



HAL
open science

Méthodes numériques adaptatives pour la simulation de la dynamique de fronts de réaction multi-échelles en temps et en espace

Max Duarte

► **To cite this version:**

Max Duarte. Méthodes numériques adaptatives pour la simulation de la dynamique de fronts de réaction multi-échelles en temps et en espace. Matapli, 2012, 98, pp.99-117. hal-00723378

HAL Id: hal-00723378

<https://hal.science/hal-00723378>

Submitted on 9 Aug 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Méthodes numériques adaptatives pour la simulation de la dynamique de fronts de réaction multi-échelles en temps et en espace *

Max Duarte [†]

5 juin 2012

1 Introduction

Dans de nombreuses applications, l'étude des phénomènes physiques implique le couplage de plusieurs sous-processus qui évoluent simultanément dans le temps mais avec des échelles de temps très différentes; ils présentent également de fortes hétérogénéités spatiales, voire des structures très localisées. Tel est le cas, par exemple, des fronts de réaction qui se propagent dans des milieux homogènes. Ils présentent différents temps caractéristiques allant des échelles chimiques les plus rapides situées dans des fronts très localisés en espace, aux échelles les plus lentes dans les zones chimiquement peu actives et finalement, aux échelles associées à la vitesse de propagation du front qui se trouvent être relativement lentes. Ces fronts possèdent le même caractère multi-échelle en espace avec des épaisseurs de la zone active chimiquement particulièrement petites par rapport aux domaines d'étude nécessaires pour bien décrire ce type de problème. Le nombre élevé de variables et de paramètres qui résultent de la modélisation détaillée de ces phénomènes, ou tout simplement d'une discrétisation garantissant une résolution adéquate des diverses structures spatiales, se traduit par une très forte consommation de ressources informatiques pour mener à bien les simulations numériques correspondantes. Une autre difficulté, qu'il faut prendre en compte, concerne la raideur associée à ce type de problème, que ce soit via le terme source chimique qui présente en général un large spectre d'échelles de temps caractéristiques ou encore via la présence de forts gradients très localisés associés aux fronts de réaction.

Une façon de faire face à ces difficultés est de profiter de la puissance de calcul des moyens informatiques actuels, en exploitant des architectures parallèles

* Cette thèse a été soutenue le 9 décembre 2011 à l'École Centrale Paris, et a été préparée au Laboratoire d'Energétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion (EM2C), UPR CNRS 288, avec une bourse BDI cofinancée par les instituts de mathématiques et de sciences de l'ingénieur du CNRS: INSMI et INSIS. Ces travaux de thèse ont été menés sous la direction de Marc Massot (Lab. EM2C, ECP) et co-encadrés par Stéphane Descombes (Lab. J.-A. Dieudonné, Université Nice Sophia-Antipolis) et Frédérique Laurent (Lab. EM2C, ECP), en collaboration avec Thierry Dumont et Violaine Louvet (Institut Camille Jordan, Université de Lyon) et Christian Tenaud (LIMSI, Orsay).

[†] Laboratoire J.-A. Dieudonné - UMR CNRS 7351, Université Nice Sophia-Antipolis. max.duarte@unice.fr, maximuspy@gmail.com

et massivement parallèles (voir par exemple [7, 48]). Un point de vue différent consiste à développer des techniques de modélisation ou des formulations alternatives qui permettraient d’approcher de façon la plus précise possible la dynamique complète du problème en visant surtout des coûts de calcul moins importants en réduisant la raideur des systèmes étudiés. C’est le cas par exemple des méthodes de réduction des schémas réactionnels [40, 45], des échelles rapides associées au système dynamique du problème [41, 37], ou des techniques d’épaississement de fronts de réaction [9], qui permettent de résoudre de manière efficace un modèle approché des mécanismes multi-échelles en temps et en espace. Une autre voie, complémentaire aux deux précédentes, se focalise sur la conception de schémas numériques robustes, basés sur des estimations théoriques et efficaces dans la pratique, pour résoudre globalement la raideur et la complexité associées aux équations générales, tout en limitant et en optimisant les besoins informatiques en termes de temps de calcul et d’espace mémoire requis. Ce travail de thèse s’inscrit plutôt dans ce dernier axe pour la simulation numérique des phénomènes complexes multi-échelles.

Dans ce contexte général, la recherche scientifique actuelle fait des efforts considérables de développement à l’interface des différentes branches, mathématiques appliquées, informatique scientifique, calcul scientifique intensif, modélisation physique détaillée, pour mener des simulations numériques de plus en plus détaillées et précises, voire prédictives, sur des applications physiques concrètes. Cependant, en grande partie à cause de la haute complexité et les coûts de calculs élevés des simulations dans des configurations réalistes, la validation des résultats numériques se fait soit via une confrontation avec des données expérimentales sur des quantités moyennées¹ ou des paramètres physiques théoriques, soit via l’analyse et l’étude détaillées de cas numériques simplifiés, souvent monodimensionnels, dans un cadre plus académique. Le cadre de ce travail repose sur un nouveau paradigme de stratégies numériques, qui complète et étend cette approche pluri-disciplinaire, par l’introduction de nouveaux outils théoriques et numériques qui permettraient d’évaluer la précision des méthodes numériques. Le contrôle des erreurs introduites par les schémas numériques d’intégration temporelle devient donc l’objectif final, où l’on vise à estimer dans la pratique et de façon quantitative la qualité des résultats numériques, indépendamment de la complexité, de la taille ou de la dimension des modèles.

Nous abordons dans cette thèse le développement d’une nouvelle génération de méthodes numériques pour la résolution des EDP évolutives qui modélisent des phénomènes multi-échelles en temps et en espace issus de divers domaines applicatifs [20]. En conséquence, il s’agit de développer des méthodes qui garantissent la précision des résultats via l’adaptation temps-espace, en présence de forte raideur en s’appuyant sur des outils théoriques solides, tout en permettant une implémentation efficace. Même si nous étendons ces idées à des systèmes plus généraux par la suite, ce travail se focalise dans un premier temps sur les systèmes de réaction-diffusion raides. La base de la stratégie numérique s’appuie sur une décomposition d’opérateur spécifique, dont le pas de temps est choisi de

1. Les détails de la dynamique étant soit hors de portée des mesures expérimentales ou les comparaisons détaillées menant à de très fortes difficultés, on privilégie souvent une comparaison de quantités et fluctuations moyennes. Un axe de recherche dans lequel se situe ce travail est aussi le projet MUSE (PI. M. Massot) du RTRA DIGITEO qui propose quelques éléments de réponse pour mener à bien ce type de comparaisons quantitatives de la dynamique détaillée des phénomènes en lien avec le Laboratoire de Mathématiques d’Orsay et le LIMSI.

manière à respecter un niveau de précision donné par la physique du problème, et pour laquelle chaque sous-pas utilise un intégrateur temporel d'ordre élevé dédié. Ce schéma numérique est ensuite couplé à une approche de multirésolution spatiale adaptative, introduite dans [8], permettant une représentation de la solution sur un maillage dynamique adapté. L'ensemble de cette stratégie a conduit au développement du code de simulation générique 1D/2D/3D académique MBARETE², de manière à valider les développements théoriques et numériques dans le contexte de configurations pratiques raides issues de plusieurs domaines d'application.

L'efficacité algorithmique de la méthode est démontrée par la simulation d'ondes de réaction raides dans le domaine de la dynamique chimique non-linéaire [26] et dans celui de l'ingénierie biomédicale pour la simulation des accidents vasculaires cérébraux [25, 27]. Pour étendre l'approche à des applications plus complexes et plus fortement instationnaires, nous introduisons pour la première fois une technique de séparation d'opérateur avec pas de temps adaptatif qui permet d'atteindre une précision donnée et garantie malgré la raideur des EDP [14]. La méthode de résolution adaptative en temps et en espace qui en résulte, étendue au cas convectif, permet une description consistante de problèmes impliquant une très large palette d'échelles de temps et d'espace et des scénarios physiques très différents, que ce soit la propagation des décharges répétitives pulsées nanoseconde dans le domaine des plasmas [21] ou bien l'allumage et la propagation de flammes dans celui de la combustion [23, 24]. L'objectif de la thèse est l'obtention d'un solveur numérique qui permet la résolution des EDP raides avec contrôle de la précision du calcul en se basant sur des outils d'analyse numérique rigoureux, et en utilisant des moyens de calculs standards dans un premier temps avant de passer vers des architectures de calcul de plus grande taille.

Ces travaux ont aussi motivé de nouvelles études, quelques unes achevées et d'autres en cours de finalisation, tant dans le domaine de l'ingénierie, où par exemple l'algorithme introduit dans [21] a servi de base numérique pour étudier des configurations physiques complexes des décharges plasma [4], que dans le domaine mathématique comme l'analyse numérique des techniques de séparation d'opérateur pour caractériser les erreurs locales d'approximation dans des configurations non-linéaires [13] ou encore la capacité d'approcher correctement la vitesse de propagation de fronts d'onde [15]. Dans ce qui suit, on présente d'abord et de façon succincte quelques détails sur les éléments clés de la stratégie numérique proposée. Puis, quelques illustrations numériques seront proposées, choisies parmi les applications étudiées en détail dans le manuscrit de thèse [20].

2 Construction de la stratégie numérique

On introduit dans cette partie quelques éléments pour expliquer les différents ingrédients de la méthode adaptative en temps et en espace. On présente la stratégie numérique qui se base sur une méthode de séparation d'opérateur

2. La base structurelle de la partie multirésolution du code MBARETE provient du code MR CHORUS (Déclaration d'Invention DI 03760-01), développé par Christian Tenaud au LIMS I pour la résolution des équations de Navier-Stokes compressibles. Voir dans [55] pour plus de détails sur cette implémentation, basée sur des structures d'arbre gradué et tableaux de pointeurs en FORTRAN 90/95. La majorité des algorithmes du code MBARETE sont détaillés dans [20].

avec des schémas d'intégration d'ordre élevé dédiés, l'adaptation dynamique du pas de temps d'intégration ainsi que l'adaptation du maillage à travers une décomposition en base d'ondelettes du type multirésolution.

2.1 Intégration temporelle des EDP raides

On considère pour la suite et à titre d'illustration une équation du type réaction-diffusion mono-dimensionnelle :

$$\left. \begin{aligned} \partial_t u - \partial_x^2 u &= f(u), & x \in \mathbb{R}, t > 0, \\ u(x, 0) &= u_0(x), & x \in \mathbb{R}, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

pour laquelle on suppose que la fonction f contient des échelles temporelles rapides et que la solution de (1) présente également de forts gradients spatiaux. On suppose donc que l'équation (1) est raide et qu'elle modélise des fronts de réaction multi-échelles en temps et en espace. Bien que l'intégration numérique par une méthode explicite permette une implémentation à la fois simple pour des problèmes potentiellement très complexes et facile à coupler à d'autres techniques numériques ou de calcul parallèle, elle implique aussi de sévères restrictions de stabilité pour des problèmes raides et donc un gros effort de calcul à cause des pas d'intégration fortement limités [30]. D'un autre côté, des méthodes implicites dédiées permettent en général de lever cette contrainte mais leur implémentation se limitent souvent à des problèmes de petite taille du fait de leurs besoins en terme d'espace mémoire importants. Leur efficacité est cependant assurée à condition de développer des solveurs appropriés pour les systèmes non-linéaires [19], ce qui n'est pas une tâche simple en ce qui concerne les modèles complexes pour lesquels la convergence des méthodes itératives est très lente et pas toujours garantie.

Une famille de méthodes appelées schémas IMEX (Implicite-Explicite), a été développée afin d'exploiter les avantages de chacune des approches précédentes avec des gains d'efficacité considérables [32, 10, 3, 2, 57]. Ces techniques considèrent l'utilisation des discrétisations temporelles implicite et explicite respectivement pour les termes ou variables raides et non raides du système original. Néanmoins, la construction de ces méthodes hybrides impose des études théoriques rigoureuses pour établir les conditions globales de stabilité et d'ordre du schéma IMEX qui en résulte [28, 34, 6]. Ces conditions induisent des contraintes assez techniques qui limitent l'utilisation des schémas d'ordre élevé pour des problèmes complexes. D'autre part, la stabilité de ces méthodes reste limitée par l'intégration explicite de la partie non raide, en général des termes de transport, de la diffusion ou de la convection. Cette limitation génère des pas d'intégration très restrictifs pour des discrétisations spatiales très fines, souvent nécessaires pour une résolution correcte des fronts ³.

3. Un schéma IMEX très performant est donné par celui d'ordre 1 conçu dans [57] pour des systèmes de réaction-diffusion, pour lequel on considère un solveur RKC [49], basé sur des schémas de Runge-Kutta explicites stabilisés avec des domaines de stabilité étendus le long de l'axe réel négatif, pour la résolution explicite de la diffusion. La réaction est résolue point par point avec un schéma de type Euler implicite emboîté dans les étages RKC.

2.2 Séparation d'opérateur

Une autre façon de profiter de la combinaison intelligente de schémas différents et de réduire les coûts de calcul à travers un choix adéquat de méthodes numériques, consiste à utiliser une technique de séparation d'opérateur ou splitting [52, 42], aussi appelée méthode à pas fractionnaires [53, 54, 59]. Pour l'équation (1), la séparation d'opérateur considère la résolution indépendante des sous-problèmes suivants :

$$\left. \begin{aligned} \partial_t v - \partial_x^2 v &= 0, & x \in \mathbb{R}, t > 0, \\ v(x, 0) &= v_0(x), & x \in \mathbb{R}, \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

et

$$\left. \begin{aligned} \partial_t w &= f(w), & x \in \mathbb{R}, t > 0, \\ w(x, 0) &= w_0(x), & x \in \mathbb{R}. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

En notant par X^t et Y^t respectivement les semi-flots associés aux équations (2) et (3), les approximations de Lie, de premier ordre, de la solution exacte notée $T^t u_0$ de l'équation (1) sont données par

$$\mathcal{L}_1^{\Delta t} u_0 = X^{\Delta t} Y^{\Delta t} u_0, \quad \mathcal{L}_2^{\Delta t} u_0 = Y^{\Delta t} X^{\Delta t} u_0, \quad (4)$$

et celles de Strang [52], de deuxième ordre, par

$$\mathcal{S}_1^{\Delta t} u_0 = X^{\Delta t/2} Y^{\Delta t} X^{\Delta t/2} u_0, \quad \mathcal{S}_2^{\Delta t} u_0 = Y^{\Delta t/2} X^{\Delta t} Y^{\Delta t/2} u_0, \quad (5)$$

où Δt correspond au pas de splitting, c'est à dire au temps pendant lequel les solutions des sous-problèmes (2) et (3) évoluent de façon indépendante⁴.

À la différence des méthodes IMEX, il n'existe aucune interaction entre les résolutions de (2) et (3), et la stabilité des approximations (4) et (5) est garantie à condition que les méthodes, implicites ou explicites, choisies pour approcher X^t et Y^t restent stables. La capacité d'utiliser des schémas de nature complètement différente pour chaque sous-problème est un atout majeur, qui permet un grand choix de solveurs et une simplicité d'implémentation de la méthode; ces caractéristiques sont très appréciées pour traiter des modèles complexes (voir par exemple [35, 12, 44]). En particulier, comme dans de nombreuses applications, la résolution des termes chimiques du type (3) implique des calculs très lourds, principalement à cause de la raideur des équations. Une méthode de séparation d'opérateur permet l'utilisation de schémas implicites dédiés pour l'intégration des termes sources, en tenant compte du fait que, pour des fonctions indépendantes des coordonnées spatiales, on résout en chaque point de discrétisation un problème de taille réduit donné par un système indépendant d'équations différentielles ordinaires. Par contre, la séparation d'opérateur implique un découplage clair et net des divers phénomènes physiques du problème, entre la réaction et la diffusion dans le cas de l'équation (1), et une telle approximation introduit naturellement ce qu'on connaît dans la littérature comme les erreurs de splitting.

4. On peut construire des schémas de splitting d'ordre plus élevé, mais ils impliquent nécessairement des coefficients complexes ou négatifs pour la composition des différents opérateurs [29], pas toujours appropriés pour les problèmes raides et surtout plus difficiles à implémenter dans la pratique.

Même s’il existe des configurations physiques pour lesquelles on réussit à éviter des erreurs de splitting, comme démontré dans [38] pour des équations du type réaction-diffusion-convection, dans la majorité des cas pratiques on essaie de limiter ces erreurs en prenant des pas de splitting suffisamment petits, de l’ordre des échelles chimiques ou numériques les plus rapides, de façon à garantir *a priori* une résolution correcte de la dynamique du problème physique couplé. Rappelons qu’en général un des intérêts principaux à faire du splitting vient du fait que les termes chimiques sont résolus par une méthode implicite, les pas de splitting sont donc souvent directement liés aux conditions de stabilité des méthodes explicites [35, 12, 44], mais la stabilité ne garantit pas nécessairement une résolution correcte du problème à une précision donnée. La définition de critères clairs et généraux pour le choix du pas de splitting reste ainsi un problème ouvert dans la littérature et représente un point clé pour l’amélioration de la performance numérique des méthodes de séparation d’opérateur, notamment vis à vis de la précision numérique des approximations.

2.2.1 Analyse numérique des erreurs de splitting

Bien que l’analyse numérique des méthodes de séparation d’opérateur du type (4) et (5) permette d’établir l’ordre d’approximation de ces schémas par rapport à la solution exacte du problème complet couplé (1), cette analyse classique, basée principalement sur des développements asymptotiques (voir par exemple [29] pour les EDO et [33] pour les EDP), ne reste valable que pour des pas de splitting suffisamment petits et n’est donc pas suffisante pour expliquer la dégénérescence des ordres d’approximation obtenue pour des configurations raides [58, 51, 46]. Une étude mathématique complémentaire caractérisant ces erreurs de splitting dans des régimes non-asymptotiques, c’est à dire pour des pas de splitting relativement grands, constitue un point clé de recherche car l’utilisation des pas de splitting de taille réduite limite énormément l’efficacité de ces schémas notamment pour des problèmes raides qui présentent des échelles rapides de très courte durée, qui doivent être prises en compte et résolues correctement, mais qui souvent n’interviennent pas directement dans la dynamique globale du phénomène. Quelques études théoriques ont été récemment présentées dans ce contexte pour des EDO non-linéaires [36] et des systèmes de réaction-diffusion linéaires [50] et finalement non-linéaires [17], ce qui permet d’évaluer et mieux expliquer l’influence des non-linéarités au sein du problème. Dans toutes ces études on caractérise les erreurs de splitting de Lie et de Strang pour des pas de splitting plus grands que les échelles temporelles les plus rapides, et on montre une meilleure performance des schémas qui finissent par l’opérateur qui présente les échelles les plus rapides dans le système de départ ; en particulier, dans [50] et [17], il s’agit de l’opérateur associé à la réaction.

D’autres études complémentaires ont été aussi menées, basées cette fois sur une représentation exacte des erreurs locales de splitting introduite dans [18], où l’évolution temporelle de l’erreur est explicitement décrite sans avoir recours à un développement asymptotique. L’influence des forts gradients spatiaux dans la solution d’une équation de réaction-diffusion a été ainsi évaluée à travers un système d’EDO qui provient de la discrétisation d’un système linéaire de réaction-diffusion dans [16], ou en dimension infinie dans [22] pour une équation de réaction-diffusion linéarisée⁵. D’après ces études, on obtient des estima-

5. Dans l’article [22], qui n’est pas détaillé dans cette synthèse, on présente une étude

tions alternatives de l'erreur de splitting, qui sont générales et qui permettent en même temps une évaluation précise des bornes trouvées. Par exemple, on a étudié dans [22] une équation du type (1) avec un terme source linéaire : $f(u) = V(x)u$, qui provient de la linéarisation du système de départ autour du profil de la solution, dans ce cas particulier, de type onde. On a donc démontré respectivement dans les lemmes 2.5 et 2.6 dans [22] que, pour un schéma de Lie, \mathcal{L}_1 dans (4), on obtient ces représentations équivalentes de l'erreur ⁶ :

$$\begin{aligned} \|T^{\Delta t}u_0 - \mathcal{L}_1^{\Delta t}u_0\|_{L^2} &\leq \left(\frac{\Delta t^2}{2} \|\partial_x^2 V\|_\infty + \frac{2\Delta t^3}{3} \|\partial_x V\|_\infty^2 \right) \|u_0\|_{L^2} \\ &\quad + \Delta t^2 \|\partial_x V\|_\infty \|\partial_x u_0\|_{L^2}, \end{aligned} \quad (6)$$

et

$$\|T^{\Delta t}u_0 - \mathcal{L}_1^{\Delta t}u_0\|_{L^2} \leq \left(\frac{8}{3\sqrt{2}e} \Delta t^{1.5} \|\partial_x V\|_\infty + \frac{\Delta t^2}{2} \|\partial_x^2 V\|_\infty \right) \|u_0\|_{L^2}, \quad (7)$$

ce qui est cohérent avec les résultats précédents présentés dans [16] pour le cas discrétisé de (1) avec le même type de terme source linéaire.

Ces estimations permettent d'expliquer la réduction d'ordre obtenue pour des solutions avec forts gradients : pour des pas de splitting suffisamment petits, la borne (6) décrit le comportement classique du schéma de Lie à l'ordre 1 ; pour des pas progressivement plus grands et des forts gradients, $\|\partial_x u_0\|_{L^2}$ devient grand et c'est la borne (7) qui permet de caractériser l'erreur locale et en particulier la réduction d'ordre qu'on retrouve dans les calculs numériques pour ce type de configuration. Cependant deux conclusions importantes peuvent être mises en valeur à partir de ces études, illustrées par exemple par les estimations (6) et (7) : d'abord, malgré la perte d'ordre constatée pour ces problèmes raides, on démontre aussi que les erreurs locales restent bornées même pour des pas de splitting relativement grands (ceci est valable aussi pour les cas multi-échelle temporelle décrits dans [17]) ; puis, la réduction d'ordre implique aussi que l'erreur croît avec un taux réduit au fur et à mesure qu'on augmente le pas de splitting, et donc dès qu'on s'éloigne de la zone asymptotique, on obtient des erreurs plus faibles que celles qu'on aurait obtenues avec l'ordre original. Cette dernière caractéristique est encore renforcée par le fait qu'on identifie aussi une réduction du coefficient associé à l'erreur locale : une constante proportionnelle à $\|\partial_x u_0\|_{L^2}$ à l'ordre 2 dans (6), plus grande que celle proportionnelle à $\|u_0\|_{L^2}$ à l'ordre 1.5 dans (7), pour des fronts d'onde localisés en espace comme ceux qui nous intéressent.

Des conclusions similaires peuvent être faites à partir des résultats pour les schémas de Strang dans [16] et [22], et peuvent être aussi étendues pour les schémas de Lie et de Strang dans le cadre des équations de réaction-diffusion avec un terme source complètement non-linéaire [13].

2.2.2 Construction d'un schéma de splitting dédié

Avec cette base théorique qui permet d'étendre la caractérisation des schémas de séparation d'opérateur aux problèmes raides pour une large plage de

théorique et numérique de la combinaison des méthodes de séparation d'opérateur et l'algorithme "parallèle" [39] pour des configurations raides.

6. L'étude du cas \mathcal{L}_2 est incluse dans [20] et donne des résultats similaires.

pas de splitting, on a introduit dans [26] une nouvelle façon de construire ce type de solveurs pour des systèmes de réaction-diffusion. En tenant compte du fait que, dans plusieurs phénomènes physiques, les temps caractéristiques associés aux divers processus ne sont pas nécessairement du même ordre, et que la dynamique globale peut aussi évoluer à une échelle temporelle complètement différente, l'idée principale consiste à découpler complètement la résolution du problème, non seulement au niveau des solveurs utilisés pour chaque sous-problème, mais aussi en termes de pas d'intégration de chaque sous-partie et du pas de splitting. L'analyse numérique montre que les erreurs d'approximation des méthodes de séparation d'opérateur sont reliées au pas de splitting dans tous les cas, asymptotiques comme non-asymptotiques, à condition que les sous-problèmes soient résolus de manière exacte. On choisit donc des méthodes dédiées d'ordre élevé, de préférence au moins 3, mono-pas et avec adaptation automatique du pas de temps à précision près pour intégrer chaque sous-problème. De cette façon, on garantit des erreurs d'intégration négligeables par rapport aux erreurs de splitting, celles-ci dépendantes du pas de splitting, lequel est choisi librement vis à vis des contraintes de stabilité ou de précision associées aux termes chimiques raides ou de la taille de la grille de discrétisation spatiale, mais en fonction de la précision désirée pour décrire la dynamique globale du phénomène multi-échelle.

Pour les problèmes de réaction-diffusion, on a choisi dans [26] pour la résolution de la réaction une méthode de Runge-Kutta d'ordre 5, mono-pas et implicite avec des propriétés de A - et L -stabilités telle que Radau5 [30]; et le solveur ROCK4 [1], basé sur une méthode de type Runge-Kutta-Chebyshev, comme RKC [49], avec des domaines de stabilité étendus le long de l'axe réel négatif, pour la résolution explicite de la diffusion. Les deux solveurs adaptent leurs pas d'intégration selon les tolérances η_{Radau5} et η_{ROCK4} fixées au préalable par l'utilisateur. Finalement et d'après [17], on utilise le schéma de Strang \mathcal{S}_2 dans (5) pour les problèmes considérés avec un terme source très raide. D'autres solveurs pour les sous-problèmes peuvent aussi être utilisés selon les mêmes principes, lesquels s'appliquent également à d'autres types de problème, en cherchant toujours des erreurs d'intégration faibles par rapport à l'erreur de splitting. Chacun des solveurs doit résoudre tout le spectre d'échelles temporelles associées à chaque sous-problème de façon indépendante en garantissant la stabilité et la précision des calculs. Le pas de splitting mesure ainsi le degré de découplage physique du problème pour une précision donnée, sachant que plus ce découplage devient grand et plus l'efficacité de la méthode augmente. D'où l'importance d'ajuster correctement ce paramètre.

2.2.3 Adaptation dynamique du pas de splitting

Pour des problèmes de propagation de fronts à vitesse relativement constante le pas de splitting peut aussi être fixe, car le temps caractéristique global du problème est intrinsèquement lié à la vitesse de l'onde; ceci a été démontré numériquement par exemple dans [25] et [26]. Dans la littérature, les configurations les plus classiques considèrent soit un pas de splitting qui suit l'échelle la plus rapide, par exemple chimique, de diffusion ou convective, si toutes les intégrations se font explicitement; soit un pas de splitting qui varie selon la stabilité des schémas explicites et qui n'est donc pas capable de prédire les variations physiques du phénomène global, sauf celles directement associées à

l'intégration explicite, qui provient d'ailleurs du phénomène le moins raide. La question qui se pose est de savoir si l'on peut adapter de façon efficace, ce qui exclue la première possibilité précédente, le pas de splitting aux temps caractéristiques du phénomène, pour une vaste quantité de problèmes instationnaires avec des fortes variations temporelles et différents scénarios physiques.

Pour faire face à ce type de problème et en considérant une méthode de splitting pour laquelle l'erreur d'intégration temporelle est pilotée par le pas de splitting comme introduite précédemment dans [26], on a proposé dans [14] une méthode adaptative de séparation d'opérateur basée sur l'introduction d'une deuxième méthode de splitting emboîtée dans le schéma classique de Strang \mathcal{S}_2 . On définit donc le schéma de Strang décalé comme

$$\mathcal{S}_\delta^{\Delta t} u_0 = Y^{(1/2-\delta)\Delta t} X^{\Delta t} Y^{(1/2+\delta)\Delta t} u_0, \quad (8)$$

d'ordre local 2 et avec δ compris entre $(-1/2, 0)$ et $(0, 1/2)$, lequel peut être vu comme une perturbation du schéma classique \mathcal{S}_2 , noté \mathcal{S} dans ce qui suit pour simplifier l'écriture. On a alors démontré dans le théorème 3.2 de [14] que

$$T^{\Delta t} u_0 - \mathcal{S}_\delta^{\Delta t} u_0 = \underbrace{T^{\Delta t} u_0 - \mathcal{S}^{\Delta t} u_0}_{\mathcal{O}(\Delta t^3)} + \underbrace{\mathcal{S}^{\Delta t} u_0 - \mathcal{S}_\delta^{\Delta t} u_0}_{\mathcal{O}(\delta \Delta t^2)}, \quad (9)$$

et en particulier

$$\mathcal{S}^{\Delta t} u_0 - \mathcal{S}_\delta^{\Delta t} u_0 = \delta \Delta t^2 f''(u_0) (\partial_x u_0)^2 + \mathcal{O}(\delta \Delta t^3). \quad (10)$$

En calculant pour chaque Δt les solutions

$$\begin{pmatrix} \mathcal{S}^{\Delta t} u_0 \\ \mathcal{S}_\delta^{\Delta t} u_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y^{\Delta t/2} X^{\Delta t} Y^{\Delta t/2} u_0 \\ Y^{(1/2-\delta)\Delta t} X^{\Delta t} Y^{(1/2+\delta)\Delta t} u_0 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

où le premier demi-pas est commun aux deux schémas et les pas successifs sont calculés simultanément en doublant le nombre de variables, on peut estimer l'erreur locale de l'intégration (10) et le nouveau pas de splitting Δt^{new} pour une tolérance η choisie, par

$$\Delta t^{\text{new}} = \Delta t \sqrt{\frac{\eta}{\|\mathcal{S}^{\Delta t} u_0 - \mathcal{S}_\delta^{\Delta t} u_0\|}}. \quad (12)$$

Le choix de (8) assure un comportement similaire des deux schémas vis à vis de la réduction potentielle de l'ordre. La solution $\mathcal{S}^{\Delta t} u_0$ obtenue est ainsi acceptée si l'estimateur $\|\mathcal{S}^{\Delta t} u_0 - \mathcal{S}_\delta^{\Delta t} u_0\|$ est plus petit que la tolérance η , et rejetée dans le cas contraire jusqu'au moment où l'on obtient des solutions avec une précision η . Le pas de splitting est mis à jour après chaque évaluation de (12), de même pour le temps d'intégration t , mais seulement si la dernière solution $\mathcal{S}^{\Delta t} u(t)$ est acceptée. Finalement, le choix correct du paramètre δ , comme détaillé dans [14], permet de garantir que l'estimateur d'erreur (10) est toujours valable même pour des régimes non-asymptotiques.

2.3 Adaptation dynamique du maillage : multirésolution

Dans toutes les études théoriques précédentes on a toujours fait l'analyse des erreurs directement en dimension infinie, ou bien on a négligé l'impact des erreurs de discrétisation spatiale sur les erreurs d'approximation numérique, ce qui

se passerait par exemple si on discrétise les équations d'une manière suffisamment fine. D'un point de vue plutôt physique, une résolution fine des structures spatiales associées aux fronts permettraient une reproduction numérique fiable ainsi que des comparaisons qualitatives avec l'expérience, quelque fois même quantitatives. Dans tous les cas, on a intérêt à avoir des représentations spatiales suffisamment fines de façon à résoudre les différentes échelles spatiales du phénomène ; ceci implique cependant des simulations numériques de grande taille et par conséquent très coûteuses. Une façon souvent performante de réduire la taille et les coûts du calcul, pour des problèmes qui présentent des fronts localisés, consiste à raffiner le maillage en fonction de la résolution requise localement dans le domaine de calcul. Même s'il y a plusieurs techniques d'adaptation de maillage dans la littérature et elles sont largement utilisées dans des applications scientifiques et même industrielles, seules quelques unes ont la capacité d'évoluer dynamiquement.

Une des techniques d'adaptation dynamique de maillage, connue sous le nom de multirésolution, est basée sur la décomposition en base d'ondelettes de fonctions discrétisées. Cette approche a été d'abord partiellement introduite dans [31] pour des problèmes de conservation, et ensuite étendue dans [8] avec la base théorique correspondante. Dans [26], on a donc couplé à la technique de splitting détaillée brièvement dans le §2.2.2, une approche de multirésolution, basée sur [8], de façon à résoudre pour la première fois des EDP raides en utilisant un algorithme de multirésolution. Tous les détails sur les aspects théoriques et pratiques de la multirésolution peuvent être trouvés dans [43]. On a considéré dans notre implémentation une discrétisation de type volumes finis en coordonnées cartésiennes ; on considère ainsi un ensemble de grilles dyadiques emboîtées, où la taille de la grille la plus fine est limitée par le niveau de résolution nécessaire ou tout simplement par l'espace mémoire dont on dispose. Une décomposition du type multirésolution permet de représenter une fonction discrétisée sur la grille la plus fine dans une base d'ondelettes définie sur l'ensemble de grilles dont les coefficients associées à chaque cellule deviennent des estimateurs locaux de la régularité spatiale de la fonction. En définissant un paramètre de seuillage ε , on élimine toutes les cellules de régularité locale élevée et on comprime ainsi la représentation spatiale de la fonction discrétisée en fonction de la valeur choisie de ε .

En particulier pour la solution $\mathbf{U}(t)$ du problème semi-discrétisé correspondante à (1), et l'approximation multirésolution $\mathbf{U}^{\text{MR}}(t)$ obtenue avec le même intégrateur temporel mais en adaptant dynamiquement le maillage, on obtient que

$$\|\mathbf{U}(t) - \mathbf{U}^{\text{MR}}(t)\|_{L^2} \leq C\varepsilon, \quad (13)$$

pour une constante C , positive et bornée. Cette borne a été démontré dans [8], mais pour la résolution d'une équation scalaire hyperbolique ; elle a été cependant considérée et prouvée dans la pratique pour des problèmes paraboliques par exemple dans [47, 5]. Le paramètre ε permet ainsi de régler le niveau de compression de la représentation spatiale avec une précision donnée par rapport à celle correspondant à la résolution spatiale la plus fine ; cette capacité de contrôler les erreurs d'approximation introduites par la compression des représentations spatiales tout en préservant la structure des équations de départ ainsi que le caractère conservatif constitue le plus grand avantage des méthodes de multirésolution. Comme l'intégration temporelle s'effectue sur un maillage fixe,

le cadre théorique considéré dans [14] reste valable dans la pratique et on note par $\mathbf{U}_{\text{split}}(t)$ la solution du système semi-discrétisé correspondante à (1) avec le schéma de splitting adaptatif; en considérant l'adaptation temporelle donnée par (12) et (13), on peut voir que les erreurs d'approximation de splitting et celles provenant de la multirésolution peuvent être retrouvées dans la solution $\mathbf{U}_{\text{split}}^{\text{MR}}(t)$, qui considère simultanément l'adaptation en temps et en espace :

$$\|\mathbf{U}(t) - \mathbf{U}_{\text{split}}^{\text{MR}}(t)\|_{L^2} \leq \underbrace{\|\mathbf{U}(t) - \mathbf{U}_{\text{split}}(t)\|_{L^2}}_{\mathcal{O}(\eta)} + \underbrace{\|\mathbf{U}_{\text{split}}(t) - \mathbf{U}_{\text{split}}^{\text{MR}}(t)\|_{L^2}}_{\mathcal{O}(\varepsilon)}. \quad (14)$$

Un choix raisonnable de ces paramètres considère une tolérance de multirésolution ε plus petite que celle de l'intégration numérique η , de façon à garantir que l'évolution temporelle du phénomène, y compris les diverses structures spatiales multi-échelles, restent toujours bien représentées en espace. Dans la pratique des tolérances données par la même valeur permettent d'obtenir des solutions suffisamment précises avec un coût de calcul légèrement inférieur, comme démontré par exemple dans [21], en tenant compte des critères conservatifs de raffinement considérés pour cette implémentation de la multirésolution [26].

3 Illustration numérique

À titre d'illustration, on va considérer dans cette partie quelques aspects d'une étude d'auto-allumage des milieux réactifs, dont le modèle provient de [56], présentée dans [24]. La figure 1 montre la configuration physique : on considère deux milieux gazeux, confinés dans un domaine quadrangulaire et initialement de surfaces égales séparées par une ligne droite. Dans le demi-plan supérieur, on a du fuel frais à une température initial $T_{\text{F},0}$ de 300 K, et de l'oxygène chaud dans la partie inférieure à une température $T_{\text{O},0}$ de 1000 K. Le problème est modélisé par un système de réaction-diffusion-convection à deux variables où le champs de vitesse, donné par un tourbillon variable en temps et en espace, est calculé analytiquement et imposée pendant la résolution de la convection. On utilise les solveurs mentionnés dans le §2.2.2 pour les sous-problèmes de réaction et diffusion, et le schéma OSMP3 [11], d'ordre 3, pour le pas de convection effectué au milieu selon le schéma de Strang \mathcal{S}_2 .

À l'instant initial, on introduit le tourbillon centré au point $(0, 0)$, qui accélère ainsi le mélange des gaz ; un front de flamme commence à se mettre en place une fois qu'une certaine température est atteinte localement et que le mélange réactif s'allume, comme on voit dans la figure 1 à travers l'évolution temporelle de la température. Pour cette configuration de paramètres physiques, la dynamique de l'allumage de la flamme de diffusion correspond d'abord à un allumage dans les bras du tourbillon puis, dans un deuxième temps, en son cœur, avec des temps d'allumage différents impossibles à déterminer au préalable. Ce caractère multi-échelle temporelle, très localisé en espace, rend la description numérique du problème extrêmement délicate principalement du fait de l'apparition soudaine de mécanismes physiques différents, nécessitant une résolution spatiale très fine pour les capturer correctement. Ce problème constitue ainsi un très bon exemple de phénomène multi-échelle en temps et en espace pour lequel des méthodes numériques avec une capacité d'adaptation spatio-temporelle sont non seulement efficaces mais indispensables.

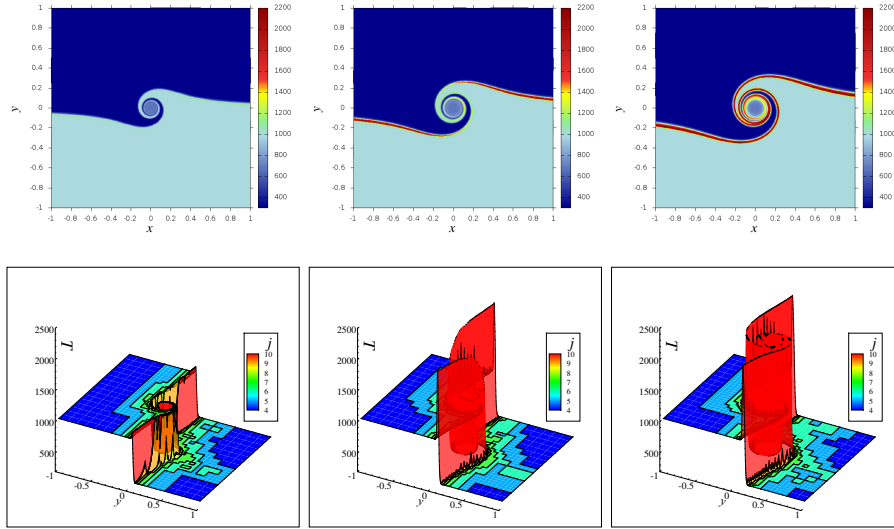


FIGURE 1 – Évolution de la température T à $t = 5 \times 10^{-5}$ (gauche), 10^{-4} (centre), et $1,5 \times 10^{-4}$ (droite). Température initiale du fuel frais : $T_{F,0} = 300$ K, et celle de l’oxygène chaud : $T_{O,0} = 1000$ K. Bas : maillage adapté avec $\varepsilon = 10^{-3}$ et une résolution équivalente à 1024^2 points au niveau le plus fin $j = 10$.

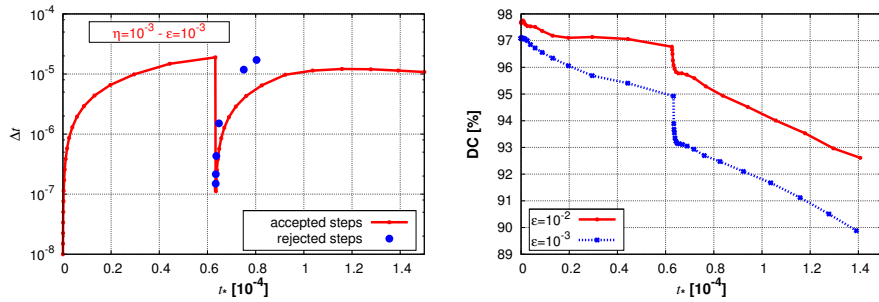


FIGURE 2 – Adaptation en temps et en espace donnée par l’évolution des pas de splitting avec $\eta = 10^{-3}$ (gauche), et la compression des données pour ε égal à 10^{-2} et 10^{-3} (droite).

Dans la figure 2, on voit comment le pas de splitting augmente progressivement depuis une valeur initiale fixée à 10^{-8} pour garantir la prise en compte des variations rapides du tourbillon, jusqu’à l’ordre de 10^{-5} pendant la phase de mélange. Des rejets successifs sont constatées autour du moment de l’allumage massif du front de flamme, qui fait descendre le pas de splitting jusqu’à l’ordre de 10^{-7} . Puis, une fois que le front de flamme est complètement développé, le pas de splitting recommence à augmenter jusqu’à un ordre légèrement inférieur à celui correspondant au mélange initial, ce qui indique une dynamique temporelle différente entre les états initial et final. Ce comportement du pas de splitting

dépend du niveau de précision demandé. Dans le cas illustré, la tolérance η a été fixée à 10^{-3} . D'un autre côté, la compression de données est définie comme le pourcentage de cellules qui ont été éliminées par rapport à la grille la plus fine, 1024^2 pour cette configuration. Il y a clairement une dépendance vis à vis de la tolérance ε choisie et, comme le taux de remaillage est fixé par le pas de splitting, on voit que cela permet de mettre à jour rapidement le raffinement nécessaire pour représenter le front, dont l'épaisseur augmente considérablement après l'allumage (voir la figure 1).

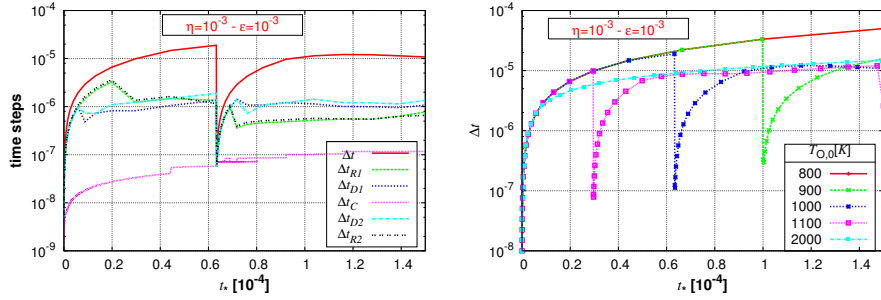


FIGURE 3 – Gauche : évolution du pas de splitting Δt , des sous-pas réactifs Δt_{R1} et Δt_{R2} , de diffusion Δt_{D1} et Δt_{D2} , et convectifs Δt_C . Droite : évolution du pas de splitting Δt pour différentes températures initiales de l'oxygène $T_{O,0}$ et température du fuel $T_{F,0}$ de 300 K. Tolérances η et ε égales à 10^{-3} .

Pour cette configuration, les divers sous-pas utilisés par chaque solveur sont représentés dans la figure 3. L'avantage de découpler la gestion du temps d'intégration est considérable compte tenu de la différence importante entre les divers pas requis par les sous-problèmes et les pas de splitting nécessaires pour atteindre la tolérance donnée ; cette différence sera encore accentuée par des schémas d'ordre inférieur à ceux considérés ici. Les pas réactifs illustrés correspondent à ceux dans le front, dans les autres régions les pas locaux augmentent rapidement jusqu'à $\Delta t/2$ dans les zones suffisamment éloignées du front. Cette simulation numérique prend à peu près 9 minutes en temps de calcul par rapport aux 208 minutes avec la multirésolution mais avec un pas de splitting de 10^{-7} correspondant à l'ordre de la contrainte la plus sévère pour cette configuration de solveurs : le pas convectif nécessaire pour garantir la stabilité. La résolution à grille uniforme de 1024^2 et pas de splitting constant prend quant à elle 675 minutes.

Finalement, la figure 3 montre aussi différentes configurations physiques pour la température initiale de l'oxygène et les pas de splitting qui en résultent avec le même solveur adaptatif en temps et en espace et les mêmes tolérances ; on y voit en particulier les différents comportements du pas de temps adaptatif en fonction du moment de l'allumage, ce qui illustre bien le lien qui existe entre les vraies échelles physiques du problème et celles capturées par le schéma pour la précision donnée. En particulier ce pas de splitting permet de découpler correctement le système de départ en fonction du comportement physique du problème et en aucun cas en fonction de la stabilité ou de la précision de l'intégration des sous-pas.

4 Conclusions principales

Pour un problème semi-discrétisé dont la discrétisation spatiale est fixée par le caractère multi-échelle du problème ou bien limitée par les ressources informatiques dont on dispose, la combinaison de ces méthodes adaptatives en temps et en espace permet de réduire les coûts de calcul tout en respectant un certain niveau de précision des représentations spatio-temporelles. La conception de la stratégie numérique, basée sur des principes théoriques et pratiques solides, permet de généraliser l'approche à diverses applications ayant un caractère multi-échelle important en temps et en espace, y compris à des scénarios physiques complètement différents. La complexité algorithmique est substantiellement réduite puisqu'on a à définir seulement deux paramètres pour mener les calculs : la valeur de seuillage ε de la multirésolution qui pondère la compression de données et les erreurs d'approximation associées aux représentations spatiales comprimées ; et la tolérance de précision de la séparation d'opérateur η qui limite dynamiquement le degré de découplage physique du phénomène pour un certain niveau de précision de l'intégration numérique. Cette évaluation de la qualité des résultats numériques se fait ainsi simultanément avec la résolution du problème et de façon indépendante de la dimension ou complexité du modèle d'étude.

De cette façon, ce travail propose une nouvelle génération de méthodes numériques adaptatives qui permet d'obtenir, y compris pour des configurations 3D, des estimations de précision temps/espace sur un niveau de grille la plus fine fixé pour une vaste gamme de modèles physiques multi-échelles en temps et en espace. Grâce à ces outils, nous sommes parvenus à mener à bien des simulations numériques pour différentes applications allant des ondes chimiques non-linéaires et des accidents vasculaires cérébraux, aux études de flamme laminaires de prémélange et de diffusion, ainsi qu'aux décharges plasma du type streamer. Les outils développés ont ainsi permis des avancées spécifiques dans ces domaines d'application comme détaillées dans [4], [24] et [27].

Références

- [1] A. Abdulle. Fourth order Chebyshev methods with recurrence relation. *SIAM J. Sci. Comput.*, 23(6) :2041–2054, 2002.
- [2] U.M. Ascher, S.J. Ruuth, and R.J. Spiteri. Implicit-explicit Runge-Kutta methods for time-dependent partial differential equations. *Appl. Numer. Math.*, 25(2-3) :151–167, 1997.
- [3] U.M. Ascher, S.J. Ruuth, and B.T.R. Wetton. Implicit-explicit methods for time-dependent partial differential equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 32(3) :797–823, 1995.
- [4] Z. Bonaventura, A. Duarte, M. Bourdon, and M. Massot. Derivation of a merging condition for two interacting streamers in air. *Submitted, available at <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00697691>*, pages 1–9, 2012.
- [5] R. Bürger, R. Ruiz-Baier, and K. Schneider. Adaptive multiresolution methods for the simulation of waves in excitable media. *J. Sci. Comput.*, 43(2) :261–290, 2010.

- [6] B. Chabaud and Q. Du. A hybrid implicit-explicit adaptive multirate numerical scheme for time-dependent equations. *J. Sci. Comput.*, 51 :135–157, 2012.
- [7] J.H. Chen. Petascale direct numerical simulation of turbulent combustion-fundamental insights towards predictive models. *Proc. Combust. Inst.*, 33(1) :99–123, 2011.
- [8] A. Cohen, S.M. Kaber, S. Müller, and M. Postel. Fully adaptive multiresolution finite volume schemes for conservation laws. *Math. Comp.*, 72(241) :183–225, 2003.
- [9] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids*, 12(7) :1843–1863, 2000.
- [10] M. Crouzeix. Une méthode multipas implicite-explicite pour l’approximation des équations d’évolution paraboliques. *Numer. Math.*, 35(3) :257–276, 1980.
- [11] V. Daru and C. Tenaud. High order one-step monotonicity-preserving schemes for unsteady compressible flow calculations. *J. Comput. Phys.*, 193(2) :563–594, 2004.
- [12] M.S. Day and J.B. Bell. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry. *Combust. Theory Model.*, 4 :535–556, 2000.
- [13] S. Descombes, M. Duarte, T. Dumont, F. Laurent, V. Louvet, and M. Massot. Analysis of operator splitting order reduction in the non-asymptotic regime for nonlinear reaction diffusion equations and application to the dynamics of premixed flames with complex chemistry. *In preparation*, 2012.
- [14] S. Descombes, M. Duarte, T. Dumont, V. Louvet, and M. Massot. Adaptive time splitting method for multi-scale evolutionary partial differential equations. *Confluentes Math.*, 3(3) :413–443, 2011.
- [15] S. Descombes, M. Duarte, and M. Massot. Characterization of splitting errors in the solution of wavefront speeds. *In preparation*, 2012.
- [16] S. Descombes, T. Dumont, V. Louvet, and M. Massot. On the local and global errors of splitting approximations of reaction-diffusion equations with high spatial gradients. *Int. J. Comput. Math.*, 84(6) :749–765, 2007.
- [17] S. Descombes and M. Massot. Operator splitting for nonlinear reaction-diffusion systems with an entropic structure : singular perturbation and order reduction. *Numer. Math.*, 97(4) :667–698, 2004.
- [18] S. Descombes and M. Schatzman. Strang’s formula for holomorphic semi-groups. *J. Math. Pures Appl. (9)*, 81(1) :93–114, 2002.
- [19] P. Deuffhard. *Newton methods for nonlinear problems*, volume 35 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 2004. Affine invariance and adaptive algorithms.
- [20] M. Duarte. *Méthodes numériques adaptatives pour la simulation de la dynamique de fronts de réaction multi-échelles en temps et en espace*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, France, 2011. Available online from <http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00667857>.
- [21] M. Duarte, Z. Bonaventura, M. Massot, A. Bourdon, S. Descombes, and T. Dumont. A new numerical strategy with space-time adaptivity and error

- control for multi-scale streamer discharge simulations. *J. Comput. Phys.*, 231 :1002–1019, 2012.
- [22] M. Duarte, M. Massot, and S. Descombes. Parareal operator splitting techniques for multi-scale reaction waves : numerical analysis and strategies. *ESAIM Math. Model. Numer. Anal.*, 45(5) :825–852, 2011.
- [23] M. Duarte, M. Massot, S. Descombes, and T. Dumont. Adaptive time-space algorithms for the simulation of multi-scale reaction waves. In *Finite volumes for complex applications. VI. Problems & perspectives. Volume 1, 2*, volume 4 of *Springer Proc. Math.*, pages 379–387. Springer, Heidelberg, 2011.
- [24] M. Duarte, M. Massot, S. Descombes, C. Tenaud, and S. Candel. Time-space adaptive numerical methods for the simulation of combustion fronts. In *Ann. Res. Briefs 2011*, pages 347–358. Center for Turbulence Research, Stanford University, 2012.
- [25] M. Duarte, M. Massot, S. Descombes, C. Tenaud, T. Dumont, V. Louvet, and F. Laurent. New resolution strategy for multi-scale reaction waves using time operator splitting and space adaptive multiresolution : Application to human ischemic stroke. *ESAIM : Proc.*, 34 :277–290, 2011.
- [26] M. Duarte, M. Massot, S. Descombes, C. Tenaud, T. Dumont, V. Louvet, and F. Laurent. New resolution strategy for multi-scale reaction waves using time operator splitting, space adaptive multiresolution and dedicated high order implicit/explicit time integrators. *SIAM J. Sci. Comput.*, 34(1) :A76–A104, 2012.
- [27] T. Dumont, M. Duarte, S. Descombes, M.A. Dronne, M. Massot, and V. Louvet. Simulation of human ischemic stroke in realistic 3D geometry. *Submitted, available at <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00546223>*, pages 1–27, 2012.
- [28] J. Frank, W. Hundsdorfer, and J.G. Verwer. On the stability of implicit-explicit linear multistep methods. *Appl. Numer. Math.*, 25(2-3) :193–205, 1997.
- [29] E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner. *Geometric numerical integration*, volume 31 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, second edition, 2006. Structure-preserving algorithms for ordinary differential equations.
- [30] E. Hairer and G. Wanner. *Solving ordinary differential equations II*, volume 14 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, second edition, 1996. Stiff and differential-algebraic problems.
- [31] A. Harten. Multiresolution algorithms for the numerical solution of hyperbolic conservation laws. *Comm. Pure Appl. Math.*, 48(12) :1305–1342, 1995.
- [32] E. Hofer. A partially implicit method for large stiff systems of ODEs with only few equations introducing small time-constants. *SIAM J. Numer. Anal.*, 13(5) :645–663, 1976.
- [33] W. Hundsdorfer and J. Verwer. *Numerical solution of time-dependent advection-diffusion-reaction equations*, volume 33 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 2003.

- [34] C.A. Kennedy and M.H. Carpenter. Additive Runge-Kutta schemes for convection-diffusion-reaction equations. *Appl. Numer. Math.*, 44(1-2) :139–181, 2003.
- [35] O.M. Knio, H.N. Najm, and P.S. Wyckoff. A semi-implicit numerical scheme for reacting flow. II. Stiff, operator-split formulation. *J. Comput. Phys.*, 154(2) :428–467, 1999.
- [36] R. Kozlov, A. Kværnø, and B. Owren. The behaviour of the local error in splitting methods applied to stiff problems. *J. Comput. Phys.*, 195(2) :576–593, 2004.
- [37] S.H. Lam and D.A. Goussis. The CSP method for simplifying kinetics. *Int. J. Chem. Kinet.*, 26(4) :461–486, 1994.
- [38] D. Lanser and J.G. Verwer. Analysis of operator splitting for advection-diffusion-reaction problems from air pollution modelling. *J. Comput. Appl. Math.*, 111(1-2) :201–216, 1999.
- [39] J.-L. Lions, Y. Maday, and G. Turinici. Résolution d’EDP par un schéma en temps “pararéel”. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 332(7) :661–668, 2001.
- [40] T. Lu and C.K. Law. Toward accommodating realistic fuel chemistry in large-scale computations. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 35(2) :192–215, 2009.
- [41] U. Maas and S.B. Pope. Simplifying chemical kinetics : Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combust. Flame*, 88(3-4) :239–264, 1992.
- [42] G.I. Marchuk. Splitting and alternating direction methods. In *Handbook of numerical analysis, Vol. I*, Handb. Numer. Anal., I, pages 197–462. North-Holland, Amsterdam, 1990.
- [43] S. Müller. *Adaptive multiscale schemes for conservation laws*, volume 27 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*. Springer-Verlag, Berlin, 2003.
- [44] H.N. Najm and O.M. Knio. Modeling low Mach number reacting flow with detailed chemistry and transport. *J. Sci. Comput.*, 25(1-2) :263–287, 2005.
- [45] S. Pope and Z. Ren. Efficient implementation of chemistry in computational combustion. *Flow Turb. Combust.*, 82 :437–453, 2009.
- [46] D.L. Ropp, J.N. Shadid, and C.C. Ober. Studies of the accuracy of time integration methods for reaction-diffusion equations. *J. Comput. Phys.*, 194(2) :544–574, 2004.
- [47] O. Roussel, K. Schneider, A. Tsigulin, and H. Bockhorn. A conservative fully adaptive multiresolution algorithm for parabolic PDEs. *J. Comput. Phys.*, 188(2) :493–523, 2003.
- [48] Y. Shi, W.H. Green Jr., H.-W. Wong, and O.O. Oluwole. Redesigning combustion modeling algorithms for the Graphics Processing Unit (GPU) : Chemical kinetic rate evaluation and ordinary differential equation integration. *Combust. Flame*, 158(5) :836–847, 2011.
- [49] B.P. Sommeijer, L.F. Shampine, and J.G. Verwer. RKC : an explicit solver for parabolic PDEs. *J. Comput. Appl. Math.*, 88(2) :315–326, 1998.

- [50] B. Sportisse. An analysis of operator splitting techniques in the stiff case. *J. Comput. Phys.*, 161(1) :140–168, 2000.
- [51] B. Sportisse, G. Bencteux, and P. Plion. Method of lines versus operator splitting for reaction-diffusion systems with fast chemistry. *Environ. Model. Software*, 15(6-7) :673–679, 2000.
- [52] G. Strang. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 5 :506–517, 1968.
- [53] R. Témam. Sur l’approximation de la solution des équations de Navier-Stokes par la méthode des pas fractionnaires. I. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 32 :135–153, 1969.
- [54] R. Témam. Sur l’approximation de la solution des équations de Navier-Stokes par la méthode des pas fractionnaires. II. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 33 :377–385, 1969.
- [55] C. Tenaud and M. Duarte. Tutorials on adaptive multiresolution for mesh refinement applied to fluid dynamics and reactive media problems. *ESAIM : Proc.*, 34 :184–239, 2011.
- [56] D. Thévenin and S. Candel. Ignition dynamics of a diffusion flame rolled up in a vortex. *Phys. Fluids*, 7(2) :434–445, 1995.
- [57] J.G. Verwer and B.P. Sommeijer. An implicit-explicit Runge-Kutta-Chebyshev scheme for diffusion-reaction equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 25(5) :1824–1835, 2004.
- [58] J.G. Verwer and B. Sportisse. Note on operator splitting in a stiff linear case. Technical report, 1998. Available online from oai.cwi.nl/oai/asset/4597/04597D.pdf.
- [59] N.N. Yanenko. *The method of fractional steps. The solution of problems of mathematical physics in several variables*. Springer-Verlag, New York, 1971.