en utilisant le schéma d'Euler implicite :

$$\begin{cases} \dfrac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} - \Delta u^{n+1} = f(t^{n+1}) & \text{dans } \omega \\ \dfrac{\partial u^{n+1}}{\partial n} + \alpha u^{n+1} = g(t^{n+1}) & \text{sur } \partial\omega \\ u^0 = u_0, \end{cases} \tag{5.1.8}$$

où $\Delta t = \frac{T}{M}$ ($M \in \mathbb{N}^*$) est le pas de discrétisation en temps et $t^n = n\Delta t$ pour $0 \leq n \leq M$. On considère la formulation variationnelle suivante de (5.1.8) :

$$\left| \begin{array}{l} \text{Trouver } u^{n+1} \in H^1(\omega) \text{ tel que } \forall v \in H^1(\omega) \\ \langle u^{n+1}, v \rangle_{L^2(\omega)} + \Delta t \, a(u^{n+1}, v) = \langle u^n + \Delta t f(t^{n+1}), v \rangle_{L^2(\omega)} + \Delta t \displaystyle\int_{\partial\omega} g(t^{n+1}) v \, d\sigma, \end{array} \right. \tag{5.1.9}$$

avec

$$\forall u, v \in H^1(\omega), \quad a(u,v) = \int_\omega \nabla u \cdot \nabla v \, dx + \alpha \int_{\partial\omega} uv \, d\sigma, \tag{5.1.10a}$$
$$\forall u, v \in L^2(\omega), \quad \langle u, v \rangle_{L^2(\omega)} = \int_\omega uv \, dx. \tag{5.1.10b}$$

En utilisant le théorème de Lax-Milgram, la suite $(u^n)_{0 \leq n \leq M}$ est définie de façon unique et $u^n \in H^1(\omega)$ pour $n \geq 1$.

La discrétisation de type Euler implicite en temps de l'équation de la chaleur avec des conditions de Dirichlet est d'ordre 1 [38, Partie I]. Nous adaptons ici la démonstration pour traiter les conditions aux limites de Robin.

Proposition 5.1.2.

Si la solution u de (5.1.1) vérifie $u \in C^2(\bar{\omega} \times [0,T])$ alors le schéma de discrétisation en temps (5.1.8) est convergent en norme $\|\cdot\|_{L^2}$ à l'ordre 1 avec

$$\sup_{0 \leq n \leq M} \|e^n\|_{L^2} = \sup_{0 \leq n \leq M} \|u(t^n) - u^n\|_{L^2} \leq \Delta t \frac{T\sqrt{|\omega|}}{2} \|u\|_{C^2}.$$

Démonstration. En définissant l'erreur de consistance

$$R^{n+1}(x) = \frac{u(x,t^{n+1}) - u(x,t^n)}{\Delta t} - \frac{\partial u}{\partial t}(x,t^{n+1})$$

pour $0 \leq n \leq M-1$, on a en utilisant l'inégalité de Taylor-Lagrange pour $u \in C^2$,

$$\left|u(x,t^n) - u(x,t^{n+1}) + \Delta t \frac{\partial u}{\partial t}(x,t^{n+1})\right| \leq \frac{\Delta t^2}{2}\|u\|_{C^2},$$

d'où

$$\|R^{n+1}\|_{L^\infty} \leq \frac{\Delta t}{2}\|u\|_{C^2},$$

et

$$\|R^{n+1}\|_{L^2} \leq \|R^{n+1}\|_{L^\infty}\sqrt{|\omega|} \leq \frac{\Delta t}{2}\sqrt{|\omega|}\|u\|_{C^2}. \tag{5.1.11}$$

À partir de l'équation de la chaleur (5.1.1), on a : $\forall v \in H^1(\omega)$,

$$\left\langle \frac{\partial u}{\partial t}(t^{n+1}), v \right\rangle_{L^2(\omega)} + a(u(t^{n+1}), v) = \langle f(t^{n+1}), v\rangle_{L^2(\omega)} + \int_{\partial\omega} g(t^{n+1}) v \, d\sigma,$$

avec les notations (5.1.10), que l'on peut réécrire

$$\begin{aligned}\langle u(t^{n+1}), v\rangle_{L^2(\omega)} + \Delta t\, a(u(t^{n+1}), v) = \langle u(t^n) + \Delta t R^{n+1} + \Delta t f(t^{n+1}), v\rangle_{L^2(\omega)} \\ + \Delta t \int_{\partial\omega} g(t^{n+1}) v \, d\sigma.\end{aligned} \tag{5.1.12}$$

En soustrayant (5.1.9) de (5.1.12) et en définissant l'erreur d'approximation au temps t^n par $e^n = u(t^n) - u^n$ pour $0 \leq n \leq M$, on obtient : $\forall 0 \leq n \leq M-1$, $\forall v \in H^1(\omega)$,

$$\langle e^{n+1}, v\rangle_{L^2(\omega)} + \Delta t\, a(e^{n+1}, v) = \langle e^n + \Delta t R^{n+1}, v\rangle_{L^2(\omega)}. \tag{5.1.13}$$

En prenant $v = e^{n+1} \in H^1(\omega)$ comme fonction test dans (5.1.13), on obtient

$$\begin{aligned}\|e^{n+1}\|_{L^2}^2 + \Delta t\Big(\|\nabla e^{n+1}\|_{L^2}^2 + \alpha \int_{\partial\omega} (e^{n+1})^2 \, d\sigma\Big) &= \int_\omega e^n e^{n+1} \, dx + \Delta t \int_\omega R^{n+1} e^{n+1} \, dx \\ &\leq \|e^n\|_{L^2}\|e^{n+1}\|_{L^2} + \Delta t \|R^{n+1}\|_{L^2}\|e^{n+1}\|_{L^2},\end{aligned}$$

d'où l'on déduit l'inégalité

$$\|e^{n+1}\|_{L^2} \leq \|e^n\|_{L^2} + \Delta t \|R^{n+1}\|_{L^2}. \tag{5.1.14}$$

Il s'ensuit, pour $0 \leq n \leq M-1$,

$$\begin{aligned}\|e^{n+1}\|_{L^2} &= \sum_{k=0}^{n} (\|e^{k+1}\|_{L^2} - \|e^k\|_{L^2}) && \text{(en utilisant } e^0 = u_0 - u^0 = 0) \\ &\leq \sum_{k=0}^{n} \Delta t \|R^{k+1}\|_{L^2} && \text{(en utilisant (5.1.14))} \\ &\leq \sum_{k=0}^{M-1} \Delta t \frac{\Delta t}{2}\sqrt{|\omega|}\|u\|_{C^2} && \text{(en utilisant (5.1.11))} \\ &\leq M \Delta t \frac{\Delta t}{2}\sqrt{|\omega|}\|u\|_{C^2} \\ &\leq T \frac{\Delta t}{2}\sqrt{|\omega|}\|u\|_{C^2} && \text{(en utilisant } M\Delta t = T).\end{aligned}$$

Finalement,

$$\sup_{0\leq n\leq M} \|e^n\|_{L^2} \leq \Delta t \frac{T\sqrt{|\omega|}}{2}\|u\|_{C^2}. \tag{5.1.15}$$

□

5.2 Application de la pénalisation

Comme pour le problème elliptique étudié au Chapitre 4, nous allons, avant de présenter la pénalisation proposée pour la prise en compte des deux conditions de Robin dans le domaine physique (Fig. 3.1.2 ou 3.3.1), commencer par considérer la prise en compte d'une seule des deux conditions de Robin du problème suivant :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f & x \in]0,1[,\ t \in]0,T[\\ -\dfrac{\partial u}{\partial x}(0,t) + \alpha u(0,t) = g(0,t) & t \in]0,T[\\ \dfrac{\partial u}{\partial x}(1,t) + \alpha u(1,t) = g(1,t) & t \in]0,T[\\ u(x,0) = u_0(x) & x \in]0,1[, \end{cases} \tag{5.2.1}$$

correspondant à l'équation de la chaleur avec des conditions aux limites de Robin (5.1.1) en dimension $N = 1$ avec $\omega =]0,1[$. Plus précisément, on va imposer la condition en $x = 1$ par pénalisation. Le domaine considéré en espace est celui de la Fig. 3.3.4.

La discrétisation en temps (5.1.8) appliquée au problème (5.2.1) conduit à

$$\begin{cases} -u^{n+1\prime\prime} + \dfrac{1}{\Delta t} u^{n+1} = f(t^{n+1}) + \dfrac{1}{\Delta t} u^n \quad \text{dans }]0,1[\\ -u^{n+1\prime}(0) + \alpha u^{n+1}(0) = g(0,t^{n+1}),\ \ u^{n+1\prime}(1) + \alpha u^{n+1}(1) = g(1,t^{n+1}) \\ u^0 = u_0, \end{cases} \tag{5.2.2}$$

qui est une succession de problèmes elliptiques de type réaction-diffusion. En nous basant sur l'étude du problème elliptique présentée au chapitre précédent, nous proposons la pénalisation suivante :

$$\begin{cases} -u_\eta^{n+1\prime\prime} + \dfrac{1}{\Delta t} u_\eta^{n+1} + \dfrac{\chi}{\eta}(u_\eta^{n+1\prime} + \alpha u_\eta^{n+1} - g(1,t^{n+1})) \\ \qquad\qquad = (1-\chi)\Big(f(t^{n+1}) + \dfrac{1}{\Delta t} u_\eta^n\Big) \quad \text{dans }]0,2[\\ -u_\eta^{n+1\prime}(0) + \alpha u_\eta^{n+1}(0) = g(0,t^{n+1}),\ \ u_\eta^{n+1\prime}(2) + \alpha u_\eta^{n+1}(2) = g(1,t^{n+1}) \\ u_\eta^0 = (1-\chi) u_0, \end{cases} \tag{5.2.3}$$

où de nouveau $\eta > 0$ est le paramètre de pénalisation et χ est la fonction caractéristique de $]1,2[$. En utilisant la Proposition 4.2.1 (qui reste valable avec des coefficients non unitaires), la suite $(u_\eta^n)_{0\le n\le M}$ est définie de façon unique et $u_\eta^n \in C^1([0,2])$ pour $n \ge 1$.

Proposition 5.2.1.

Pour tout $\Delta t > 0$, on a

$$\sup_{0\le n\le M} \|u_\eta^n - u^n\|_{H^1(]0,1[)} \underset{\eta\to 0^+}{\le} C_{\Delta t}\, \eta. \tag{5.2.4}$$

Démonstration. Soit $\Delta t > 0$ fixé, nous allons montrer par récurrence sur n que

$$\forall 0 \le n \le M, \quad \|u_\eta^n - u^n\|_{H^1(]0,1[)} \underset{\eta\to 0^+}{\le} C_{n,\Delta t}\, \eta.$$

Comme $u_\eta^0 = u_0 = u^0$ dans $]0,1[$, la propriété est vraie pour $n = 0$. Supposons que $\|u_\eta^n - u^n\|_{H^1(]0,1[)} \underset{\eta\to 0^+}{\leq} C_{n,\Delta t}\,\eta$ pour un certain entier $n \geq 0$. En introduisant v_η^{n+1} solution de

$$\begin{cases} -v_\eta^{n+1\prime\prime} + \dfrac{1}{\Delta t} v_\eta^{n+1} + \dfrac{\chi}{\eta}(v_\eta^{n+1\prime} + \alpha v_\eta^{n+1} - g(1,t^{n+1})) \\ \qquad\qquad = (1-\chi)\Big(f(t^{n+1}) + \dfrac{1}{\Delta t} u^n\Big) \quad \text{dans }]0,2[\\ -v_\eta^{n+1\prime}(0) + \alpha v_\eta^{n+1}(0) = g(0,t^{n+1}),\ v_\eta^{n+1\prime}(2) + \alpha v_\eta^{n+1}(2) = g(1,t^{n+1}), \end{cases}$$

on a $\|v_\eta^{n+1} - u^{n+1}\|_{H^1(]0,1[)} \underset{\eta\to 0^+}{\leq} C'_{n,\Delta t}\,\eta$ en utilisant la Proposition 4.2.4 (qui reste valable avec des coefficients non unitaires). En posant $w_\eta^{n+1} = u_\eta^{n+1} - v_\eta^{n+1}$, w_η^{n+1} est solution de

$$\begin{cases} -w_\eta^{n+1\prime\prime} + \dfrac{1}{\Delta t} w_\eta^{n+1} + \dfrac{\chi}{\eta}(w_\eta^{n+1\prime} + \alpha w_\eta^{n+1}) = (1-\chi)\Big(\dfrac{1}{\Delta t}(u_\eta^n - u^n)\Big) \quad \text{dans }]0,2[\\ -w_\eta^{n+1\prime}(0) + \alpha w_\eta^{n+1}(0) = 0,\ w_\eta^{n+1\prime}(2) + \alpha w_\eta^{n+1}(2) = 0. \end{cases}$$

En reprenant la démonstration de la Proposition 4.2.5, on obtient ici aussi un résultat de dépendance continue par rapport aux données dans $]0,1[$:

$$\begin{aligned} \|w_\eta^{n+1}\|_{H^1(]0,1[)} &\underset{\eta\to 0^+}{\leq} C''_{\Delta t} \Big\| \frac{1}{\Delta t}(u_\eta^n - u^n)\Big\|_{L^2(]0,1[)} \\ &\underset{\eta\to 0^+}{\leq} C'''_{\Delta t} \|u_\eta^n - u^n\|_{H^1(]0,1[)} \\ &\underset{\eta\to 0^+}{\leq} C'''_{\Delta t} C_{n,\Delta t}\,\eta \qquad\qquad \text{(par hypothèse de récurrence).} \end{aligned}$$

On en déduit

$$\begin{aligned} \|u_\eta^{n+1} - u^{n+1}\|_{H^1(]0,1[)} &\leq \|u_\eta^{n+1} - v_\eta^{n+1}\|_{H^1(]0,1[)} + \|v_\eta^{n+1} - u^{n+1}\|_{H^1(]0,1[)} \\ &\underset{\eta\to 0^+}{\leq} (C'''_{\Delta t} C_{n,\Delta t} + C'_{n,\Delta t})\eta, \end{aligned}$$

d'où

$$\|u_\eta^{n+1} - u^{n+1}\|_{H^1(]0,1[)} \underset{\eta\to 0^+}{\leq} C_{n+1,\Delta t}\,\eta.$$

Par récurrence, la propriété $\|u_\eta^n - u^n\|_{H^1(]0,1[)} \underset{\eta\to 0^+}{\leq} C_{n,\Delta t}\,\eta$ est vraie pour tout $0 \leq n \leq M$.

Finalement, on obtient le résultat annoncé avec $C_{\Delta t} = \sup_{0\leq n\leq M} C_{n,\Delta t}$. □

5.3 Pénalisation du problème physique

Le problème physique modèle auquel on s'intéresse est l'équation de la chaleur linéaire :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f & x \in]0, x_l[\cup]x_r, 1[,\ t \in]0,T[\\ \dfrac{\partial u}{\partial x}(x_l,t) + \alpha u(x_l,t) = g(x_l,t) & t \in]0,T[\\ -\dfrac{\partial u}{\partial x}(x_r,t) + \alpha u(x_r,t) = g(x_r,t) & t \in]0,T[\\ u(0,t) = u(1,t),\ \dfrac{\partial u}{\partial x}(0,t) = \dfrac{\partial u}{\partial x}(1,t) & t \in]0,T[\\ u(x,0) = u_0(x) & x \in]0, x_l[\cup]x_r, 1[. \end{cases} \tag{5.3.1}$$

Pour la pénalisation du problème physique (5.3.1) posé dans le domaine physique (Fig. 3.1.2 ou 3.3.1), nous suivons donc les étapes suivantes.

1. On commence par discrétiser en temps le problème avec le schéma d'Euler implicite :

$$\begin{cases} \dfrac{u^{n+1}-u^n}{\Delta t} - u^{n+1\prime\prime} = f(t^{n+1}) \quad \text{dans }]0,x_l[\cup]x_r,1[\\ u^{n+1\prime}(x_l) + \alpha u^{n+1}(x_l) = g(x_l,t^{n+1}) \\ -u^{n+1\prime}(x_r) + \alpha u^{n+1}(x_r) = g(x_r,t^{n+1}) \\ u^{n+1}(0) = u^{n+1}(1),\ u^{n+1\prime}(0) = u^{n+1\prime}(1) \\ u^0 = u_0. \end{cases} \tag{5.3.2}$$

2. On applique ensuite la méthode de pénalisation proposée à la succession de problèmes elliptiques obtenus :

$$\begin{cases} -u_\eta^{n+1\prime\prime} + \dfrac{1}{\Delta t}u_\eta^{n+1} + \dfrac{\chi_l}{\eta}(u_\eta^{n+1\prime} + \alpha u_\eta^{n+1} - g(x_l,t^{n+1})) \\ \qquad + \dfrac{\chi_r}{\eta}(-u_\eta^{n+1\prime} + \alpha u_\eta^{n+1} - g(x_r,t^{n+1})) = (1-\chi)\Big(f(t^{n+1}) + \dfrac{1}{\Delta t}u_\eta^n\Big) \quad \text{dans }]0,1[\\ u_\eta^{n+1}(0) = u_\eta^{n+1}(1),\ u_\eta^{n+1\prime}(0) = u_\eta^{n+1\prime}(1) \\ u_\eta^0 = (1-\chi)u_0. \end{cases} \tag{5.3.3}$$

   Le domaine considéré en espace est celui de la Fig. 3.3.3.

5.4 Méthode numérique

À présent, il nous faut approcher numériquement la solution du problème pénalisé (5.3.3) à chaque pas de temps Δt. On va utiliser pour cela un schéma aux différences finies en considérant une subdivision uniforme $(x_i)_{1\le i\le N+1}$ de $[0,1]$ de pas de discrétisation en espace h.

5.4.1 Schéma d'ordre 1

Le problème pénalisé (5.3.3) étant une succession de problèmes elliptiques, on utilise pour la discrétisation en espace le même schéma d'ordre 1 introduit au chapitre précédent. Dans ce schéma, les dérivées premières sont discrétisées à l'ordre 1 de façon décentrée. Le premier schéma de discrétisation en espace qu'on considère est donc le suivant :

$$\begin{cases} -\dfrac{U_{i+1}^{n+1}-2U_i^{n+1}+U_{i-1}^{n+1}}{h^2} + \dfrac{U_i^{n+1}}{\Delta t} + \dfrac{\chi_l(x_i)}{\eta}\Big(\dfrac{U_i^{n+1}-U_{i-1}^{n+1}}{h} + \alpha U_i^{n+1} - g_l^{n+1}\Big) \\ \quad + \dfrac{\chi_r(x_i)}{\eta}\Big(-\dfrac{U_{i+1}^{n+1}-U_i^{n+1}}{h} + \alpha U_i^{n+1} - g_r^{n+1}\Big) = (1-\chi(x_i))\Big(f(x_i,t^{n+1}) + \dfrac{U_i^n}{\Delta t}\Big) \\ U_0^{n+1} = U_N^{n+1},\ U_1^{n+1} = U_{N+1}^{n+1} \\ U_i^0 = (1-\chi(x_i))u_0(x_i), \end{cases} \tag{5.4.1}$$

pour $i = 1,\dots,N$ et $n = 0,\dots,M-1$.

Ce schéma conduit à chaque pas de temps au système linéaire :

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 & a_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ c_N & 0 & \cdots & 0 & a_N & b_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ U_{N-1}^{n+1} \\ U_N^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1^n \\ r_2^n \\ \vdots \\ \vdots \\ r_{N-1}^n \\ r_N^n \end{pmatrix}, \tag{5.4.2}$$

avec

- $a_i = -\frac{\Delta t}{h^2} - \frac{\chi_l(x_i)}{\eta}\frac{\Delta t}{h}$;
- $b_i = 1 + \frac{2\Delta t}{h^2} + \Delta t \frac{\chi_l(x_i)+\chi_r(x_i)}{\eta}(\frac{1}{h} + \alpha)$;
- $c_i = -\frac{\Delta t}{h^2} - \frac{\chi_r(x_i)}{\eta}\frac{\Delta t}{h}$;
- $r_i^n = (1-\chi(x_i))(\Delta t f(x_i, t^{n+1}) + U_i^n) + \Delta t \frac{\chi_l(x_i)}{\eta} g_l^{n+1} + \Delta t \frac{\chi_r(x_i)}{\eta} g_r^{n+1}$.

On note ce système $A_h U_h^{n+1} = B_h U_h^n + C_h^n$.

Proposition 5.4.1.

Pour tous $\Delta t, \eta > 0$, si la solution u_η^n de (5.3.3) vérifie $u_\eta^n \in C^3(\mathbb{R})$ pour tout $0 \le n \le M$ alors le schéma de discrétisation en espace (5.4.1) est convergent en norme $\|\cdot\|_\infty$ à l'ordre 1 avec

$$\sup_{0\le n\le M} \|\mathcal{U}_h^n - U_h^n\|_\infty \le C_{\Delta t,\eta}\, h, \tag{5.4.3}$$

où $\mathcal{U}_h^n = (u_\eta^n(x_1), \dots, u_\eta^n(x_N))^T$ et $C_{\Delta t,\eta}$ est une constante indépendante de h.

Démonstration. En définissant l'erreur de consistance à l'instant $n+1$ par

$$\varepsilon_h^{n+1} = \frac{1}{\Delta t}(A_h \mathcal{U}_h^{n+1} - B_h \mathcal{U}_h^n - C_h^n),$$

on obtient, en procédant comme dans le cas elliptique (cf. Lemme 4.4.3),

$$\begin{aligned} \|\varepsilon_h^{n+1}\|_\infty &\le h\Big(\frac{1}{\eta}\max_{0\le x\le 1}|u_\eta^{n+1\prime\prime}(x)| + \frac{1}{3}\max_{0\le x\le 1}|u_\eta^{n+1(3)}(x)|\Big) \\ &\le C_{n+1,\Delta t,\eta}\, h. \end{aligned}$$

On a donc $A_h e_h^{n+1} = B_h e_h^n + \Delta t\, \varepsilon_h^{n+1}$ où $e_h^n = \mathcal{U}_h^n - U_h^n$. On obtient, comme dans le cas elliptique, l'inversibilité et la stabilité de la matrice A_h en norme $\|\cdot\|_\infty$: $\|A_h^{-1}\|_\infty \le 1$ (cf. Lemme 4.4.1 et Lemme 4.4.2). On a aussi $\|B_h\|_\infty \le 1$. Ainsi,

$$\|e_h^{n+1}\|_\infty \le \|e_h^n\|_\infty + \Delta t \|\varepsilon_h^{n+1}\|_\infty,$$

d'où, pour tout $0 \leq n \leq M-1$,

$$\begin{aligned}\|e_h^{n+1}\|_\infty &= \sum_{k=0}^{n} \|e_h^{k+1} - e_h^k\|_\infty \\ &\leq \sum_{k=0}^{n} \Delta t \|\varepsilon_h^{k+1}\|_\infty \\ &\leq \Delta t \sum_{k=0}^{M-1} C_{k+1,\Delta t,\eta}\, h.\end{aligned}$$

Finalement,

$$\sup_{0\leq n\leq M} \|e_h^n\|_\infty \leq C_{\Delta t,\eta}\, h, \tag{5.4.4}$$

avec $C_{\Delta t,\eta} = \Delta t \sum_{k=0}^{M-1} C_{k+1,\Delta t,\eta}$. □

5.4.2 Schéma de Crank-Nicolson

Pour améliorer la précision de l'approximation, on utilise aussi la méthode de Crank-Nicolson, qui est d'ordre 2 en espace et en temps. Le schéma de Crank-Nicolson appliqué ici sur la pénalisation du problème (5.3.1) directement et en discrétisant les dérivées premières $\frac{\partial u}{\partial x}$ à l'ordre 2 de façon décentrée (LUD), se présente sous la forme :

$$\begin{cases} \dfrac{U_i^{n+1}-U_i^n}{\Delta t} + \dfrac{1}{2}\Big[- \dfrac{U_{i+1}^{n+1} - 2U_i^{n+1} + U_{i-1}^{n+1}}{h^2} \\ \qquad + \dfrac{\chi_l(x_i)}{\eta}\Big(\dfrac{3U_i^{n+1} - 4U_{i-1}^{n+1} + U_{i-2}^{n+1}}{2h} + \alpha U_i^{n+1} - g_l^{n+1}\Big) \\ \qquad + \dfrac{\chi_r(x_i)}{\eta}\Big(-\dfrac{-U_{i+2}^{n+1} + 4U_{i+1}^{n+1} - 3U_i^{n+1}}{2h} + \alpha U_i^{n+1} - g_r^{n+1}\Big) \\ \qquad - \dfrac{U_{i+1}^{n} - 2U_i^{n} + U_{i-1}^{n}}{h^2} \\ \qquad + \dfrac{\chi_l(x_i)}{\eta}\Big(\dfrac{3U_i^{n} - 4U_{i-1}^{n} + U_{i-2}^{n}}{2h} + \alpha U_i^{n} - g_l^{n}\Big) \\ \qquad + \dfrac{\chi_r(x_i)}{\eta}\Big(-\dfrac{-U_{i+2}^{n} + 4U_{i+1}^{n} - 3U_i^{n}}{2h} + \alpha U_i^{n} - g_r^{n}\Big)\Big] \\ \qquad = \dfrac{1}{2}(1-\chi(x_i))(f(x_i,t^{n+1}) + f(x_i,t^n)) \\ U_i^{n+1} = U_{N+i}^{n+1} \\ U_i^0 = (1-\chi(x_i))u_0(x_i), \end{cases} \tag{5.4.5}$$

pour $i = 1,\dots,N$ et $n = 0,\dots,M-1$.

Ce schéma conduit à chaque pas de temps à un système linéaire $A_h U_h^{n+1} = r_h^n$ où A_h est une matrice pentadiagonale périodique $(c_{-2}, c_{-1}, c_0, c_1, c_2)$ avec

- $c_{-2_i} = \frac{1}{2}\big(\frac{\chi_l(x_i)}{\eta}\frac{\Delta t}{2h}\big)$;
- $c_{-1_i} = \frac{1}{2}\big(-\frac{\Delta t}{h^2} - \frac{\chi_l(x_i)}{\eta}\frac{2\Delta t}{h}\big)$;
- $c_{0_i} = 1 + \frac{1}{2}\big(\frac{2\Delta t}{h^2} + \Delta t\frac{\chi_l(x_i)+\chi_r(x_i)}{\eta}(\frac{3}{2h} + \alpha)\big)$;
- $c_{1_i} = \frac{1}{2}\big(-\frac{\Delta t}{h^2} - \frac{\chi_r(x_i)}{\eta}\frac{2\Delta t}{h}\big)$;

– $c_{2i} = \frac{1}{2}\big(\frac{\chi_r(x_i)}{\eta}\frac{\Delta t}{2h}\big)$;

– $r_i^n = \frac{1}{2}\Delta t(1-\chi(x_i))(f(x_i,t^{n+1})+f(x_i,t^n)) + U_i^n + \frac{1}{2}\Delta t\Big[\frac{\chi_l(x_i)}{\eta}g_l^{n+1} + \frac{\chi_r(x_i)}{\eta}g_r^{n+1}\Big] - \frac{1}{2}\Delta t\Big[-\frac{U_{i+1}^n-2U_i^n+U_{i-1}^n}{h^2} + \frac{\chi_l(x_i)}{\eta}\big(\frac{3U_i^n-4U_{i-1}^n+U_{i-2}^n}{2h}+\alpha U_i^n - g_l^n\big) + \frac{\chi_r(x_i)}{\eta}\big(-\frac{-U_{i+2}^n+4U_{i+1}^n-3U_i^n}{2h}+ \alpha U_i^n - g_r^n\big)\Big]$.

5.5 Résultats numériques

5.5.1 Solutions de référence

Pour tester les différents schémas aux différences finies présentés dans la section précédente 5.4, une famille de solutions du problème original (5.3.1) est obtenue de la façon suivante.

– Le problème (5.3.1) ramené sur $]0,1[\times]0,T[$ s'écrit

$$\begin{cases} \dfrac{\partial U}{\partial t} - \Big(\dfrac{1}{2x_l}\Big)^2\dfrac{\partial^2 U}{\partial X^2} = F & X\in]0,1[,\ t\in]0,T[\\ -\dfrac{1}{2x_l}\dfrac{\partial U}{\partial X}(0,t) + \alpha U(0,t) = g_r(t) & t\in]0,T[\\ \dfrac{1}{2x_l}\dfrac{\partial U}{\partial X}(1,t) + \alpha U(1,t) = g_l(t) & t\in]0,T[\\ U(X,0) = U_0(X) & X\in]0,1[, \end{cases} \tag{5.5.1}$$

les correspondances avec le problème physique étant données par $X = \frac{x}{2x_l} + \frac{1}{2}$, $u(x,t) = U(X,t)$, $u_0(x,t) = U_0(X,t)$ et $f(x,t) = F(X,t)$ pour $x\in]-x_l,x_l[$. Voir Fig. 3.3.1 et 3.3.2 pour un rappel des transformations effectuées.

– On cherche une solution de la forme $U(X,t) = (1-e^{-kt})H(X)$ avec $k>0$ de façon à avoir $U(X,t) \xrightarrow[t\to\infty]{} H(X)$ solution stationnaire.

– On choisit $H(X)$ vérifiant

$$\begin{cases} -\dfrac{1}{2x_l}H'(0) + \alpha H(0) = g_r \\ \dfrac{1}{2x_l}H'(1) + \alpha H(1) = g_l. \end{cases}$$

Ce faisant, U est la solution du problème (5.5.1) avec les données suivantes :

$$\begin{aligned} &F(X,t) = ke^{-kt}H(X) - (1-e^{-kt})\Big(\frac{1}{2x_l}\Big)^2 H''(X), \\ &U_0(X) = 0, \\ &g_r(t) = (1-e^{-kt})g_r, \\ &g_l(t) = (1-e^{-kt})g_l. \end{aligned}$$

On peut choisir par exemple pour H un polynôme de degré 3, on obtient dans ce cas $H(X) = AX^3 + BX^2 + CX + D$ avec

$$\begin{aligned} A &= 2(H(0) - H(1))(1 + \alpha x_l) + 2x_l(g_l - g_r), \\ B &= H(1)(3 + 2\alpha x_l) - H(0)(3 + 4\alpha x_l) + 2x_l(2g_r - g_l), \\ C &= 2x_l(H(0)\alpha - g_r), \\ D &= H(0). \end{aligned}$$

Pour les tests numériques qui suivent, trois types de conditions aux limites sont considérés :

1. Conditions de Neumann homogènes : $g_l = 0$, $g_r = 0$, $\alpha = 0$, $H(0) = 0$, $H(1) = 1$, $k = 10$;
2. Conditions de Neumann non homogènes : $g_l = -1$, $g_r = 2$, $\alpha = 0$, $H(0) = 0$, $H(1) = 1$, $k = 10$;
3. Conditions de Robin : $g_l = 2$, $g_r = 3$, $\alpha = 1$, $H(0) = 0$, $H(1) = 1$, $k = 10$.

5.5.2 Tests numériques

Nous comparons les solutions numériques du problème pénalisé, obtenues avec le schéma (5.4.1) (ordre 1 en temps et en espace) ou le schéma de Crank-Nicolson (5.4.5) (ordre 2 en temps et en espace), à la solution exacte du problème original (5.3.1) dans le domaine fluide $[0, x_l] \cup [x_r, 1]$. On considère différents types de conditions aux limites :

- Test 1 : conditions de Neumann homogènes (Fig. 5.5.1 et 5.5.2).
- Test 2 : conditions de Neumann non homogènes (Fig. 5.5.3 et 5.5.4).
- Test 3 : conditions de Robin (Fig. 5.5.5 et 5.5.6).

On choisit ici $d = 0.1$ (les bords de l'obstacle sont alors $x_l = 0.45$ et $x_r = 0.55$) et $\Delta_l = \Delta_r = 0.3d$. Pour les différentes fonctions caractéristiques, on prend des intervalles fermés $\chi = \chi_{[x_l, x_r]}$, $\chi_l = \chi_{[x_l, x_l + \Delta_l]}$ et $\chi_r = \chi_{[x_r - \Delta_r, x_r]}$.

On se place à l'instant final $T = 1$ et on s'intéresse à l'erreur $\|u(x_i, T) - U_{h,i}^M\|$ dans le domaine fluide (i.e. pour $x_i \in [0, x_l] \cup [x_r, 1]$). L'erreur est ici une fonction de Δt, η et h. Ainsi, comme

$$\|u(x_i, T) - U_{h,i}^M\| \leq \|u(x_i, T) - u^M(x_i)\| + \|u^M(x_i) - u_\eta^M(x_i)\| + \|u_\eta^M(x_i) - U_{h,i}^M\|,$$

il y a trois sources d'erreurs :

- $\|u(x_i, T) - u^M(x_i)\|$ est une erreur liée à la discrétisation en temps,
- $\|u^M(x_i) - u_\eta^M(x_i)\|$ est une erreur introduite par la pénalisation,
- $\|u_\eta^M(x_i) - U_{h,i}^M\|$ est une erreur liée à la discrétisation en espace.

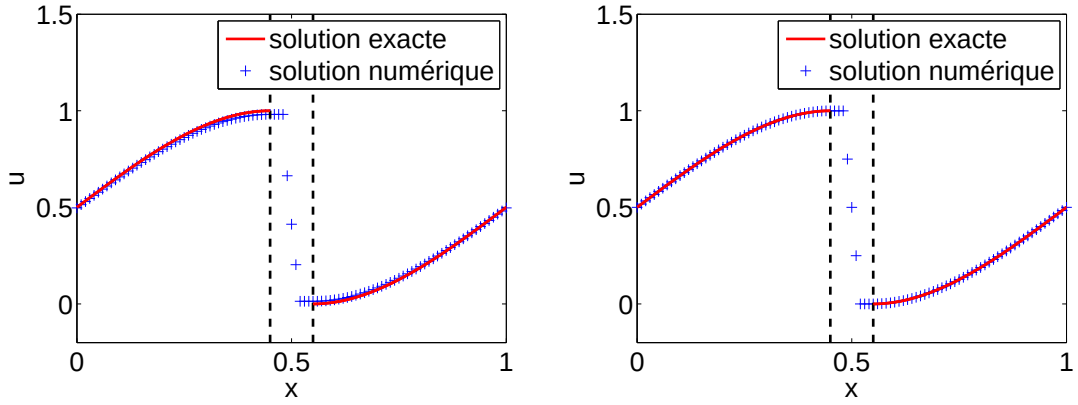
Formellement on a

$$\|u(x_i, T) - U_{h,i}^M\|_\infty \leq C\Delta t^q + C_{\Delta t}\eta + C_{\Delta t, \eta} h^p,$$

pour un schéma d'ordre p en espace et d'ordre q en temps, si la discrétisation en espace est adaptée à l'obstacle.

Pour vérifier ces estimations, nous traçons l'erreur commise dans le domaine fluide en fixant 2 des 3 paramètres $(\Delta t, \eta, h)$ assez petits et en faisant varier le troisième. Dans les courbes obtenues, on retrouve bien l'ordre prévu en espace en traçant l'erreur en fonction de h (Fig. 5.5.2a, 5.5.4a et 5.5.6a), ainsi que la décroissance en η de l'erreur de pénalisation en traçant l'erreur en fonction du paramètre η (Fig. 5.5.2b, 5.5.4b et 5.5.6b). Ces tests semblent montrer que les constantes $C_{\Delta t}$ et $C_{\Delta t,\eta}$ n'explosent pas lorsque $\Delta t, \eta \to 0$. De plus, l'utilisation des schémas d'Euler implicite et de Crank-Nicolson qui sont inconditionnellement stables (en normes $\|\cdot\|_\infty$ et $\|\cdot\|_2$ pour Euler implicite, en norme $\|\cdot\|_2$ pour Crank-Nicolson, pour l'équation de la chaleur) permet de s'affranchir d'une condition de stabilité qui pourrait être assez restrictive en pratique dans le contexte de pénalisation. En effet, le paramètre de pénalisation η étant destiné à tendre vers 0 pour approcher la solution du problème original, les termes de pénalisation introduisent des termes de convection prédominant sur le terme de diffusion. On s'attend donc à ce que l'utilisation d'une discrétisation purement explicite pour les termes de pénalisation, en optant pour une discrétisation décentrée, conduise à une condition de stabilité CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) avec une dépendance en η du type $\frac{1}{\eta}\Delta t \leq \Delta x$.

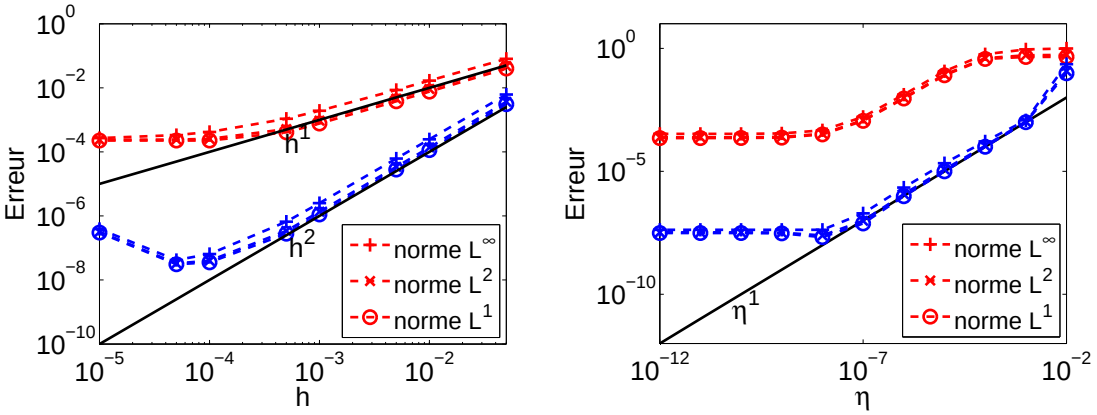
Test 1. Conditions de Neumann homogènes



(a) Schéma d'ordre 1 (5.4.1)

(b) Schéma de Crank-Nicolson (5.4.5)

FIG. 5.5.1: Comparaison entre la solution numérique du problème parabolique pénalisé en utilisant un schéma aux différences finies et la solution exacte du problème original (5.3.1) avec des conditions de Neumann homogènes à $T = 1$. On a choisi $\Delta t = 10^{-3}$, $\eta = 10^{-10}$ et $h = 10^{-2}$.

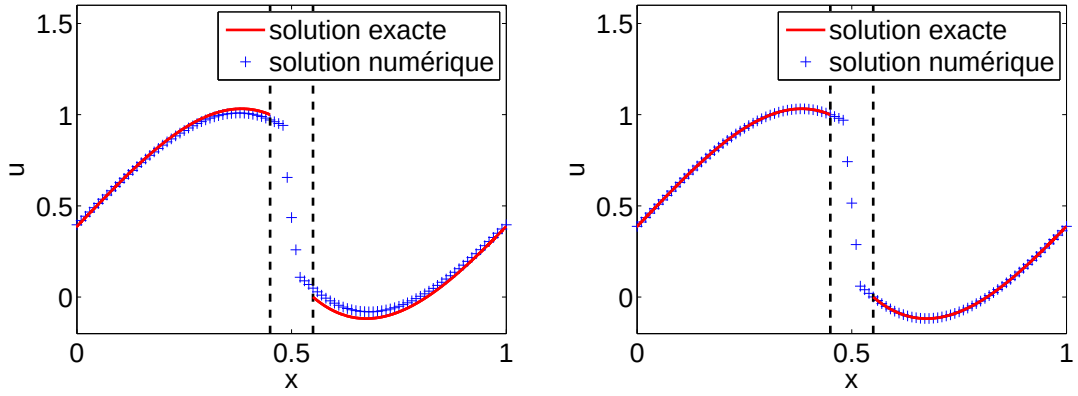


(a) $\Delta t = 10^{-4}$, $\eta = 10^{-10}$

(b) $\Delta t = 10^{-4}$, $h = 5 \times 10^{-5}$

FIG. 5.5.2: Erreur dans le domaine fluide entre la solution numérique du problème parabolique pénalisé, en utilisant le schéma d'ordre 1 (5.4.1) (en rouge) ou le schéma de Crank-Nicolson (5.4.5) (en bleu), et la solution exacte du problème original (5.3.1) avec des conditions de Neumann homogènes à $T = 1$.

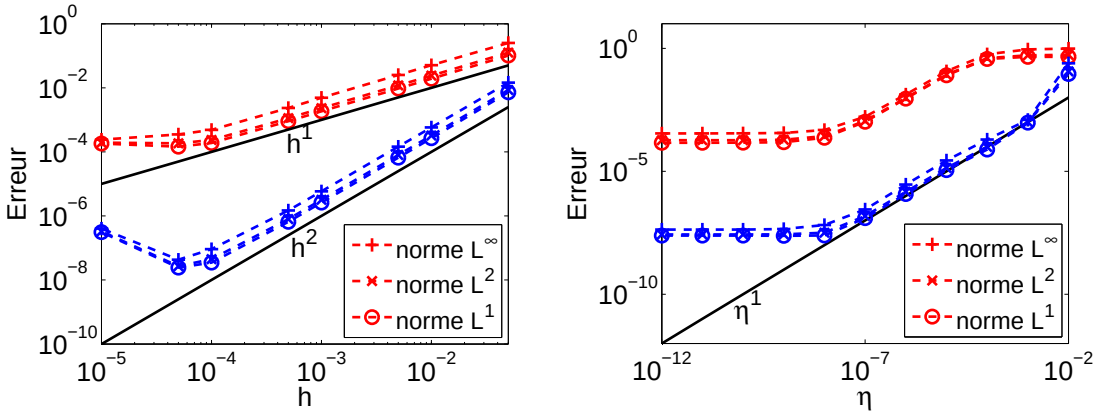
Test 2. Conditions de Neumann non homogènes



(a) Schéma d'ordre 1 (5.4.1)

(b) Schéma de Crank-Nicolson (5.4.5)

FIG. 5.5.3: Comparaison entre la solution numérique du problème parabolique pénalisé en utilisant un schéma aux différences finies et la solution exacte du problème original (5.3.1) avec des conditions de Neumann non homogènes à $T = 1$. On a choisi $\Delta t = 10^{-3}$, $\eta = 10^{-10}$ et $h = 10^{-2}$.

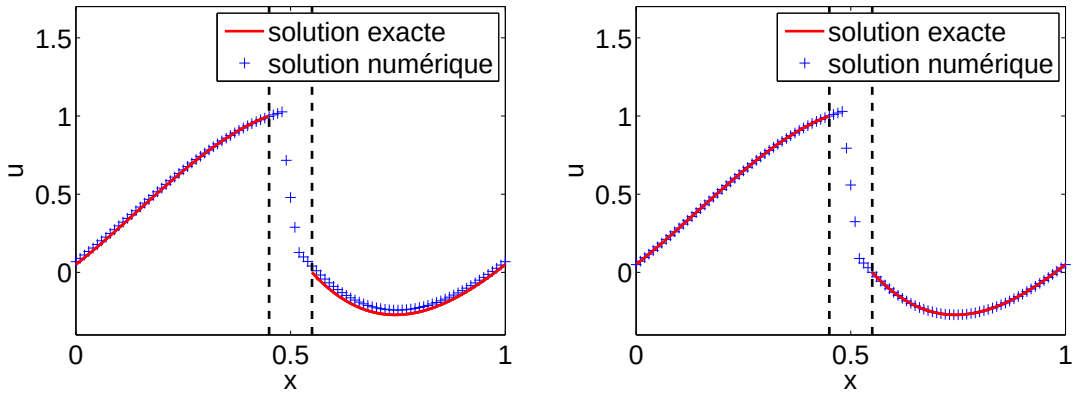


(a) $\Delta t = 10^{-4}$, $\eta = 10^{-10}$

(b) $\Delta t = 10^{-4}$, $h = 5 \times 10^{-5}$

FIG. 5.5.4: Erreur dans le domaine fluide entre la solution numérique du problème parabolique pénalisé, en utilisant le schéma d'ordre 1 (5.4.1) (en rouge) ou le schéma de Crank-Nicolson (5.4.5) (en bleu), et la solution exacte du problème original (5.3.1) avec des conditions de Neumann non homogènes à $T = 1$.

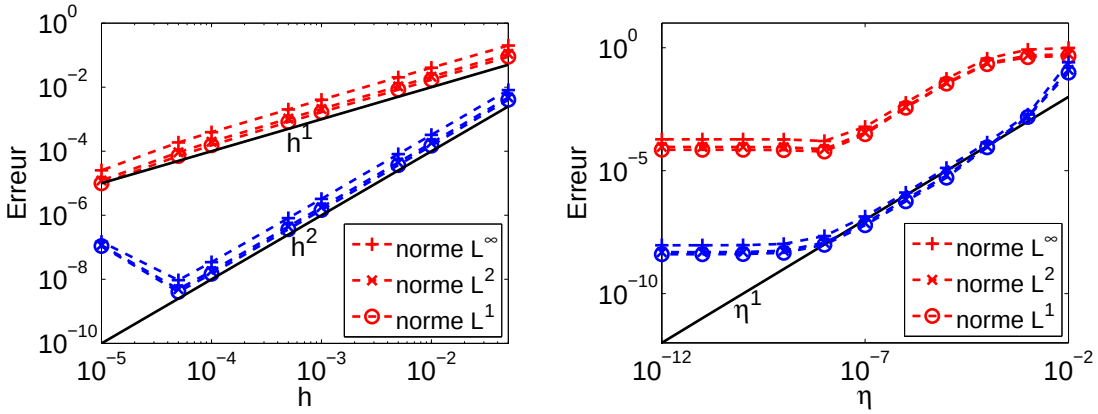
Test 3. Conditions de Robin



(a) Schéma d'ordre 1 (5.4.1)

(b) Schéma de Crank-Nicolson (5.4.5)

FIG. 5.5.5: Comparaison entre la solution numérique du problème parabolique pénalisé en utilisant un schéma aux différences finies et la solution exacte du problème original (5.3.1) avec des conditions de Robin à $T = 1$. On a choisi $\Delta t = 10^{-3}$, $\eta = 10^{-10}$ et $h = 10^{-2}$.



(a) $\Delta t = 10^{-4}$, $\eta = 10^{-10}$

(b) $\Delta t = 10^{-4}$, $h = 5 \times 10^{-5}$

FIG. 5.5.6: Erreur dans le domaine fluide entre la solution numérique du problème parabolique pénalisé, en utilisant le schéma d'ordre 1 (5.4.1) (en rouge) ou le schéma de Crank-Nicolson (5.4.5) (en bleu), et la solution exacte du problème original (5.3.1) avec des conditions de Robin à $T = 1$.

6 Applications et ouvertures

6.1 Problème non linéaire

Nous nous proposons ici d'appliquer la méthode de pénalisation / différences finies développée précédemment à l'équation d'advection-diffusion non linéaire :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} + \dfrac{\partial}{\partial x}(v(x)u) = \nu \dfrac{\partial}{\partial x}\Big(u^{5/2}\dfrac{\partial u}{\partial x}\Big) + f & x \in]0, x_l[\cup]x_r, 1[,\ t \in]0, T[\\ u^{5/2}\dfrac{\partial u}{\partial x}(x_l, t) + \alpha u(x_l, t) = g(x_l, t) & t \in]0, T[\\ -u^{5/2}\dfrac{\partial u}{\partial x}(x_r, t) + \alpha u(x_r, t) = g(x_r, t) & t \in]0, T[\\ u(0, t) = u(1, t),\ \dfrac{\partial u}{\partial x}(0, t) = \dfrac{\partial u}{\partial x}(1, t) & t \in]0, T[\\ u(x, 0) = u_0(x) & x \in]0, x_l[\cup]x_r, 1[. \end{cases} \tag{6.1.1}$$

Ce problème est considéré ici comme un modèle simplifié de l'évolution, le long d'une ligne de champ magnétique, de la température d'un plasma en contact avec un obstacle (limiteur) suivant des conditions aux limites de type Robin aux bords de l'obstacle, décrite dans le système (3.1.1).

6.1.1 Discrétisation

Un traitement numérique possible du problème (6.1.1), en suivant l'approche que nous avons précédemment développée, est le suivant :

- le terme d'advection est approché explicitement avec un schéma décentré (upwind) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}(v(x)u)\Big|_{x_i, t^n} &\approx \frac{v(x_{i+1/2})u(x_{i+1/2}, t^n) - v(x_{i-1/2})u(x_{i-1/2}, t^n)}{h} \\ &\approx \frac{F_{i+1/2}(U^n) - F_{i-1/2}(U^n)}{h}, \end{aligned}$$

  où

$$F_{i+1/2}(U^n) = \begin{cases} v_\chi(x_{i+1/2})U_i^n & \text{si } v_\chi(x_{i+1/2}) \geq 0 \\ v_\chi(x_{i+1/2})U_{i+1}^n & \text{si } v_\chi(x_{i+1/2}) < 0, \end{cases}$$

  $v_\chi(x)$ désignant $(1 - \chi(x))v(x)$,

- les termes de pénalisation, non linéaires, sont traités de façon semi-implicite avec un schéma décentré (upwind),

- le terme de diffusion, non linéaire, est approché de manière semi-implicite :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}\Big(u^{5/2}\frac{\partial u}{\partial x}\Big)\Big|_{x_i, t^{n+1}} &\approx \frac{1}{h}\Big(\Big(u^{5/2}\frac{\partial u}{\partial x}\Big)(x_{i+1/2}, t^{n+1}) - \Big(u^{5/2}\frac{\partial u}{\partial x}\Big)(x_{i-1/2}, t^{n+1})\Big) \\ &\approx \frac{1}{h}\Big(m_{i+1/2}(U^n)\frac{U_{i+1}^{n+1} - U_i^{n+1}}{h} - m_{i-1/2}(U^n)\frac{U_i^{n+1} - U_{i-1}^{n+1}}{h}\Big), \end{aligned}$$

où

$$m_{i+1/2}(U^n) = \frac{1}{2}((U_i^n)^{5/2} + (U_{i+1}^n)^{5/2}).$$

Le schéma complet s'écrit, pour $i = 1, \dots, N$ $(Nh = 1)$ et $n = 0, \dots, M-1$ $(M\Delta t = T)$,

$$\begin{cases} \dfrac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} + \dfrac{F_{i+1/2}(U^n) - F_{i-1/2}(U^n)}{h} \\ \qquad + \dfrac{\chi_l(x_i)}{\eta}\Big((U_i^n)^{5/2}\dfrac{U_i^{n+1} - U_{i-1}^{n+1}}{h} + \alpha U_i^{n+1} - g_l^{n+1}\Big) \\ \qquad + \dfrac{\chi_r(x_i)}{\eta}\Big(-(U_i^n)^{5/2}\dfrac{U_{i+1}^{n+1} - U_i^{n+1}}{h} + \alpha U_i^{n+1} - g_r^{n+1}\Big) \\ \qquad = \dfrac{\nu}{h^2}\Big(m_{i+1/2}(U^n)(U_{i+1}^{n+1} - U_i^{n+1}) - m_{i-1/2}(U^n)(U_i^{n+1} - U_{i-1}^{n+1})\Big) \\ \qquad\quad + (1 - \chi(x_i))f(x_i, t^{n+1}) \\ U_0^{n+1} = U_N^{n+1},\ U_1^{n+1} = U_{N+1}^{n+1} \\ U_i^0 = (1 - \chi(x_i))u_0(x_i) + \chi(x_i). \end{cases} \tag{6.1.2}$$

On obtient le système suivant à résoudre à chaque pas de temps :

$$\begin{pmatrix} b_1^n & c_1^n & 0 & \cdots & 0 & a_1^n \\ a_2^n & b_2^n & c_2^n & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & a_{N-1}^n & b_{N-1}^n & c_{N-1}^n \\ c_N^n & 0 & \cdots & 0 & a_N^n & b_N^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ U_{N-1}^{n+1} \\ U_N^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1^n \\ r_2^n \\ \vdots \\ \vdots \\ r_{N-1}^n \\ r_N^n \end{pmatrix}, \tag{6.1.3}$$

avec

- $a_i^n = -\nu\frac{\Delta t}{h^2}m_{i-1/2}(U^n) - \frac{\chi_l(x_i)}{\eta}\frac{\Delta t}{h}(U_i^n)^{5/2}$;
- $b_i^n = 1 + \nu\frac{\Delta t}{h^2}(m_{i+1/2}(U^n) + m_{i-1/2}(U^n)) + \Delta t\frac{\chi_l(x_i)+\chi_r(x_i)}{\eta}((U_i^n)^{5/2}\frac{1}{h} + \alpha)$;
- $c_i^n = -\nu\frac{\Delta t}{h^2}m_{i+1/2}(U^n) - \frac{\chi_r(x_i)}{\eta}\frac{\Delta t}{h}(U_i^n)^{5/2}$;
- $r_i^n = (1 - \chi(x_i))(\Delta t f(x_i, t^{n+1})) + U_i^n - \Delta t\frac{F_{i+1/2}(U^n) - F_{i-1/2}(U^n)}{h} + \Delta t\frac{\chi_l(x_i)}{\eta}g_l^{n+1} + \Delta t\frac{\chi_r(x_i)}{\eta}g_r^{n+1}$.

6.1.2 Test numérique

Pour vérifier/valider la méthode numérique proposée (6.1.2), on teste celle-ci dans un cas particulier du problème non linéaire original (6.1.1) admettant une solution stationnaire u_s.

Solution stationnaire

Le problème (6.1.1) ramené sur $]0,1[\times]0,T[$ s'écrit

$$\begin{cases} \dfrac{\partial U}{\partial t} + \dfrac{1}{2x_l}\dfrac{\partial}{\partial X}(V(X)U) = \nu\Big(\dfrac{1}{2x_l}\Big)^2 \dfrac{\partial}{\partial X}\Big(U^{5/2}\dfrac{\partial U}{\partial X}\Big) + F & X \in]0,1[,\ t \in]0,T[\\ -\dfrac{1}{2x_l}U^{5/2}\dfrac{\partial U}{\partial X}(0,t) + \alpha U(0,t) = g_r(t) & t \in]0,T[\\ \dfrac{1}{2x_l}U^{5/2}\dfrac{\partial U}{\partial X}(1,t) + \alpha U(1,t) = g_l(t) & t \in]0,T[\\ U(X,0) = U_0(X) & X \in]0,1[, \end{cases} \tag{6.1.4}$$

avec les correspondances $X = \frac{x}{2x_l} + \frac{1}{2}$, $u(x,t) = U(X,t)$, $u_0(x) = U_0(X)$, $f(x,t) = F(X,t)$ et $v(x) = V(X)$ pour $x \in]-x_l, x_l[$. Voir Fig. 3.3.1 et 3.3.2 pour un rappel des transformations effectuées.

On choisit $U_s(X) = -X^2 + X + 1$. U_s est solution stationnaire de (6.1.4) pour les données :

- $F(X,t) = F(X) = \frac{1}{2x_l}(VU_s)'(X) - \nu(\frac{1}{2x_l})^2(U_s^{5/2}U_s')'(X)$;
- $g_l(t) = g_r(t) = 0$;
- $\alpha = \frac{1}{2x_l}$.

Données physiques

Pour s'approcher du problème physique de l'évolution de la température du plasma (3.1.1), on choisit $V(X) = 2X - 1$ pour avoir des conditions aux bords de l'obstacle ($v(x_l) = 1$ et $v(x_r) = -1$) proches des conditions de Bohm (3.1.2), v jouant ici le rôle de $\frac{\Gamma}{n}$.

On choisit pour le coefficient de diffusion $\nu = 0.2$ et pour la température initiale $u_0 = 1$.

Résultats

Les résultats obtenus sont reportés sur les Fig. 6.1.1 et 6.1.2. On choisit ici $d = 0.1$ (i.e. $x_l = 0.45$ et $x_r = 0.55$ pour les bords de l'obstacle) et $\Delta_l = \Delta_r = 0.3d$. On considère pour les fonctions indicatrices $\chi = \chi_{[x_l,x_r]}$, $\chi_l = \chi_{[x_l,x_l+\Delta_l]}$ et $\chi_r = \chi_{[x_r-\Delta_r,x_r]}$. Notons que l'on initialise la température à 1 dans tout le domaine de calcul $[0,1]$ (voir la discrétisation (6.1.2)) au lieu de l'annuler dans l'obstacle, et ce pour éviter les problèmes posés par une température nulle lors de l'imposition des conditions aux limites par pénalisation.

Sur la Fig. 6.1.1, où l'on a tracé la solution numérique du problème pénalisé obtenue avec la discrétisation (6.1.2) à $T = 10$ assez grand pour atteindre l'état stationnaire, on observe un bon accord dans le domaine fluide $[0,x_l] \cup [x_r,1]$ entre la solution numérique et la solution stationnaire du problème original (6.1.1) pour Δt, η et h assez petits.

Les erreurs tracées sur la Fig. 6.1.2 correspondent à $\|u_s(x_i) - U_i^M\|$ dans le domaine fluide. Comme

$$\|u_s(x_i) - U_i^M\| \leq \|u_s(x_i) - u(x_i,T)\| + \|u(x_i,T) - U_i^M\|,$$

une nouvelle source d'erreur s'ajoute aux trois sources d'erreurs déjà rencontrées (discrétisation en temps, pénalisation, discrétisation en espace). D'après la Fig. 6.1.1, l'erreur entre la solution stationnaire et la solution exacte semble négligeable devant les autres à $T = 10$. On obtient un ordre de convergence de 1 en fonction du pas de discrétisation en espace h (Fig. 6.1.2a), ce qui est conforme à la discrétisation (6.1.2) utilisée. En fonction du paramètre de pénalisation η, on observe un ordre de convergence de 1 (Fig. 6.1.2b), ce qui coïncide avec le résultat théorique obtenu dans le cas linéaire.

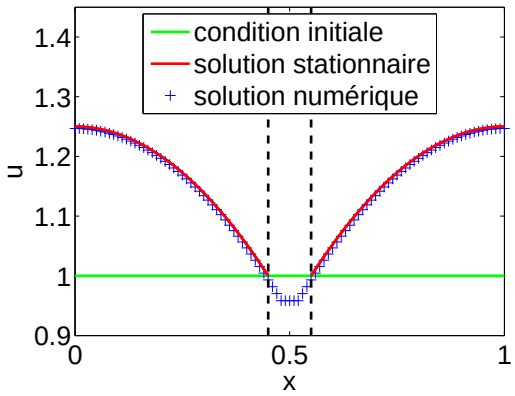
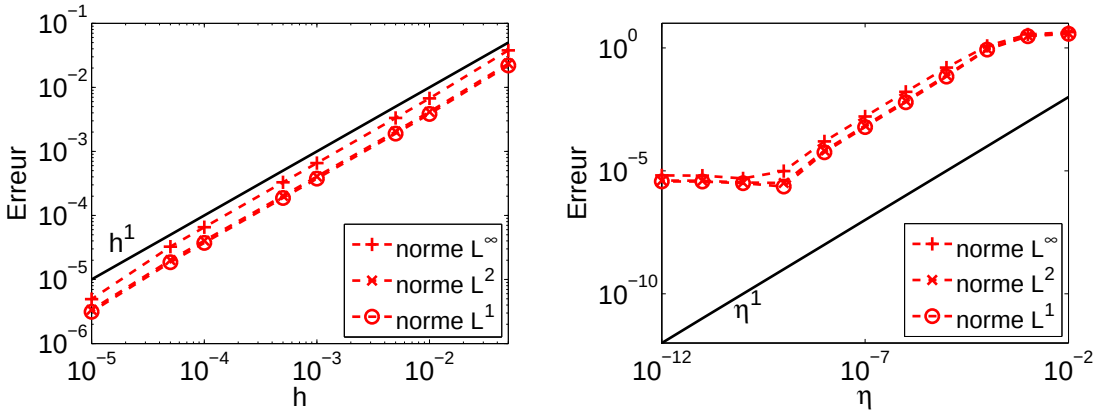


FIG. 6.1.1: Comparaison entre la solution numérique à $T = 10$ du problème non linéaire pénalisé en utilisant la discrétisation (6.1.2) et la solution stationnaire du problème non linéaire original (6.1.1) avec des conditions de Robin. On a choisi $\Delta t = 10^{-3}$, $\eta = 10^{-10}$ et $h = 10^{-2}$.



(a) $\Delta t = 10^{-3}$, $\eta = 10^{-10}$

(b) $\Delta t = 10^{-3}$, $h = 10^{-5}$

FIG. 6.1.2: Erreur dans le domaine fluide entre la solution numérique à $T = 10$ du problème non linéaire pénalisé, en utilisant la discrétisation (6.1.2), et la solution stationnaire du problème non linéaire original (6.1.1) avec des conditions de Robin.

6.2 Interaction plasma-paroi dans un tokamak

La méthode de pénalisation proposée dans ce manuscrit pour imposer des conditions aux limites de type Neumann/Robin a été implémentée dans un code bidimensionnel réaliste (SolEdge2D) pour la modélisation de l'interaction plasma-paroi dans la région de bord d'un tokamak [33, 39]. Dans ce code, la géométrie étudiée est celle de la configuration tokamak sous l'hypothèse de symétrie toroïdale (voir Fig. 6.2.1). La géométrie de calcul correspond à la géométrie bidimensionnelle représentée sur la Fig. 3.1.1b, avec une grille alignée avec le champ magnétique. Les équations résolues dans cette configuration sont celles du système (3.1.1), décrivant la densité, la quantité de mouvement parallèle et les températures du plasma, auxquelles sont rajoutés des termes de diffusion dans la direction perpendiculaire (radiale). La technique de pénalisation proposée ici pour tenir compte des conditions aux limites de type Neumann/Robin (3.1.4) portant sur T_i et T_e a été couplée avec celle antérieurement proposée [4] pour tenir compte des conditions de Bohm (3.1.2) portant sur n et Γ. L'application de la pénalisation pour imposer les conditions aux limites à l'interface plasma-obstacle dans cette géométrie bidimensionnelle se fait comme dans le cas unidimensionnel, les conditions aux limites étant posés dans la direction parallèle.

Nous montrons ici quelques résultats obtenus avec le code SolEdge2D. La température ionique T_i est représentée sur la Fig. 6.2.1, ainsi que des profils des températures ionique T_i et électronique T_e le long d'une ligne de champ sur la Fig. 6.2.2. Le fait de retrouver les bonnes conditions aux limites (3.1.4) a été vérifié numériquement. La satisfaction des conditions de Neumann homogènes par la température ionique est assez visible sur la Fig. 6.2.2a. Pour la température électronique, on peut observer sur la Fig. 6.2.2b que le flux de chaleur parallèle sortant $-\partial_x T_e \cdot n_x$ (où n_x est la composante parallèle de la normale unitaire sortante vers l'obstacle) est positif indiquant que le transfert de chaleur dans la direction parallèle est orienté du plasma vers le limiteur, ce qui est attendu d'un point de vue physique. L'erreur sur les conditions aux limites est de l'ordre de 0.1% dans les simulations.

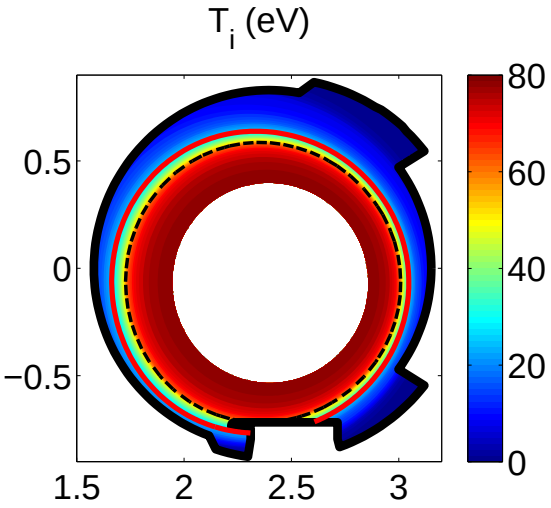
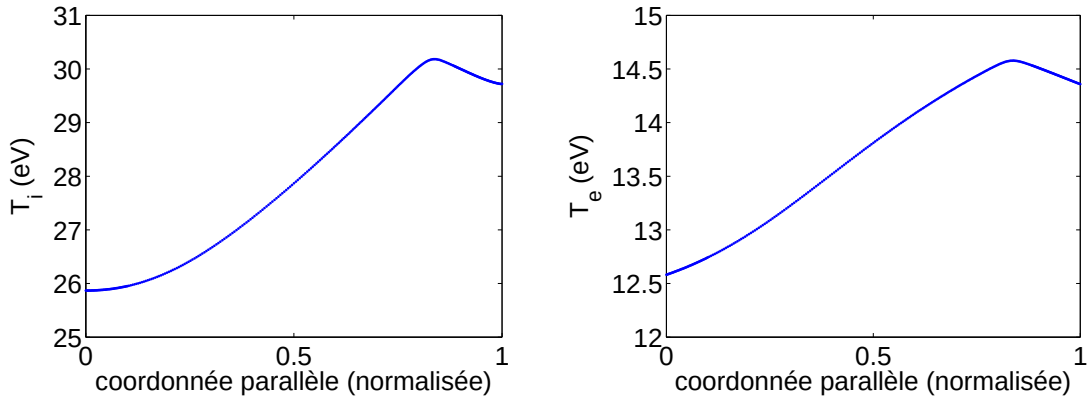


Fig. 6.2.1: Température ionique obtenue avec le code SolEdge2D en configuration réaliste d'un tokamak en présence d'un limiteur. Une ligne de champ interceptant le limiteur est représentée par une ligne rouge.



(a) Température ionique

(b) Température électronique

FIG. 6.2.2: Profils des températures ionique et électronique le long de la ligne de champ représentée par une ligne rouge dans la Fig. 6.2.1. Les profils sont tracés ici en fonction de la coordonnée parallèle normalisée X (les bords de l'obstacle sont $X = 0$ et $X = 1$).

6.3 Extension de la pénalisation au cas multidimensionnel

Si l'on souhaite étendre la méthode de pénalisation proposée au cas général multidimensionnel avec des conditions aux limites de type Neumann/Robin, on se heurte à quelques difficultés.

- Tout d'abord, la méthode de pénalisation proposée est basée sur la transformation des conditions aux limites surfaciques en conditions volumiques. Il faut donc savoir étendre le vecteur normal n ainsi que la donnée au bord g au domaine pénalisé.
- Ensuite, le calcul explicite de la solution exacte n'étant pas possible en général en dimension quelconque, il faut envisager d'autres méthodes pour établir des résultats théoriques (existence et unicité, convergence etc.) validant la méthode de pénalisation.

Concernant le premier point, si le bord $\partial\omega$ du domaine original peut être représenté par une ligne de niveau $\phi = 0$ où ϕ est différentiable, alors on peut prolonger le vecteur normal en étendant la ligne de niveau (en considérant $\phi = c$ avec c une constante). La normale unitaire sortante n au bord $\partial\omega$ peut alors être étendue dans le domaine pénalisé par le champ vectoriel $\pm\frac{\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|}$.

Pour tester la faisabilité de la généralisation de l'approche développée dans le cas unidimensionnel au cas multidimensionnel, nous considérons ici deux cas particuliers en dimension 2.

6.3.1 Première configuration

Soit à résoudre

$$\begin{cases} -\Delta u + u = f & \text{dans } \omega \\ \dfrac{\partial u}{\partial n} + \alpha u = 0 & \text{sur } \partial\omega, \end{cases} \tag{6.3.1}$$

où $\omega = D(0,1)$ est le disque de centre 0 et de rayon 1. Le bord $\partial\omega$ est décrit par $\phi(x,y) = 0$ avec $\phi(x,y) = x^2 + y^2 - 1$. On propose le problème pénalisé

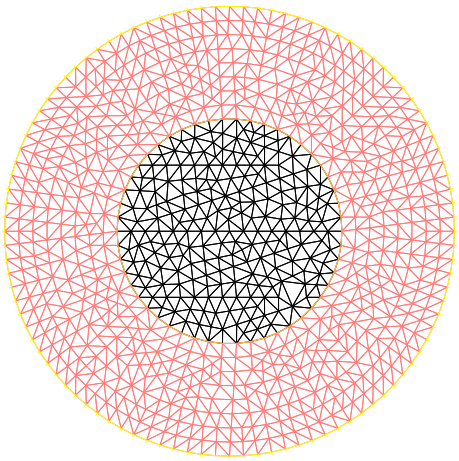
$$\begin{cases} -\Delta u_\eta + u_\eta + \dfrac{\chi}{\eta}\Big(\nabla u_\eta \cdot \dfrac{\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|} + \alpha u_\eta\Big) = (1-\chi)f & \text{dans } \Omega \\ \dfrac{\partial u_\eta}{\partial n} + \alpha u_\eta = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases} \tag{6.3.2}$$

où $\Omega = D(0,2)$ est le disque de centre 0 et de rayon 2, η est le paramètre de pénalisation et χ est la fonction caractéristique de $\Omega \setminus \bar{\omega}$.

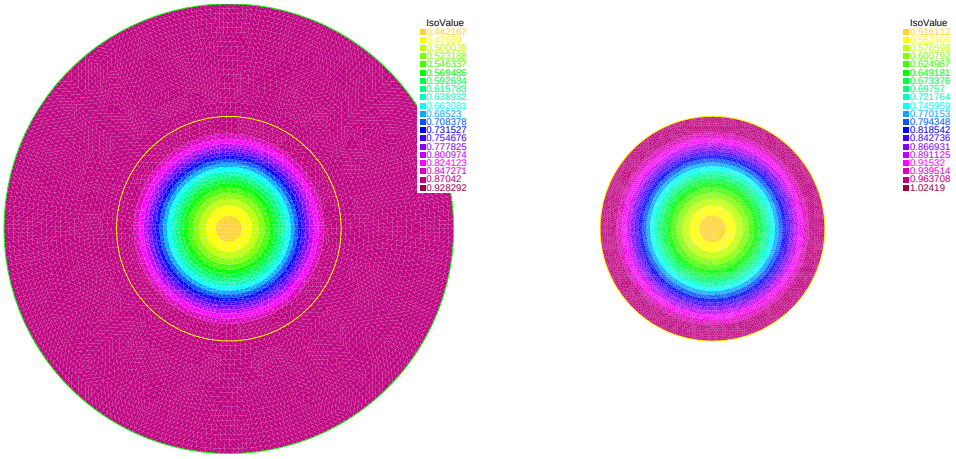
Cette configuration est à rapprocher de celle considérée dans le cas unidimensionnel pour le problème elliptique (4.1.1) et sa pénalisation (4.1.3), où la géométrie est représentée sur la Fig. 3.3.4. En effet, chaque diamètre de la configuration considérée ici est semblable à la géométrie de la Fig. 3.3.4. On considère ici pour la donnée au bord $g = 0$ (conditions homogènes) pour éviter la difficulté supplémentaire de prolongement/relèvement de g dans le domaine pénalisé. À l'instar du cas unidimensionnel, les conditions aux limites imposées sur le bord du domaine fictif $\partial\Omega$ correspondent à un report des conditions aux limites posés initialement sur le bord du domaine original $\partial\omega$, cela est choisi dans un souci de compatibilité s'attendant à avoir $\nabla u_\eta \cdot \frac{\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|} + \alpha u_\eta \approx 0$ dans le domaine pénalisé pour $\eta \ll 1$.

Nous présentons ici les premières expérimentations numériques effectuées pour tester la convergence dans le domaine original ω de la solution u_η du problème pénalisé (6.3.2) (en supposant l'existence et l'unicité de u_η) vers la solution u du problème original (6.3.1), lorsque $\eta \to 0$. Le problème pénalisé est résolu numériquement par la méthode des éléments finis en utilisant le logiciel FreeFem++ [40]. Nous considérons des conditions aux limites de Neumann homogènes ($\alpha = 0$) et deux choix du terme source f. Les résultats obtenus, en choisissant le paramètre de pénalisation η et le pas du maillage h assez petits, sont reportés sur la Fig. 6.3.1 pour f ajusté de façon à connaître la solution exacte u du problème original, et sur la Fig. 6.3.2 pour $f(x,y) = xy$. Pour ce second choix de f, la solution numérique du problème pénalisé (6.3.2) est comparée à une solution approchée du problème original (6.3.1) calculée numériquement par la méthode des éléments finis en utilisant un maillage assez fin. Un résumé des erreurs obtenues en norme L^2 ($\|u - u_{\eta,h}\|_{L^2(\omega)}$ ou $\|u_{ref} - u_{\eta,h}\|_{L^2(\omega)}$) est indiqué dans les Tab. 6.3.1 (f ajusté) et 6.3.2 ($f = xy$), pour un paramètre de pénalisation η fixé et différents pas du maillage h.

Pour cette première configuration, les taux de convergence obtenus sont assez variables, mais on observe en général une décroissance de l'erreur lorsque $h \to 0$, indiquant que $u_\eta \approx u$ pour la valeur fixée de $\eta \ll 1$.



(a)

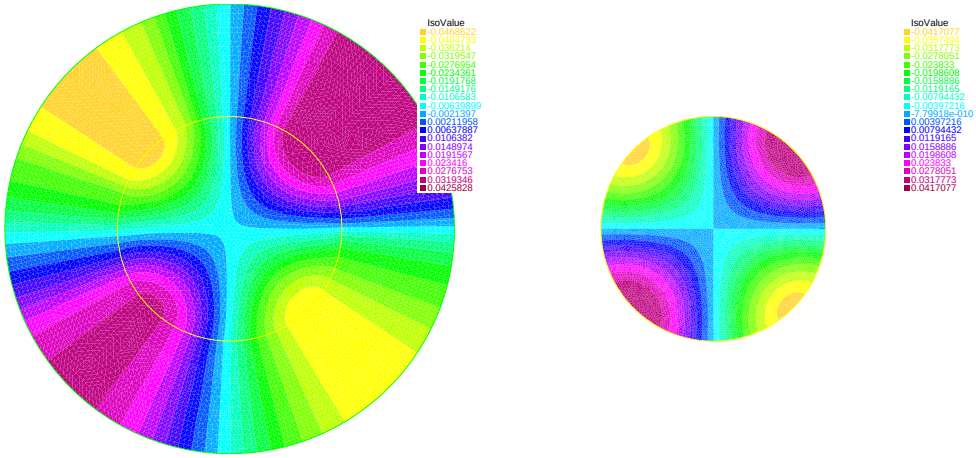


(b) (c)

FIG. 6.3.1: Comparaison entre la solution numérique (b) du problème pénalisé (6.3.2), en utilisant la méthode des éléments finis P^2, et la solution exacte (c) du problème original (6.3.1). Les données sont ici $\alpha = 0$ et $f(x,y) = 4((x^2+y^2)\cos(x^2+y^2-1) + \sin(x^2+y^2-1)) + \cos(x^2+y^2-1)$. La solution exacte est $u(x,y) = \cos(x^2+y^2-1)$. On a choisi $\eta = 10^{-7}$ et le maillage (a) de pas $h = 0.24472$.

Pas du maillage h	Erreur en norme L^2	Ordre de convergence
0.24472	0.150331	–
0.105636	0.00726481	3.60639
0.0528318	0.00122966	2.56365
0.0285424	0.000333017	2.12156

TAB. 6.3.1: Erreur dans le domaine original ω entre la solution numérique du problème pénalisé (6.3.2), en utilisant la méthode des éléments finis P^2, et la solution exacte du problème original (6.3.1). Les données et le paramètre de pénalisation sont ceux de la Fig. 6.3.1.



(a) (b)

FIG. 6.3.2: Comparaison entre la solution numérique (a) du problème pénalisé (6.3.2), en utilisant la méthode des éléments finis P^2, et une solution de référence (b) du problème original (6.3.1). Les données sont ici $\alpha = 0$ et $f(x, y) = xy$. La solution de référence est obtenue avec la méthode des éléments finis P^2 avec un maillage fin (ici $h = 0.0285424$). On a choisi $\eta = 10^{-3}$ et le maillage de la Fig. 6.3.1a de pas $h = 0.24472$ pour le problème pénalisé.

Pas du maillage h	Erreur en norme L^2	Ordre de convergence
0.24472	0.00647455	–
0.105636	0.000274872	3.76058
0.0528318	4.1614e-005	2.72465
0.0285424	6.04168e-005	-0.605516

TAB. 6.3.2: Erreur dans le domaine original ω entre la solution numérique du problème pénalisé (6.3.2), en utilisant la méthode des éléments finis P^2, et une solution de référence du problème original (6.3.1). Les données, la solution de référence et le paramètre de pénalisation sont ceux de la Fig. 6.3.2.

6.3.2 Seconde configuration

Soit à résoudre

$$\begin{cases} -\Delta u + u = f \quad \text{dans } \omega \\ \dfrac{\partial u}{\partial n} + \alpha u = 0 \quad \text{sur } \partial D \\ u(0,y) = u(1,y),\ u(x,0) = u(x,1), \end{cases} \tag{6.3.3}$$

où $\omega =]0,1[\times]0,1[\setminus \bar{D}\big((0.5,0.5),0.25\big)$. Le bord ∂D du disque est décrit par $\phi(x,y) = 0$ avec $\phi(x,y) = (x-0.5)^2 + (y-0.5)^2 - 0.25^2$. On propose le problème pénalisé

$$\begin{cases} -\Delta u_\eta + u_\eta + \dfrac{\chi_0}{\eta}\Big(\nabla u_\eta \cdot \dfrac{-\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|} + \alpha u_\eta\Big) = (1-\chi) f \quad \text{dans } \Omega \\ u_\eta(0,y) = u_\eta(1,y),\ u_\eta(x,0) = u_\eta(x,1), \end{cases} \tag{6.3.4}$$

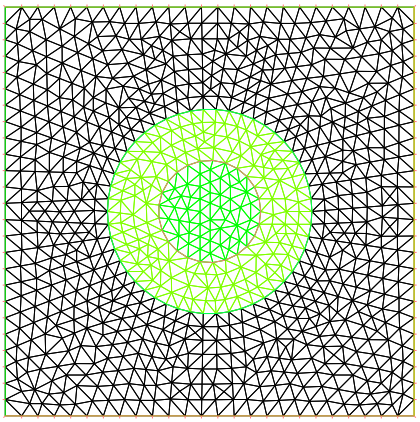
où $\Omega =]0,1[\times]0,1[$, η est le paramètre de pénalisation, χ est la fonction caractéristique de $D\big((0.5,0.5),0.25\big)$ et χ_0 est la fonction caractéristique de la couronne $D\big((0.5,0.5),0.25\big) \setminus \bar{D}\big((0.5,0.5),0.125\big)$.

Cette seconde configuration est à rapprocher de celle considérée dans le cas unidimensionnel pour le problème elliptique physique (4.3.1) et sa pénalisation (4.3.2), où la géométrie est représentée sur la Fig. 3.3.3. En effet, la couronne introduite dans ce cas bidimensionnel joue le même rôle que celui joué par $]x_l, x_l + \Delta_l[\cup]x_r - \Delta_r, x_r[$ dans le cas unidimensionnel, en permettant de garder une partie libre dans l'obstacle (correspondant à un disque ici) qui évite la communication entre différentes parties de l'obstacle ainsi que l'apparition de singularités. On considère ici aussi des conditions homogènes ($g = 0$). Comme pour le cas unidimensionnel, le problème pénalisé dans cette configuration ne comporte plus que des conditions périodiques, cette configuration apparaît alors comme un cas plus pratique de l'utilisation de la pénalisation pour imposer des conditions aux limites de Neumann/Robin.

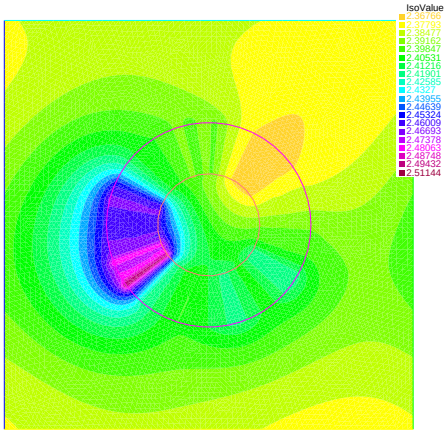
Pour cette seconde configuration, nous réitérons les expérimentations numériques effectuées précédemment pour la première configuration afin de tester la convergence dans le domaine original ω de la solution u_η du problème pénalisé (6.3.4) (en supposant l'existence et l'unicité de u_η) vers la solution u du problème original (6.3.3), lorsque $\eta \to 0$. La Fig. 6.3.3 et le Tab. 6.3.3 montrent les résultats obtenus pour un terme source f ajusté de manière à connaître la solution exacte u, tandis que la Fig. 6.3.4 et le Tab. 6.3.4 montrent les résultats obtenus pour $f = xy$.

Les taux de convergence obtenus pour cette seconde configuration sont assez variables, mais on observe dans les deux cas tests une décroissance de l'erreur lorsque $h \to 0$, indiquant que $u_\eta \approx u$ pour la valeur fixée de $\eta \ll 1$.

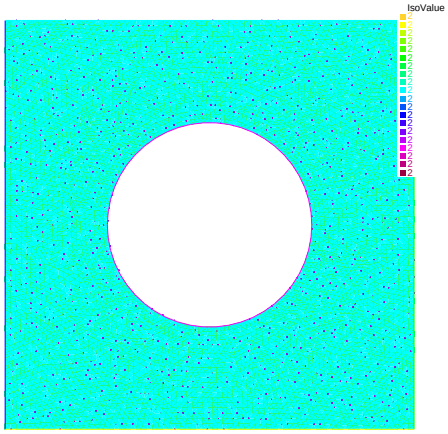
Ces résultats préliminaires semblent montrer que la méthode de pénalisation proposée peut être étendue au cas bidimensionnel. L'extension de la fonction g ainsi que la prise en compte de géométries de bord plus complexes doivent être en particulier étudiées.



(a)



(b)

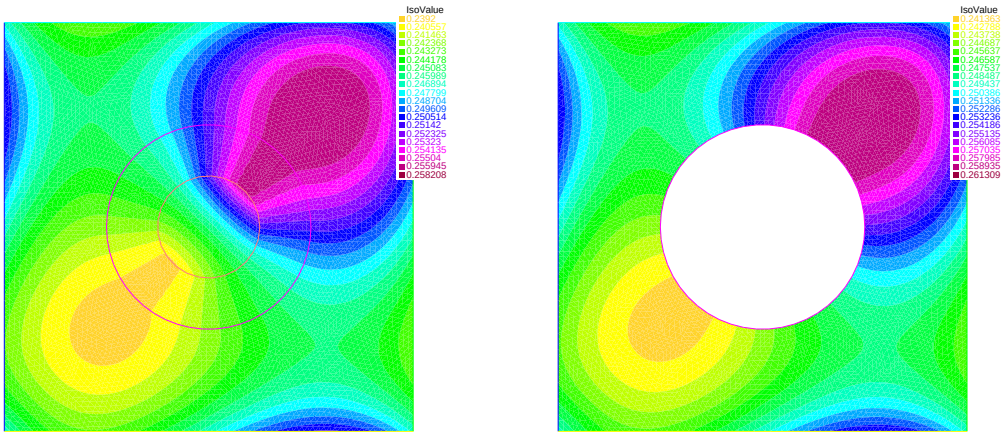


(c)

FIG. 6.3.3: Comparaison entre la solution numérique (b) du problème pénalisé (6.3.4), en utilisant la méthode des éléments finis P^2, et la solution exacte (c) du problème original (6.3.3). Les données sont ici $\alpha = 0$ et $f(x, y) = 2$. La solution exacte est $u(x, y) = 2$. On a choisi $\eta = 10^{-4}$ et le maillage (a) de pas $h = 0.0608276$.

Pas du maillage h	Erreur en norme L^2	Ordre de convergence
0.0608276	0.390723	–
0.0327586	0.0687082	2.80852
0.017498	0.00338932	4.7988
0.00847287	0.00114704	1.49397

TAB. 6.3.3: Erreur dans le domaine original ω entre la solution numérique du problème pénalisé (6.3.4), en utilisant la méthode des éléments finis P^2, et la solution exacte du problème original (6.3.3). Les données et le paramètre de pénalisation sont ceux de la Fig. 6.3.3.



(a) (b)

FIG. 6.3.4: Comparaison entre la solution numérique (a) du problème pénalisé (6.3.4), en utilisant la méthode des éléments finis P^2, et une solution de référence (b) du problème original (6.3.3). Les données sont ici $\alpha = 0$ et $f(x, y) = xy$. La solution de référence est obtenue avec la méthode des éléments finis P^2 avec un maillage fin (ici $h = 0.00847287$). On a choisi $\eta = 10^{-3}$ et le maillage de la Fig. 6.3.3a de pas $h = 0.0608276$ pour le problème pénalisé.

Pas du maillage h	Erreur en norme L^2	Ordre de convergence
0.0608276	0.00258953	–
0.0327586	0.000480701	2.72103
0.017498	0.000479437	0.00419953

TAB. 6.3.4: Erreur dans le domaine original ω entre la solution numérique du problème pénalisé (6.3.4), en utilisant la méthode des éléments finis P^2, et une solution de référence du problème original (6.3.3). Les données, la solution de référence et le paramètre de pénalisation sont ceux de la Fig. 6.3.4.

Bibliographie de la partie II

[1] P. Tamain. *Etude des flux de matière dans le plasma de bord des tokamaks : alimentation, transport et turbulence*. PhD thesis, Université de Provence Aix-Marseille 1, 2007. 6, 51

[2] L. Isoardi. *Modélisation du transport dans le plasma de bord d'un tokamak*. PhD thesis, Université Paul Cézanne Aix-Marseille 3, 2010. 51, 110

[3] P. C. Stangeby. *The plasma boundary of magnetic fusion devices*. Institute of Physics Publishing, 2000. 51, 52

[4] L. Isoardi, G. Chiavassa, G. Ciraolo, P. Haldenwang, E. Serre, P. Ghendrih, Y. Sarazin, F. Schwander, and P. Tamain. Penalization modeling of a limiter in the tokamak edge plasma. *J. Comput. Phys.*, 229(6):2220–2235, 2010. 52, 54, 99, 110

[5] V. Girault and R. Glowinski. Error analysis of a fictitious domain method applied to a Dirichlet problem. *Japan J. Indust. Appl. Math.*, 12(3):487–514, 1995. 53

[6] J. Haslinger, J.-F. Maitre, and L. Tomas. Fictitious domains methods with distributed Lagrange multipliers part i: Application to the solution of elliptic state problems. *Math. Models methods Appl. Sci.*, 11(3):521–547, 2001. 53

[7] E. Arquis and J.-P. Caltagirone. Sur les conditions hydrodynamiques au voisinage d'une interface milieu fluide-milieux poreux : application à la convection naturelle. *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. II*, 299:1–4, 1984. 53

[8] P. Angot, C.-H. Bruneau, and P. Fabrie. A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows. *Numer. Math.*, 81:497–520, 1999. 53, 54

[9] G. H. Keetels, U. D'Ortona, W. Kramer, H. J. H. Clercx, K. Schneider, and G. J. F. van Heijst. Fourier spectral and wavelet solvers for the incompressible Navier-Stokes equations with volume-penalization: Convergence of a dipole-wall collision. *J. Comput. Phys.*, 227(2):919–945, 2007. 53

[10] K. Schneider. Numerical simulation of the transient flow behaviour in chemical reactors using a penalisation method. *Comput. & Fluids*, 34(10):1223–1238, 2005. 53

[11] N. K.-R. Kevlahan and J.-M. Ghidaglia. Computation of turbulent flow past an array of cylinders using a spectral method with Brinkman penalization. *Eur. J. Mech. B - Fluids*, 20(3):333–350, 2001. 53, 54

[12] N. K.-R. Kevlahan and O. V. Vasilyev. An adaptive wavelet collocation method for fluid-structure interaction at high Reynolds numbers. *SIAM J. Sci. Comput.*, 26(6):1894–1915, 2005. 53, 54

[13] R. Pasquetti, R. Bwemba, and L. Cousin. A pseudo-penalization method for high Reynolds number unsteady flows. *Appl. Numer. Math.*, 58(7):946–954, 2008. 53, 54

[14] M. Minguez, R. Pasquetti, and E. Serre. High-order large-eddy simulation of flow over the "Ahmed body" car model. *Phys. Fluids*, 20(9):095101, 2008. 53

[15] M. Minguez, R. Pasquetti, and E. Serre. Spectral vanishing viscosity stabilized LES of the Ahmed body turbulent wake. *Commun. Comput. Phys.*, 5(2–4):635–648, 2009. 53

[16] O. V. Vasilyev and N. K.-R. Kevlahan. Hybrid wavelet collocation-Brinkman penalization method for complex geometry flows. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 40(3-4):531–538, 2002. 53, 54

[17] K. Schneider, M. Paget-Goy, A. Verga, and M. Farge. Numerical simulation of flows past flat plates using volume penalization. *Comp. Appl. Math.*, pages 1–15, 2014. 53, 54

[18] B. Kadoch, D. Kolomenskiy, P. Angot, and K. Schneider. A volume penalization method for incompressible flows and scalar advection-diffusion with moving obstacles. *J. Comput. Phys.*, 231(12):4365–4383, 2012. 53, 54

[19] M. Bergmann and A. Iollo. Modeling and simulation of fish-like swimming. *J. Comput. Phys.*, 230(2):329–348, 2011. 53, 54

[20] M. Coquerelle and G.-H. Cottet. A vortex level set method for the two-way coupling of an incompressible fluid with colliding rigid bodies. *J. Comput. Phys.*, 227(21):9121–9137, 2008. 53, 54

[21] O. Boiron, G. Chiavassa, and R. Donat. A high-resolution penalization method for large Mach number flows in the presence of obstacles. *Comput. & Fluids*, 38(3):703–714, 2009. 53

[22] K. Khadra, P. Angot, S. Parneix, and J.-P. Caltagirone. Fictitious domain approach for numerical modelling of Navier-Stokes equations. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 34(8):651–684, 2000. 54

[23] A. Paccou, G. Chiavassa, J. Liandrat, and K. Schneider. A penalization method applied to the wave equation. *C. R. Mécanique*, 333(1):79–85, 2005. 54

[24] K. Schneider and M. Farge. Adaptive wavelet simulation of a flow around an impulsively started cylinder using penalisation. *Appl. Comput. Harmon. Anal.*, 12(3):374–380, 2002. 54

[25] B. Fornet. A Kreiss' symmetrizer domain penalization method. *Comm. Partial Differential Equations*, 33(9):1549–1570, 2008. 54

[26] B. Fornet and O. Guès. Penalization approach to semi-linear symmetric hyperbolic problems with dissipative boundary conditions. *Discrete Contin. Dynam. Systems*, 23(3):827–845, 2009. 54

[27] Q. Chen, Y. Hong, and R. Temam. Analysis of a penalty method. *J. Sci. Comput.*, 53:3–34, 2012. 54

[28] P. Angot, T. Auphan, and O. Guès. An optimal penalty method for a hyperbolic system modeling the edge plasma transport in a tokamak. *J. Comput. Phys.*, 261:1–22, 2014. 54

[29] T. Auphan. *Analyse de modèles pour ITER; Traitement des conditions aux limites de systèmes modélisant le plasma de bord dans un tokamak*. PhD thesis, Aix-Marseille Université, 2014. 54, 111

[30] P. Angot. A unified fictitious domain model for general embedded boundary conditions. *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I*, 341:683–688, 2005. 54

[31] I. Ramière, P. Angot, and M. Belliard. A fictitious domain approach with spread interface for elliptic problems with general boundary conditions. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 196(4–6):766–781, 2007. 54

[32] I. Ramière, P. Angot, and M. Belliard. A general fictitious domain method with immersed jumps and multilevel nested structured meshes. *J. Comput. Phys.*, 225(2):1347–1387, 2007. 54

[33] H. Bufferand. *Development of a fluid code for tokamak edge plasma simulation. Investigation on non-local transport*. PhD thesis, Aix-Marseille Université, 2012. 54, 99, 111

[34] G. Allaire. *Analyse numérique et optimisation : une introduction à la modélisation mathématique et à la simulation numérique*. Éd. de l'École Polytechnique, 2005. 57, 80, 82

[35] R. Dautray and J.-L. Lions. *Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques*, volume 4 : Méthodes variationnelles. Masson, 1988. 57

[36] R. Dautray and J.-L. Lions. *Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques*, volume 7 : Évolution : Fourier, Laplace. Masson, 1988. 80

[37] J.-L. Lions and E. Magenes. *Problèmes aux limites non homogènes et applications*, volume 1. Dunod, 1968. 80

[38] F. Boyer. Approximation numérique complète d'un problème parabolique. `http://www.latp.univ-mrs.fr/~fboyer/Enseignement/M2_AN/examen0910.pdf` [En ligne ; consulté le 12 mars 2014]. Sujet de l'examen d'Analyse Numérique du M2 EDP et Calcul Scientifique, 2009-2010, Marseille. 82

[39] H. Bufferand, B. Bensiali, J. Bucalossi, G. Ciraolo, P. Genesio, P. Ghendrih, Y. Marandet, A. Paredes, F. Schwander, E. Serre, and P. Tamain. Near wall plasma simulation using penalization technique with the transport code SolEdge2D-Eirene. *J. Nucl. Mater.*, 438:S445–S448, 2013. Proceedings of the 20th International Conference on Plasma-Surface Interactions in Controlled Fusion Devices. 99, 111

[40] F. Hecht. New development in freefem++. *J. Numer. Math.*, 20(3-4):251–265, 2012. 101

[41] Y. Sarazin and P. Ghendrih. Intermittent particle transport in two-dimensional edge turbulence. *Phys. Plasmas*, 5(12):4214–4228, 1998. 3, 11, 36, 37, 110

Conclusion générale

Les travaux réalisés dans cette thèse s'inscrivent dans le cadre du programme ANR ESPOIR. Un des objectifs de ce programme est le développement d'outils numériques dédiés à la modélisation de la zone de proche paroi des tokamaks. La compréhension des phénomènes physiques apparaissant dans cette zone, appelée Scrape-Off Layer (SOL), est cruciale quant à l'avenir de la fusion contrôlée en tant que mode de production d'énergie. Ces phénomènes influencent le confinement du plasma dans le cœur du réacteur d'une part et la quantité de chaleur émise sur les parois (et donc récupérable) d'autre part.

Nous nous sommes intéressés à deux problématiques : une concernant le transport turbulent de particules, l'autre la modélisation de l'interaction plasma-paroi. Dans les deux cas, nous avons contribué au développement de méthodes numériques appropriées et originales.

Notre première contribution concerne l'interprétation/exploitation de résultats de codes de simulation. Il s'agit de l'étude du transport turbulent des particules du plasma à partir de la donnée d'un champ de vitesse généré par un code numérique. Nous avons formulé un problème général consistant à calculer les trajectoires de particules soumises à un champ de vitesse supposé connu uniquement sur une grille de points. L'intégration numérique des équations du mouvement des particules nécessitant l'évaluation de ce champ en des positions arbitraires, nous avons mis en œuvre des méthodes d'interpolation. Les champs de vitesse étudiés présentant de forts gradients, les méthodes classiques d'interpolation génèrent des oscillations (phénomène de Gibbs), ce qui nous a conduits à développer une méthode d'interpolation basée sur les schémas de subdivision non linéaires.

Nous avons commencé par mettre en évidence l'effet du phénomène de Gibbs sur le calcul des trajectoires. En considérant un champ de vitesse discontinu, nous avons montré que ce phénomène peut conduire à des trajectoires différentes des trajectoires exactes. Nous avons également montré la nécessité d'utiliser une version conservative dans le cas d'un champ de vitesse dérivant d'un potentiel, et ce quelque soit la méthode d'interpolation utilisée. La méthode développée a été appliquée à un potentiel généré par le code TOKAM-2D [41] modélisant la turbulence dans le plasma de bord d'un tokamak. Elle a permis de comparer le transport des particules (approche lagrangienne) à la propagation des structures de densité (approche eulérienne) dans la région de bord. En particulier, nous avons montré qu'il existe un temps caractéristique de piégeage des particules dans une structure de densité et que selon la position initiale de la particule, la dynamique de ces particules varie fortement.

Ces travaux apportent une première indication vis-à-vis de l'échange de matière entre la structure de densité et son environnement. Il serait intéressant de poursuivre cette étude avec un très grand nombre de particules et de structures pour avoir plus de statistiques et permettre une compréhension plus précise des phénomènes en jeu.

La deuxième partie de cette thèse s'inscrit dans le cadre de la modélisation numérique de l'interaction plasma-paroi. À partir d'une description fluide, un premier code de simulation avait été développé par L. Isoardi [2, 4] en prenant en compte la densité et la quantité de mouvement du plasma. En vue de l'enrichissement du modèle, nous nous sommes focalisés

sur les équations portant sur les températures ionique et électronique. Les conditions aux limites associées à ces champs sont de type Neumann ou Robin sur la paroi. Nous avons alors développé une méthode originale de type domaine fictif avec pénalisation pour la prise en compte de ces conditions aux limites.

Nous nous sommes attachés en premier lieu à étudier le comportement de cette méthode dans le cas de problèmes modèles, elliptiques et paraboliques linéaires. Des résultats théoriques concernant la convergence par rapport au paramètre de pénalisation η ont été obtenus. Nous avons ensuite analysé la convergence de schémas de discrétisation du problème pénalisé par différences finies. Les tests numériques effectués ont permis de valider la méthode et les résultats théoriques. Nous avons appliqué avec succès cette méthode de pénalisation sur une équation d'advection-diffusion non linéaire proche des équations régissant les températures ionique et électronique du plasma. Cette méthode est actuellement utilisée dans le code SolEdge2D développé par H. Bufferand [33, 39]. Elle permet d'imposer ces conditions aux limites particulières de façon flexible dans des géométries complexes modélisant des configurations réalistes de tokamak.

Pour enrichir encore le modèle physique du plasma de bord, il faudrait prendre en compte également l'évolution du courant électrique. Les conditions aux limites associées sont de type Robin non linéaire. Des premiers tests sur une équation modèle du potentiel électrique ont été réalisés, en utilisant la méthode de pénalisation que nous proposons, dans la thèse de T. Auphan [29]. Les premiers résultats sont prometteurs. Le couplage de toutes les équations relatives aux quantités physiques (densité, quantité de mouvement, températures, courant) ainsi que son introduction dans le code SolEdge2D constituent une perspective très intéressante.

Nous avons ébauché à la fin de ce manuscrit l'extension de la méthode de pénalisation proposée au cas bidimensionnel. Les tests numériques effectués pour des conditions aux limites homogènes sur un bord circulaire ont donné des résultats encourageants, mais une étude plus approfondie reste à faire. Cette étude devra prendre en compte en particulier des conditions aux limites non homogènes, où se pose la question de l'extension au domaine pénalisé de la fonction définie sur la frontière.