



**HAL**  
open science

# Développement de modèles et analyse de méthodes numériques pour des problèmes cinétiques issus de la physique des plasmas et des écoulements gaz-particules

Frédérique Charles

► **To cite this version:**

Frédérique Charles. Développement de modèles et analyse de méthodes numériques pour des problèmes cinétiques issus de la physique des plasmas et des écoulements gaz-particules. Equations aux dérivées partielles [math.AP]. Sorbonne Université, 2021. tel-04119380

**HAL Id: tel-04119380**

**<https://hal.science/tel-04119380>**

Submitted on 6 Jun 2023

**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.



Mémoire de synthèse en vue d'obtenir une

## HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

Spécialité : Mathématiques

Laboratoire Jacques-Louis Lions | UMR 7598

---

DÉVELOPPEMENT DE MODÈLES ET ANALYSE DE MÉTHODES  
NUMÉRIQUES POUR DES PROBLÈMES CINÉTIQUES ISSUS  
DE LA PHYSIQUE DES PLASMAS ET DES ÉCOULEMENTS  
GAZ-PARTICULES

---

Frédérique CHARLES

soutenu le 11 janvier 2021 devant le jury composé de

Anne-Laure DALIBARD (Examinatrice) - Sorbonne Université  
Pierre DEGOND (Rapporteur) - CNRS & Université Paul Sabatier  
Bruno DESPRÉS (Examinateur) - Sorbonne Université  
Laurent DESVILLETES (Examinateur) - Université de Paris  
Shi JIN (Rapporteur) - Shanghai Jiao Tong University  
Pauline LAFITTE (Rapporteur) - CentraleSupélec  
Emmanuel MAITRE (Examinateur) - Université Grenoble Alpes

après rapports de

Pierre DEGOND (Rapporteur) - CNRS & Université Paul Sabatier  
Shi JIN (Rapporteur) - Shanghai Jiao Tong University  
Pauline LAFITTE (Rapporteur) - CentraleSupélec



# Table des matières

<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>(Pré)-publications de l'auteur</b>	<b>5</b>
<b>1 Méthodes numériques Lagrangiennes et semi-Lagrangiennes pour les équations de transport</b>	<b>7</b>
1.1 Introduction . . . . .	8
1.2 Une estimation de convergence d'un schéma semi-Lagrangien pour Vlasov-Poisson . . . . .	12
1.2.1 Une estimation d'erreur améliorée pour un schéma semi-Lagrangien . . . . .	12
1.2.2 Application à l'équation de Vlasov-Poisson . . . . .	14
1.3 Analyses de convergence pour la méthode LTP . . . . .	15
1.3.1 Méthode LTP pour un flot passif . . . . .	15
1.3.2 Application à l'équation de Vlasov-Poisson . . . . .	17
1.3.3 Méthode LTP pour une équation d'agrégation . . . . .	19
1.4 La méthode FBL (Forward-Backward Lagrangian) . . . . .	21
1.4.1 Principe . . . . .	21
1.4.2 Estimation d'erreur pour un flot passif . . . . .	22
1.5 Illustrations numériques . . . . .	23
1.5.1 Équation de transport $1d$ . . . . .	23
1.5.2 Équation d'Euler incompressible en formulation vorticit�e . . . . .	25
1.6 Perspectives . . . . .	27
<b>2 Modèles cinétiques d'écoulements gaz-particules</b>	<b>29</b>
2.1 Introduction . . . . .	30
2.2 Un modèle avec opérateurs de collisions . . . . .	31
2.2.1 Modélisation . . . . .	31
2.2.2 Dissipation d'entropie et états d'équilibre . . . . .	34
2.2.3 Asymptotique à faible rapport de masse . . . . .	36
2.2.4 Perspectives . . . . .	38
2.3 Un modèle avec domaine à frontière mouvante . . . . .	39
2.3.1 Modélisation et existence de solutions . . . . .	39
2.3.2 Simulations numériques . . . . .	42
2.3.3 Perspectives . . . . .	43

---

<b>3</b>	<b>Modèles issus de la physique des plasmas</b>	<b>45</b>
3.1	Un modèle de Vlasov-Poisson avec champ magnétique . . . . .	47
3.1.1	Modélisation . . . . .	47
3.1.2	Analyse de la stabilité faible du modèle . . . . .	49
3.1.3	Perspectives . . . . .	51
3.2	Réactions de fusion dans un plasma . . . . .	51
3.2.1	Méthode numérique et simulations . . . . .	52
3.2.2	Un modèle asymptotique . . . . .	52
3.2.3	Perspectives . . . . .	53
<b>4</b>	<b>Une méthode d'approximation par polynômes positifs</b>	<b>55</b>
4.1	Introduction . . . . .	56
4.2	Formulation du problème . . . . .	57
4.3	Définition du point de départ $X^0$ . . . . .	59
4.4	Convergence de la méthode . . . . .	61
4.5	Illustrations numériques . . . . .	62
4.6	Perspectives . . . . .	64
	<b>Summary</b>	<b>67</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>75</b>
	.	<b>85</b>

# Introduction générale

Ce mémoire présente mes travaux de recherche, qui tournent principalement autour des équations aux dérivées partielles de type cinétique issues de la physique des plasmas et des gaz raréfiés.

La théorie cinétique, introduite par Maxwell et Boltzmann, permet de décrire à une échelle mésoscopique (intermédiaire entre microscopique et macroscopique) l'évolution de molécules constituant un gaz ou un plasma (ou plus généralement de particules d'une certaine espèce : ions, électrons, poussières ...) par une fonction de densité  $f := f(t, x, v) \geq 0$ . Pour  $(\Omega_x, \Omega_v) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ , la quantité  $\int_{\Omega_x} \int_{\Omega_v} f(t, x, v) dx dv$  correspond au nombre de molécules dont la position à l'instant  $t$  se situe dans  $\Omega_x$  et la vitesse dans  $\Omega_v$ . Cette description cinétique est plus adéquate qu'une description fluide lorsque la densité est éloignée d'une Maxwellienne, qui correspond à l'équilibre thermodynamique du gaz. On s'intéressera ici à des équations de Vlasov

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \mathcal{F} \cdot \nabla_v f = 0, \quad (1)$$

dans lesquelles  $\mathcal{F} = \mathcal{F}(t, x, v)$  correspond à une force (pouvant dépendre aussi de  $f$ , comme dans le cas des systèmes de Vlasov-Poisson ou Vlasov-Maxwell) ou des équations de type Boltzmann à une ou plusieurs espèces

$$\partial_t f_i + v \cdot \nabla_x f_i = \sum_j \mathcal{Q}_{i,j}(f_i, f_j), \quad \text{pour } i = 1, 2, \dots \quad (2)$$

dans lesquelles  $\mathcal{Q}_{i,j}(f_i, f_j)$  sont des opérateurs modélisant des interactions entre les éléments, appelés collisions.

Dans le premier chapitre, on se place dans le cadre un peu plus général des équations de transport et on s'intéresse à des méthodes numériques Lagrangiennes et semi-Lagrangiennes. Le point commun de ces méthodes est de suivre le flot caractéristique de l'équation : flot avant dans le cas des méthodes particulières standards, et flot arrière avec reconstruction sur maillage dans le cas des méthodes semi-Lagrangiennes arrières. Ces méthodes ont été largement développées en physique des plasmas, notamment pour la simulation de l'équation de Vlasov-Poisson. Je me suis intéressée à l'analyse de convergence de quelques-unes de ces méthodes, et plus particulièrement dans le cadre de l'équation de Vlasov-Poisson  $1d1v$ . La première est la méthode semi-Lagrangienne, pour laquelle j'ai montré avec B. Després et M. Mehrenberger une estimation d'erreur améliorée pour certains types de schémas d'interpolation. Cette méthode est cependant assez coûteuse en raison des interpolations à chaque pas de temps, et pour des simulations en grande dimension d'espace des phases les méthodes particulières lui sont souvent préférées [20].

Ces méthodes sont simples à mettre en œuvre, robustes et préservent des quantités physiques importantes [98]. Néanmoins, leur convergence forte n'est possible que sous une condition assez restrictive, ce qui se traduit en pratique par un bruit numérique dans la solution reconstruite. En collaboration avec M. Campos-Pinto, j'ai analysé la convergence d'une méthode particulière améliorée introduite par celui-ci, la méthode LTP, sur l'équation de Vlasov-Poisson 1d1v. Le principe de cette méthode repose sur une déformation des fonctions de formes des particules. Nous avons ensuite, en collaboration avec J.A Carrillo et Y-P Choi, appliqué et analysé cette méthode pour une équation d'agrégation. Enfin, toujours avec M. Campos-Pinto, nous proposons et analysons une autre méthode, hybride entre une méthode semi-Lagrangienne arrière et une méthode particulière. Celle-ci permet de gagner un ordre de convergence en espace comparativement à la méthode LTP.

Le chapitre 2 présente un sujet auquel je m'intéresse depuis ma thèse, la modélisation purement cinétique d'écoulements gaz-particules. Le premier modèle sur lequel j'ai travaillé, en collaboration avec S. Dellacherie, L. Desvillettes et J. Segré, est constitué d'un couplage de deux équations de type Boltzmann, dans lequel les opérateurs décrivent un mécanisme collisionnel basé sur une réflexion diffuse des molécules à la surface des particules. Nous avons ensuite dérivé à partir de celui-ci un modèle asymptotique de type Vlasov-Boltzmann en faisant tendre vers 0 le rapport de masse entre une molécule de gaz et une particule. Plus récemment, j'ai considéré avec F. Salvarani à un point de vue assez différent pour étudier de tels écoulements. L'interaction entre le gaz et les particules (en nombre fini) est modélisé en considérant une équation de transport libre en domaine mouvant (comprenant la frontière avec les particules et le bord du domaine). La condition aux limites sur le bord des particules, décrivant l'influence des particules sur le gaz, est ici encore une réflexion diffuse.

Le chapitre 3 concerne des modèles issus de la physique des plasmas. Parmi les nombreux modèles intervenant en physique des plasmas magnétisés, le modèle complet de Vlasov-Maxwell est un modèle très coûteux d'un point de vue numérique, car il prend en compte tous les détails et échelles de la magnéto-hydrodynamique, tandis que le modèle de Vlasov-Poisson ne prend pas en compte l'évolution du champ magnétique induit. En collaboration avec B. Després, B. Perthame et R. Sentis, nous avons proposé un modèle simplifié qui permet de tenir compte de l'effet Hall provenant des équations Maxwell. Nous montrons ensuite la stabilité faible de celui-ci.

Je me suis par ailleurs également intéressée à un couplage de deux équations de type Boltzmann dans le contexte des plasmas de fusion, dans lequel les opérateurs intégraux décrivent des réactions de fusion entre des ions Deuterium et Tritium. En collaboration avec S. Dellacherie, nous avons proposé et mis en œuvre une méthode numérique particulière pour la simulation numérique de ce modèle, avec simulation Monte-Carlo des opérateurs de fusion.

Enfin, le dernier chapitre présente une thématique sur laquelle j'ai commencé travailler plus récemment, en collaboration avec B. Després et M. Campos-Pinto. Celle-ci concerne le calcul d'un polynôme positif d'approximation d'une fonction donnée, et n'est pas complètement décorrélée du reste de ce manuscrit puisque

la principale motivation de ce travail est son application au calcul scientifique et à l'analyse numérique des EDP. L'algorithme que nous proposons dans [C5] est basé sur la recherche d'un polynôme  $p_n$  de degré inférieur ou égal à  $n$  positif sur l'intervalle  $[0, 1]$ , s'écrivant sous la forme

$$p_n(x) = \omega_1(x)a(x)^2 + \omega_2(x)b(x)^2,$$

avec  $(\omega_1(x), \omega_2(x)) = (x, 1-x)$  ou  $(\omega_1(x), \omega_2(x)) = (1, x(1-x))$  suivant la parité de  $n$ , et interpolant en  $n+1$  points une fonction  $f$  donnée. Nous proposons un algorithme de type point Newton-Raphson modifié permettant de construire une suite de points d'interpolation glissants et entrelacés, à partir de laquelle on obtient une suite de polynômes positifs convergeant, sous certaines conditions, vers la fonction  $f$ .



# (Pré)-publications de l'auteur

Mes publications et pré-publication sont rassemblées par thématiques ci-dessous. Certaines publications (indiquées d'une  $\star$ ) ne sont pas décrites dans ce manuscrit.

## Méthodes numériques Lagrangiennes et semi-Lagrangiennes pour le transport

- ▷ [C11] F. Charles, B. Després, and M. Mehrenberger. **Enhanced convergence estimates for semi-lagrangian schemes Application to the Vlasov-Poisson equation.** *SIAM Journal of Numerical Analysis (SI-NUM)*, 51(2) :840–863, 2013.
- ▷ [C3] M. Campos-Pinto and F. Charles. **Uniform Convergence of a Linearly Transformed Particle Method for the Vlasov–Poisson System.** *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 54(1) :137–160, 2016.
- ▷ [C2] M. Campos-Pinto, J. A. Carrillo, F. Charles, and Y.-P. Choi. **Convergence of a linearly transformed particle method for Aggregation equations.** *Numerische Mathematik*, 139(4) :743–793, 2018.
- ▷ [C4] M. Campos-Pinto and F. Charles. **From particle methods to forward-backward Lagrangian schemes.** *SMAI Journal of Computational Mathematics*, 2018.

## Modèles cinétiques d'écoulements gaz-particules

- ▷ [C7  $\star$ ] F. Charles. **Kinetic Modelling and Numerical Simulations using Particle Methods for the Transport of Dust in a Rarefied Gas.** In *Proceeding of the 26 th symposium Rarefied gas dynamics*, volume 1084, pages 409–414. American Institute of Physics, 2009.
- ▷ [C8  $\star$ ] F. Charles. *Modélisation mathématique et étude numérique d'un aérosol dans un gaz raréfié. Application à la simulation du transport de particules de poussière en cas d'accident de perte de vide dans ITER.* **PhD thesis**, École Normale Supérieure de Cachan, 2009.
- ▷ [C14  $\star$ ] F. Charles and L. Desvillettes. **Small mass ratio limit of Boltzmann equations in the context of the study of evolution of dust particles in a rarefied atmosphere.** *Journal of Statistical Physics*, 137(3) :539–567, 2009.

- ▷ [C10] F. Charles, S. Dellacherie, and J. Segré. **Kinetic Modelling of the Transport of Dust Particles in a Rarefied Atmosphere.** *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 22(40), 2012.
- ▷ [C15] F. Charles and F. Salvarani. **Mathematical and Numerical Study of a Dusty Knudsen Gas Mixture.** *Acta Applicandae Mathematicae*, 2019.

### Modèles issus de la physique des plasmas

- ▷ [C16 ★] F. Charles, N. Vauchelet, C. Besse, T. Goudon, I. Lacroix-Violet, J.-P. Dudon, and L. Navoret. **Numerical approximation of Knudsen layer for the Euler-Poisson system.** In *ESAIM Proceedings*, volume 32, pages 177–194, 2011.
- ▷ [C9] F. Charles, C. Copol, S. Dellacherie, and J.-M. Mounsamy. **Numerical Simulation By a Random Particle Method of Deuterium-Tritium Reactions in a Plasma.** In *ESAIM Proceedings*, volume 38, pages 220–240, 2013.
- ▷ [C12] F. Charles, B. Després, B. Perthame, and R. Sentis. **Nonlinear stability of a Vlasov equation for magnetic plasmas.** *Kinetic and related Models*, 6(2) :669–690, 2013.
- ▷ [C13 ★] F. Charles, B. Després, A. Rege, and R. Weber. **The Vlasov - Ampere system and the Bernstein-Landau paradox.** *Submitted*, 2020.

### Approximation par polynômes positifs

- ▷ [C5] M. Campos-Pinto, F. Charles, and B. Després. **Algorithms for Positive Polynomial Approximation.** *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 57(1) :148–172, 2019.
- ▷ [C6 ★] M. Campos-Pinto, F. Charles, B. Després, and M. Herda. **A projection algorithm on the set of polynomials with two bounds.** *Numerical Algorithms*, 2020.

### Modèles issus de la biologie [★]

- ▷ [C1 ★] H. Banks, F. Charles, M. Doumic-Jauffret, K. L. Sutton, and C. Thompson. **Label structured cell proliferation models.** *Applied mathematics letters*, 23(12) :1412–1415, 2010.
- ▷ [C17 ★] S. Prigent, A. Ballesta, F. Charles, N. Lenuzza, P. Gabriel, L.-M. Tine, H. Rezaei, and M. Doumic. **An Efficient Kinetic Model for Assemblies of Amyloid Fibrils and Its Application to Polyglutamine Aggregation.** *Plos One*, 2012.

# Chapitre 1

## Méthodes numériques Lagrangiennes et semi-Lagrangiennes pour les équations de transport

Le contenu de ce chapitre s'appuie sur les travaux [C11], [C3], [C2] et [C4].

### Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>8</b>
<b>1.2</b>	<b>Une estimation de convergence d'un schéma semi-Lagrangien pour Vlasov-Poisson</b>	<b>12</b>
1.2.1	Une estimation d'erreur améliorée pour un schéma semi-Lagrangien	12
1.2.2	Application à l'équation de Vlasov-Poisson	14
<b>1.3</b>	<b>Analyses de convergence pour la méthode LTP</b>	<b>15</b>
1.3.1	Méthode LTP pour un flot passif	15
1.3.2	Application à l'équation de Vlasov-Poisson	17
1.3.3	Méthode LTP pour une équation d'aggrégation	19
<b>1.4</b>	<b>La méthode FBL (Forward-Backward Lagrangian)</b>	<b>21</b>
1.4.1	Principe	21
1.4.2	Estimation d'erreur pour un flot passif	22
<b>1.5</b>	<b>Illustrations numériques</b>	<b>23</b>
1.5.1	Équation de transport $1d$	23
1.5.2	Équation d'Euler incompressible en formulation vorticité	25
<b>1.6</b>	<b>Perspectives</b>	<b>27</b>

---

## 1.1 Introduction

On renvoie à [125, 28] pour une preuve des propriétés énoncées dans cette partie. Pour  $v$  dans l'espace de Sobolev  $W^{r,q}(\Omega)$ , avec  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ,  $r \in \mathbb{N}^*$ ,  $1 \leq q \leq \infty$ , on note

$$|v|_{W^{r,q}(\Omega)} := \max_i \left\{ \sum_{l_1=1}^d \dots \sum_{l_r=1}^d \|\partial_{l_1} \dots \partial_{l_r} v_i\|_{L^q(\Omega)} \right\},$$

et

$$\|v\|_{W^{r,q}(\Omega)} := \|v\|_{L^q(\Omega)} + \sum_{s=1}^r |v|_{W^{s,q}(\Omega)}.$$

On considère  $\mathbf{a} : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$  un champ d'advection, de composantes

$$\mathbf{a}_i \in C\left([0, T] \times \mathbb{R}^d\right) \cap L^\infty\left(0, T; W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d)\right) \quad (1.1)$$

pour  $1 \leq i \leq d$ , et on s'intéresse à l'équation de transport associée à une donnée initiale  $\rho^0 : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ , écrite sous forme advective

$$\partial_t \rho + \mathbf{a} \cdot \nabla_x \rho = 0, \quad \rho(0, \cdot) = \rho^0. \quad (1.2)$$

On peut introduire les courbes caractéristiques associées à l'opérateur différentiel

$L := \partial_t + \sum_{i=1}^d a_i \partial_{x_i}$  : étant donné  $x \in \mathbb{R}^d$  et  $s \in [0, T]$ , il existe une unique solution  $t \mapsto X_{s;x}(t) \in [W^{1,\infty}(0, T)]^d$  au problème de Cauchy

$$\frac{dX_{s;x}(t)}{dt} = \mathbf{a}(t, X_{s;x}(t)), \quad X_{s;x}(s) = x. \quad (1.3)$$

On note  $F^{s,t} : x \mapsto X_{s;x}(t)$  le flot, qui est un difféomorphisme et vérifie  $(F^{s,t})^{-1} = (F^{t,s})$  et  $J^{s,t}$  la jacobienne de cette transformation, définie par

$$J^{s,t}(x) = \left( \frac{\partial F_i^{s,t}}{\partial x_j}(t) \right)_{1 \leq i \leq d, 1 \leq j \leq d}. \quad (1.4)$$

La solution de l'équation (1.2) est donnée par le Théorème suivant.

**Théorème 1.1.** *Soit  $\rho^0 \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^d)$ ; on suppose que les composantes de  $\mathbf{a}$  vérifient (1.1). Alors le problème (1.2) admet une unique solution faible  $\rho \in L^1_{loc}((0, T) \times \mathbb{R}^d)$  donnée par*

$$\rho(t, x) = \rho^0\left(F^{t,0}(x)\right). \quad (1.5)$$

Les méthodes semi-Lagrangiennes arrières, introduites dans les années 70 par Cheng et Knorr [45] et développées dans le contexte de la physique des plasmas par Sonnendrücker dans les années 2000 [131], sont basées sur cette conservation de la solution de (1.2) le long des caractéristiques. Leur principe est, à partir des valeurs  $\rho^n = (\rho_i^n)_i$  approchant la solution exacte à un instant  $t^n$  sur un maillage  $(x_i)_i$  de taille  $\Delta x$ , d'une expression exacte ou approchée  $\tilde{F}^{t_{n+1}, t_n}$  du flot arrière entre  $t^{n+1}$  et  $t^n$  et d'un opérateur d'interpolation  $\mathcal{R}_{\Delta x}$  sur ce maillage, d'obtenir les valeurs  $\rho^{n+1}$  par la relation  $\rho_i^{n+1} = (\mathcal{R}_h \rho^n)(\tilde{F}^{t_{n+1}, t_n}(x_i))$ .

Beaucoup d'équations issues de la physique s'écrivent sous forme conservative :

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\mathbf{a}\rho) = 0, \quad \rho(0, \cdot) = \rho^0. \quad (1.6)$$

Les équations (1.2) et (1.6) ne sont bien sûr équivalentes que lorsque  $\operatorname{div}(\mathbf{a}) = 0$ , mais les courbes caractéristiques de ces équations sont les mêmes. L'unique solution faible de (1.6) est alors donnée, en supposant encore  $\rho^0 \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^d)$  et  $\mathbf{a}$  vérifiant (1.1), par

$$\rho(t, x) = \rho^0 \left( F^{t,0}(x) \right) \det \left( J^{t,0}(x) \right). \quad (1.7)$$

Une conséquence est la conservation de la masse le long des caractéristiques : pour tout  $K \in \mathbb{R}^d$ ,  $s, t \in [0, T]$ ,

$$\int_K \rho(t, x) dx = \int_{F^{t,s}(K)} \rho(s, y) dy. \quad (1.8)$$

C'est sur la forme conservative (1.6) et la propriété (1.8) que se basent les méthodes semi-Lagrangiennes conservatives [57].

Les méthodes particulières sont basées sur les solutions de (1.6) au sens des mesures. On dit qu'une mesure  $\rho \in M((0, T) \times \mathbb{R}^d)$  est solution de (1.2) si pour toute fonction  $\varphi \in \mathcal{C}_c^1([0, T[ \times \mathbb{R}^d)$ ,  $\langle \rho, L^* \varphi \rangle = \langle \rho^0, \varphi(0, \cdot) \rangle$ , où  $L^* \varphi = -\partial_t \varphi - \operatorname{div}(\mathbf{a}\varphi)$  est l'adjoint formel de  $L$ .

**Théorème 1.2.** *Soit  $\rho^0 \in M(\mathbb{R}^d)$ ; on suppose que les composantes de  $\mathbf{a}$  vérifient (1.1) pour  $1 \leq i \leq d$ . Alors le problème (1.6) admet une unique solution faible  $\rho \in M((0, T) \times \mathbb{R}^d)$  donnée par*

$$\langle \rho, \varphi \rangle = \langle \rho^0, x \mapsto \int_0^T \varphi(t, F^{0,t}(x)) dt \rangle$$

pour toute fonction  $\varphi \in \mathcal{C}_c([0, T[ \times \mathbb{R}^d)$ .

Autrement dit,  $\rho = F^{0,t} \# \rho^0$  est le push-forward de  $\rho^0$  par le flot entre 0 et  $t$ . On obtient en Corollaire immédiat que si  $\rho^0(x) = \delta(x - x_0)$ , où  $\delta$  est la masse de Dirac en 0, avec  $x_0 \in \mathbb{R}^d$ , alors l'unique solution mesure de (1.6) est donnée par  $\rho(t, x) = \delta(x - F^{0,t}(x_0))$ .

L'idée des méthodes particulières est alors, partant d'une approximation de la donnée initiale sous la forme  $\rho^0 \simeq \rho_h^0 = \sum_k \omega_k \delta(x - x_k^0)$ , d'introduire une approximation au temps  $t$  de la solution de (1.6) par

$$\rho_h(t, x) = \sum_k \omega_k^0 \delta(x - F^{0,t}(x_k^0)). \quad (1.9)$$

$h$  étant le pas de la grille  $(x_k^0)_{k \in K}$  ( $K$  un sous-ensemble de  $\mathbb{Z}^d$ ) dans le cas d'une initialisation déterministe, ou la distance moyenne entre deux particules dans le cas d'une initialisation probabiliste. Dans le premier cas le poids  $\omega_k^0$  est généralement calculé comme quadrature de  $\int_{x_k^0 + [-h/2, h/2]^d} \rho^0(x) dx$ , de sorte que

$$\sum_k \omega_k^0 \simeq \int_{\mathbb{R}^d} \rho^0(x) dx.$$

**Remarque 1.1.** *On peut bien sûr introduire aussi une solution particulière pour une équation avec un terme en  $\rho$*

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\mathbf{a}\rho) + a_0 \rho = 0, \quad \rho(0, \cdot) = \rho^0. \quad (1.10)$$

avec  $a_0 \in L_{loc}^\infty((0, T) \times \mathbb{R}^d)$  (et donc, en particulier pour l'équation sous forme advective (1.2) en prenant  $a_0 = -\operatorname{div}(\mathbf{a})$ ) par

$$\rho_h(t, x) = \sum_k \omega_k(t) \delta(x - F^{0,t}(x_k^0)), \quad (1.11)$$

où  $\omega_k$  est pour tout  $k$  la solution de

$$\omega_k'(t) + a_0(t, F^{0,t}(x_k^0)) \omega_k(t) = 0, \quad (1.12)$$

et vérifie  $\omega_k(0) = \omega_k^0$ . Dans le cas de l'équation d'advection (1.2), l'équation (1.12) correspond à l'équation vérifiée par  $j_k(t) := \det(J^{0,t}(x_k^0))$  avec  $a_0 = -\operatorname{div}(\mathbf{a})$ ; on obtient alors

$$\rho_h(t, x) = \sum_k \omega_k^0 j_k(t) \delta(x - F^{0,t}(x_k^0)).$$

On remarque que les points de vue des méthodes semi-Lagrangiennes arrières et particulières sont duaux. Dans le premier cas on part d'un point du maillage espace-temps où l'on souhaite approcher la solution et on remonte la caractéristique jusqu'à un instant antérieur. Dans le second cas on définit des positions initiales de particules (sur un maillage ou aléatoirement), et on pousse ces particules en avant le long de la caractéristique. Dans les deux cas, lorsque le flot du champ d'advection  $\mathbf{a}$  n'est pas connu explicitement, on introduit une discrétisation en temps du problème de Cauchy (1.3).

La solution (1.9) étant une mesure, on introduit une solution régularisée par convolution avec un noyau : pour  $\varepsilon > 0$ , on définit

$$\rho_{h,\varepsilon}(t, x) := \rho_h \star_x \varphi_\varepsilon(t, x) = \sum_k \omega_k^0 \varphi_\varepsilon(x - F^{0,t}(x_k^0)), \quad (1.13)$$

où  $\varphi_\varepsilon$  est une approximation d'un Dirac :  $\varphi_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \delta$ , généralement de la forme  $\varphi_\varepsilon(y) = \frac{1}{\varepsilon^d} \varphi\left(\frac{y}{\varepsilon}\right)$ , où  $\varphi$  est une fonction paire vérifiant  $\int_{\mathbb{R}^d} \varphi(x) dx = 1$ . On parle alors de méthode *Smooth Particle*. Notons qu'un avantage de cette méthode est la conservation de la masse :  $\int_{\mathbb{R}^3} \rho_{h,\varepsilon}(t, x) dx = \int_{\mathbb{R}^3} \rho_{h,\varepsilon}(0, x) dx$ . Une possibilité classique est de choisir pour  $\varphi$  un produit tensoriel de fonction *B-splines* [29] (par exemple une *B3-spline*); mais des Gaussiennes tronquées [101] ou des noyaux d'interpolation tels que les fonctions de Wendland [88, 68] sont aussi utilisés. A  $h$  donné, il faut alors choisir  $\varepsilon > 0$  pour minimiser l'erreur entre la solution approchée  $\rho_{h,\varepsilon}$  et la solution exacte  $\rho$ , pour une certaine norme. La figure 1.1 illustre le compromis à choisir : si  $\varepsilon$  est trop petit, la reconstruction présente des oscillations, tandis que si  $\varepsilon$  est trop grand, la solution perd les hautes fréquences. Le choix  $\varepsilon \simeq h$  (qui semble satisfaisant à l'instant initial d'après le graphique de droite de la Figure 1.1) ne garantit pas pour autant la convergence de la solution  $\rho_{h,\varepsilon}(t, \cdot)$ , pour  $t > 0$ , comme

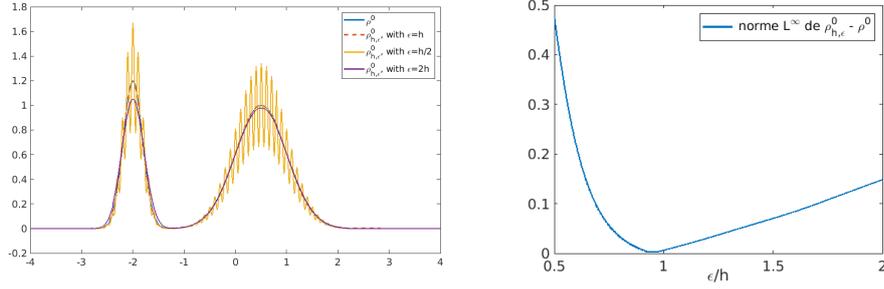


FIGURE 1.1 – Influence de la taille du support de la fonction de forme sur la reconstruction. Gauche : Comparaison entre une fonction  $\rho^0$  (somme de deux gaussiennes) et une approximation  $\rho_{h,\varepsilon} = \rho_h \star_x \varphi_\varepsilon$  pour différentes valeurs de  $\frac{\varepsilon}{h}$ . Droite : courbe d'évolution de  $\|\rho_{h,\varepsilon} - \rho\|_\infty$  en fonction du rapport  $\frac{\varepsilon}{h}$ . Dans les deux cas,  $h = 0.1$ ,  $\varphi$  est une B3-spline et les poids sont calculés par la formule (1.33) pour  $p = 3$ .

le montre l'estimation d'erreur standard obtenue par P-A Raviart [125]. Si  $\int \varphi = 1$  et s'il existe  $m > 0$ ,  $r > 0$  tels que  $\varphi \in W^{m,1}$  et  $\int |x|^r |\varphi(x)| dx < +\infty$  et

$$\int x_1^{k_1} \dots x_d^{k_d} \varphi(x_1, \dots, x_d) dx = 0, \quad |k| = k_1 + \dots + k_d \leq r - 1$$

alors on a, pour tout  $1 \leq p \leq +\infty$

$$\sup_{t \in [0, T]} \|\rho_{h,\varepsilon}(t, \cdot) - \rho(t, \cdot)\|_{L^p} \leq C_T \left( \varepsilon^r |\rho^0|_{W^{r,p}} + \left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^m |\rho^0|_{W^{m,p}} \right). \quad (1.14)$$

Cette estimation a été améliorée comme dans [47] par un choix particulier des poids  $\omega_k$  (on obtient alors  $\|\rho^0\|_{L^p}$  au lieu de  $|\rho^0|_{W^{m,p}}$  dans l'estimation (1.14)), mais ces estimations ne permettent d'obtenir une convergence forte de la solution approchée que pour  $\varepsilon \sim h^s$  avec  $0 < s < 1$  lorsque  $\varepsilon$  et  $h$  tendent vers 0 (le choix optimal étant  $s = \frac{m}{m+r}$ ). Numériquement, cela signifie un recouvrement croissant des supports des particules et un nombre de particules (de l'ordre de  $\frac{1}{h^d}$ ) augmentant non linéairement lorsque qu'on diminue  $\varepsilon$ . On obtient cependant une convergence faible avec  $\varepsilon \simeq h$ , mais la solution approchée peut présenter des oscillations indésirables. Différentes stratégies pour réduire ces oscillations ont été développées. L'une d'entre elle consiste à effectuer des projections régulières sur une grille pour ré-initialiser les particules (on parle de *remapping*) [72]; avec un remapping à chaque pas de temps on obtient la méthode semi-Lagrangienne avant [58, 49, 111]. Ces remappings ont un effet régularisant mais introduisent également de la diffusion numérique, même si celle-ci est atténuée par l'utilisation de noyaux d'interpolation d'ordre élevé [54, 52] ou des méthodes de remappings adaptatives [11, 136], ou encore d'autres méthodes : moyennisation des poids [9, 48], viscosité artificielle [51], utilisation d'ondelettes [12, 69]. Dans [99], Hou introduit l'idée d'une déformation des formes des particules, avec une transformation globale pour toutes les particules, et qui n'est pas explicitée. Cohen et Perthame reprennent cette idée en introduisant des "cellules déformées" par le linéarisé du flot autour de chaque particule et obtiennent, pour  $\varepsilon = h$ , une convergence forte en norme  $L^1$  de leur méthode pour un flot passif ( $a$  indépendant de  $\rho$ ), à l'ordre 1 en  $h$ . M. Campos-Pinto précise

ensuite ces déformations dans [32], introduit des développements locaux à l'ordre  $r$ , et développe en particulier les méthodes LTP (*Linearly Transformed Particles*) et QTP (*Quadratically Transformed Particles*). Il donne une estimation d'erreur de  $\|\rho - \rho_h^n\|_{L^\infty}$  pour l'équation de transport advective (1.2) avec un flot passif, à l'ordre  $r$  en  $h$ , avec une constante dépendant de  $|F^{t^n,0}|_{W^{r+1,\infty}}$ , de  $|F^{0,t^n}|_{W^{1,\infty}}$  et de  $\|\rho^0\|_\infty$ .

En collaboration avec M. Campos-Pinto, je me suis intéressé dans [C3] à une analyse de l'erreur de la méthode LTP pour le système de Vlasov-Poisson 1d1v. Dans [C2], en collaboration avec J.A Carrillo, Y-P Choi et M. Campos-Pinto, nous avons étendu la méthode LTP à une équation d'agrégation (écrite cette fois sous forme conservative). Dans [C4], nous présentons et analysons une autre méthode, dite FBL (Forward-Backward Lagrangian), qui n'utilise plus la représentation (1.30) de  $\rho^0$  sous la forme d'une combinaison linéaire de fonctions de forme, mais directement  $\rho^0$  en introduisant une reconstruction globale du flot arrière  $F^{t^n,0}$ .

## 1.2 Une estimation de convergence d'un schéma semi-Lagrangien pour Vlasov-Poisson

Cette partie décrit [C11], en collaboration avec B. Després et M. Mehrenberger, où nous améliorons une estimation d'erreur pour un schéma semi-Lagrangien pour l'équation de Vlasov-Poisson 1d1v. Dans [18] les auteurs obtiennent, pour un schéma d'interpolation d'ordre  $p+1$  pour cette équation, et sous certaines hypothèses, une convergence en norme  $L^2$  de la solution et du champ électrique avec un taux en  $O\left(\Delta t^2 + \Delta y^{p+1} + \frac{\Delta y^{p+1}}{\Delta t}\right)$ , où  $\Delta y$  est la taille du maillage dans l'espace des phases. Nous établissons une stratégie d'analyse d'erreur nous permettant d'obtenir une erreur en norme  $L^2$  en  $O\left(\Delta t^2 + \min(1, \frac{\Delta y}{\Delta t})h^p\right)$ , permettant une convergence sans condition reliant  $\Delta y$  et  $\Delta t$ .

### 1.2.1 Une estimation d'erreur améliorée pour un schéma semi-Lagrangien

Nous considérons ici l'équation d'avection 1d à vitesse constante  $a > 0$

$$\begin{cases} \partial_t \rho + a \partial_x \rho = 0, \\ \rho(0, x) = \rho_{\text{ini}}(x) \end{cases} \quad (1.15)$$

pour laquelle nous définissons un schéma semi-Lagrangien : étant donné un maillage spatial de pas  $\Delta x$  et une approximation  $\rho^n = (\rho_i^n)_{i \in \mathbb{Z}}$  de la solution de (1.15) au temps  $t^n = n\Delta t$ , on construit  $\rho^{n+1}$  en posant

$$\rho_i^{n+1} = \tilde{\rho}^n(x_i - a\Delta t), \quad (1.16)$$

où  $\tilde{\rho}^n = \mathcal{R}_{\Delta x} \rho^n$  est une fonction continue obtenue par interpolation par morceaux des valeurs  $\rho^n = (\rho_i^n)_{i \in \mathbb{Z}}$ . L'analyse classique des schémas semi-Lagrangien est effectuée (comme dans [86, 17, 18]) en utilisant l'erreur de l'opérateur d'interpolation du schéma.

L'idée développée dans [C11] est d'utiliser une interpolation de Lagrange sur maillages réguliers et de ré-interpréter le schéma semi-Lagrangien comme un schéma de différences finies. Présentons cette idée et la différence avec une analyse classique

sur un schéma à deux points, avec  $\rho_{\text{ini}} \in W^{2,\infty}(\mathbb{R})$ . On peut même faire ici une analyse en norme  $L^\infty$ . Dans le cas d'un schéma à deux points, l'erreur d'interpolation linéaire par morceaux vérifie pour toute fonction  $g \in W^{2,\infty}(\mathbb{R})$

$$\|g - \mathcal{R}_{\Delta x} \mathbf{g}\|_{L^\infty} \leq C \Delta x^2 |g|_{W^{2,\infty}(\mathbb{R})}, \quad \text{où } \mathbf{g} = (g(x_i))_{i \in \mathbb{Z}}.$$

et  $\|\mathcal{R}_{\Delta x} \mathbf{g}\|_{L^\infty} \leq \|\mathbf{g}\|_{\ell^\infty}$ . On appelle  $\mathcal{T}_s$  l'opérateur de transport à vitesse  $a$  :  $\mathcal{T}_s g(x) = g(x - as)$ , qui vérifie  $\|\mathcal{T}_s g\|_{L^\infty} \leq \|g\|_{L^\infty}$  et  $|\mathcal{T}_s g|_{W^{2,\infty}(\mathbb{R})} \leq |g|_{W^{2,\infty}(\mathbb{R})}$ . En notant  $\varrho(t^n) = (\varrho(t^n, x_i))_{i \in \mathbb{Z}}$  on peut écrire

$$\begin{aligned} |\rho(t^{n+1}, x_i) - \rho_i^{n+1}| &= |\mathcal{T}_{\Delta t} \rho(t^n, \cdot)(x_i) - \mathcal{T}_{\Delta t} \mathcal{R}_{\Delta x} \varrho(t^n)(x_i) + \mathcal{T}_{\Delta t} \mathcal{R}_{\Delta x} (\varrho(t^n) - \rho^n)(x_i)| \\ &\leq \|\mathcal{T}_{\Delta t} (\rho(t^n, \cdot) - \mathcal{R}_{\Delta x} \varrho(t^n))\|_{L^\infty} + \|\varrho(t^n) - \rho^n\|_{\ell^\infty} \end{aligned}$$

d'où l'on déduit que l'erreur globale du schéma  $e^n = \varrho(t^n) - \rho^n$  vérifie

$$\|e^{n+1}\|_{\ell^\infty} \leq C |\rho_{\text{ini}}|_{W^{2,\infty}} \Delta x^2 + \|e^n\|_{\ell^\infty},$$

et on obtient la majoration classique de l'erreur

$$\|e^n\|_{\ell^\infty} \leq C |\rho_{\text{ini}}|_{W^{2,\infty}} T \frac{\Delta x^2}{\Delta t}. \quad (1.17)$$

Ré-écrivons maintenant ce schéma sous la forme d'un schéma de différence finie et effectuons une analyse de l'erreur par stabilité et troncature. On pose  $r = \lfloor -a \frac{\Delta t}{\Delta x} \rfloor \leq -1$ , qui est tel que le pied de la caractéristique  $x_i - a\Delta t$  soit dans  $[x_{i+r}, x_{i+r+1}[$ . La relation (1.16) s'écrit alors,

$$\rho_i^{n+1} = \left(r + 1 + a \frac{\Delta t}{\Delta x}\right) \rho_{i+r}^n + \left(-r - a \frac{\Delta t}{\Delta x}\right) \rho_{i+r+1}^n = \eta \rho_{i+r}^n + (1 - \eta) \rho_{i+r+1}^n$$

avec  $\eta := r + 1 + a \frac{\Delta t}{\Delta x} \in ]0, 1]$  (par définition de  $r$ ), et on peut alors écrire le schéma sous la forme  $\rho^{n+1} = S_\eta \rho^n$ , avec  $S_\eta$  vérifiant  $\|S_\eta\|_\infty \leq 1$ . En écrivant le schéma sous la forme

$$\frac{\rho_i^{n+1} - \rho_{i+r+1}^n}{\Delta t} + a \left( (r+1) \frac{\Delta x}{a\Delta t} + 1 \right) \frac{\rho_{i+r+1}^n - \rho_{i+r}^n}{\Delta x} = 0, \quad (1.18)$$

et en introduisant l'erreur de troncature  $\varepsilon^n$  du schéma (1.18), l'erreur du schéma vérifie la relation

$$e^{n+1} = S_\eta e^n + \Delta t \varepsilon^n. \quad (1.19)$$

Reste donc à majorer  $\|e^n\|_{\ell^\infty}$ . En introduisant  $\Delta s := (r+1) \frac{\Delta x}{a} + \Delta t$ , on remarque que

$$\rho(t^{n+1}, x_i) = \rho(t^n + \Delta s, x_i - a(\Delta t - \Delta s)) = \rho(t^n + \Delta s, x_{i+r+1}).$$

Ainsi  $\varepsilon_i^n = \frac{\Delta s}{\Delta t} \bar{\varepsilon}_{i+r+1}^n$ , où  $\bar{\varepsilon}_{i+r+1}^n$  est l'erreur de troncature d'un schéma de différences finies décentrés amont en  $x_{i+r+1}$  avec un pas de temps  $\Delta s$

$$\bar{\varepsilon}_{i+r+1}^n := \frac{\rho(t^n + \Delta s, x_{i+r+1}) - \rho(t^n, x_{i+r+1})}{\Delta s} + a \frac{\rho(t^n, x_{i+r+1}) - \rho(t^n, x_{i+r})}{\Delta x}.$$

Un développement de Taylor-Lagrange permet alors d'obtenir

$$\|\bar{\varepsilon}^n\|_{\ell^\infty} \leq C(a^2 \Delta s + a\Delta x) |\partial_x^2 \rho| \leq C(1 + \eta) a \Delta x |\rho_{\text{ini}}|_{W^{2,\infty}(\mathbb{R})}$$

et, en utilisant (1.19)

$$\|e^n\|_{\ell^\infty} \leq CT(1 + \eta) \frac{\Delta s}{\Delta t} a \Delta x |\rho_{\text{ini}}|_{W^{2,\infty}(\mathbb{R})}. \quad (1.20)$$

Comme  $0 \leq \Delta s \leq \Delta t$  et  $0 \leq \eta = a \frac{\Delta s}{\Delta x} \leq 1$ , on peut aussi écrire

$$\|e^n\|_{\ell^\infty} \leq \tilde{C}T |\rho_{\text{ini}}|_{W^{2,\infty}(\mathbb{R})} \min(1, \frac{\Delta x}{\Delta t}) \Delta x, \quad (1.21)$$

ce qui améliore l'estimation (1.20).

On généralise ensuite cette étude à un schéma semi-Lagrangien à  $p + 1$  points d'interpolation. En introduisant  $k$  le décalage du stencil et en notant encore  $r$  l'entier négatif tel que  $x_i - a\Delta t \in [x_{i+r}, x_{i+r+1}[$ , l'expression de  $\tilde{\rho}^n$  sur  $[x_{i+r+1+k-p}, x_{i+r+1+k}]$  est obtenue par interpolation de Lagrange des valeurs  $\rho_{i+r+1+k-p}^n, \dots, \rho_{i+r+1+k}^n$ . Le schéma s'écrit alors

$$\rho^{n+1} = S_{\eta,k,p} \rho^n,$$

avec ici encore  $\eta = \frac{a\Delta s}{\Delta t} \in ]0, 1]$ ,  $\Delta s = (r + 1) \frac{\Delta x}{a} + \Delta t$ . Une analyse de Fourier du schéma permet de montrer que dans les cas  $p \in \{2k, 2k + 1, 2k + 2\}$  le schéma est stable en norme  $L^2$  (voir [132, 73, 28]) :

$$\|S_{\eta,k,p} u\|_{\ell^2} \leq \|u\|_{\ell^2} \quad \forall u = (u_j)_{j \in \mathbb{Z}}$$

puis d'estimer l'erreur de troncature. On obtient alors pour ce schéma à  $p+1$  points, lorsque  $p \in \{2k, 2k + 1, 2k + 2\}$ , l'estimation d'erreur

$$\max_{0 \leq n \leq T/\Delta t} \|e^n\|_{\ell^2} \leq D_{k,p} T \|\rho_{\text{ini}}^{(p+1)}\|_{L^2(\mathbb{R})} \left(1 - \frac{a\Delta s}{\Delta x}\right) \underbrace{\frac{a\Delta s}{\Delta t} \Delta x^p}_{\leq \min(a\Delta x^p, \frac{\Delta x^{p+1}}{\Delta t})}. \quad (1.22)$$

Notons qu'aucune condition CFL n'intervient dans notre analyse puisque notre constante  $\eta$  est naturellement dans  $]0, 1]$ .

### 1.2.2 Application à l'équation de Vlasov-Poisson

On considère ici l'équation de Vlasov-Poisson dite 1d1v pour des électrons

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \partial_x f + E \cdot \partial_v f = 0, \quad \partial_x E(t, x) = \int_{\mathbb{R}} f(t, x, v) dv - 1 \quad (1.23)$$

pour  $(t, x, v) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ , avec une fonction initiale  $f_{\text{ini}}$  suffisamment régulière,  $L$ -périodique en  $x$ , à support compact en  $v$  et vérifiant une condition de neutralité globale

$$f(0, x, v) = f_{\text{ini}}(x, v), \quad \int_0^L \left( \int_{\mathbb{R}} f_{\text{ini}}(x, v) dv - 1 \right) dx = 0. \quad (1.24)$$

On renvoie à [126] pour un résultat d'existence, d'unicité et de régularité de (1.23)-(1.24). En particulier, la solution a un support compact en  $v$ , inclus dans  $[-v_{\text{max}}, v_{\text{max}}]$  pour tout  $t \in [0, T]$ , et le champ  $E$  (qu'on notera encore  $E(f)$ ) peut être exprimé par

$$E(t, x) = \int_0^L K(x, y) \left( \int_{-v_{\text{max}}}^{v_{\text{max}}} f(t, y, v) dv - 1 \right) dy \quad (1.25)$$

où  $K$  est un noyau,  $K \in L^\infty(\mathbb{R}^2)$  (voir [18]).

On introduit un maillage  $(x_i, v_j)_{0 \leq i \leq N_x, 0 \leq j \leq N_v}$  du domaine  $\Omega = [0, L] \times [-v_{\max}, v_{\max}]$ , de pas  $\Delta x$  et  $\Delta v$  dans les directions  $x$  et  $v$ ,  $\Delta t$  un pas de temps, et on note  $f^n = (f_{i,j}^n)_{i,j} \in \mathbb{R}^{N_x \times N_v}$  l'approximation de la solution au temps  $t^n = n\Delta t$ . Pour  $s \in \mathbb{R}$  et  $F = F(x)$ , on définit

$$\mathcal{T}_{x,s} : g \mapsto \mathcal{T}_{x,s}g, \quad \mathcal{T}_{x,s}g(t, x, v) = g(t, x - sv, v)$$

$$\mathcal{T}_{v,F,s} : g \mapsto \mathcal{T}_{v,F,s}g, \quad \mathcal{T}_{v,F,s}g(t, x, v) = g(t, x, v - sF(x))$$

les opérateurs de transport d'une fonction dans chaque direction. On appelle  $\overline{\mathcal{T}}_{x,s}$  et  $\overline{\mathcal{T}}_{v,F,s}$  les opérateurs  $\mathbb{R}^{N_x \times N_v} \rightarrow \mathbb{R}^{N_x \times N_v}$  du schéma semi-Lagrangien dans chaque direction. On considère ici un schéma semi-Lagrangien avec splitting de Strang s'écrivant

$$f^{n+1} = \overline{\mathcal{T}}_{x,\Delta t/2} \overline{\mathcal{T}}_{v,E_h^n, \Delta t} \overline{\mathcal{T}}_{x,\Delta t/2} f^n, \quad n \in \mathbb{N}, \quad f^0 = \Pi f_{\text{ini}}, \quad (1.26)$$

où le champ électrique  $E_h^n(x)$  est calculé à partir de (1.25)

$$E_h^n(x) = \int_0^L K(x, y) \left( \int_{-v_{\max}}^{v_{\max}} (\mathcal{T}_{x,\Delta t/2} \mathcal{R}_{\Delta x} \otimes \mathcal{R}_{\Delta v} f^n)(y, v) dv - 1 \right) dy. \quad (1.27)$$

Ce splitting en temps produit une erreur en  $O(\Delta t^3)$  [56, 84, 18], c'est-à-dire

$$\|f(t^{n+1}, \cdot, \cdot) - \mathcal{T}_{x,\Delta t/2} \mathcal{T}_{v,E,\Delta t} \mathcal{T}_{x,\Delta t/2} f(t^n, \cdot, \cdot)\|_{L^\infty(\Omega)} \leq C \Delta t^3,$$

avec  $E = E(\mathcal{T}_{x,\Delta t/2} f(t^n, \cdot, \cdot))$ . La stratégie de décomposition de l'erreur est similaire à celle de Besse et Mehrenberger dans [18], dont le schéma est basé sur une estimation d'erreur d'interpolation vérifiée par des schémas d'interpolation de Lagrange symétriques ou construits par B-splines, mais nous utilisons l'estimation d'erreur pour le schéma semi-Lagrangien dans chaque direction obtenu en (1.22). Nous obtenons finalement le résultat suivant.

**Théorème 1.3.** *Soit  $f_{\text{ini}} \in W^{p+1,\infty}(\mathbb{R} \times \mathbb{R})$  positive, périodique en  $x$ , à support compact en  $v$ , vérifiant (1.24). On considère le schéma semi-Lagrangien donné par (1.26), où les opérateurs d'interpolation dans chaque direction sur basés sur une interpolation de Lagrange d'ordre  $p+1$ , avec l'entier  $k$  du stencil vérifiant  $p \in \{2k, 2k+1, 2k+2\}$ . Alors il existe une constante  $C = C(\|f\|_{W^{2,\infty}(0,T;W^{p+1,\infty}(\Omega))})$ , indépendante de  $\Delta y := \max(\Delta x, \Delta v)$  et de  $\Delta t$  telle que*

$$\begin{aligned} \|\pi f(t^n, \cdot, \cdot) - f^n\|_{\ell^2} + \max_{0 \leq n \leq T/\Delta t} \|E(t^n, \cdot) - E_h^n\|_{L^\infty(0,T;L^\infty([0,L])} \\ \leq C(\Delta t^2 + \min(1, \frac{\Delta y}{\Delta t}) \Delta y^p) \end{aligned} \quad (1.28)$$

## 1.3 Analyses de convergence pour la méthode LTP

### 1.3.1 Méthode LTP pour un flot passif

Explicitons la méthode LTP et l'analyse de sa convergence pour l'équation (1.2) avec un flot passif, introduites par Campos-Pinto dans [32]. On note  $(x_k^n)_{k \in \mathbb{Z}^d}$  les positions des particules au temps  $t^n$  (données de façon exacte  $x_k^n = F^{0,t^n}(x_k^0)$  ou par une discrétisation du problème de Cauchy (1.3)). Pour tout  $k$ , on introduit  $J_k^{0,n}$

une approximation (inversible) de  $J^{0,t^n}(x_k^n)$ , et on note  $D_k^n = (J_k^{0,n})^{-1}$  la matrice de déformation de la particule  $k$ . On définit une approximation du développement local à l'ordre 1 du flot avant autour de  $x_k^0$  par

$$F_{h,k,1}^{0,n} : x \mapsto x_k^n + J_k^{0,n}(x - x_k^n)$$

et une approximation du linéarisé du flot arrière autour de  $x_k^n$  :

$$B_{h,k,1}^{0,n} = (F_{h,k,1}^{0,n})^{-1} : x \mapsto x_k^0 + D_k^n(x - x_k^n). \quad (1.29)$$

Partant d'une donnée initiale approchée par

$$\rho_h^0(x) = \sum_k \omega_k \varphi_{h,k}^0(x), \quad \text{avec } \varphi_{h,k}^0 := \varphi_h(\cdot - x_k^0) \quad (1.30)$$

l'approximation LTP de l'équation de transport advective (1.2) s'écrit alors

$$\rho_{h,\text{LTP}}^n(x) = \sum_k \omega_k \varphi_{h,k}^n(x), \quad \text{avec } \varphi_{h,k}^n(x) := \varphi_{h,k}^0(B_{h,k,1}^{0,n}(x)) = \varphi_h(D_k^n(x - x_k^n)), \quad (1.31)$$

Remarquons que l'on peut voir cette méthode plutôt basée sur le point de vue "advectif", comme les méthodes semi-Lagrangiennes (on transporte les fonctions de forme), et non le point de vue "conservatif", comme pour les méthodes particulières (où l'on transporte les particules et on régularise la densité). Cependant, lorsque  $\det(D_k^n) = 1$  (ce que l'on peut imposer par exemple pour le système de Vlasov-Poisson, dont le flot exact conserve les volumes), la méthode conserve la masse.

Dans [C2] nous avons appliqué la méthode à une équation écrite sous forme conservative (1.6) ; dans ce cas on définit la forme de la particule  $k$  à l'instant  $t^n$  par  $\varphi_{h,k}^n = F_{h,k,1}^{0,n} \# \varphi_{h,k}^0$ , et l'approximation LTP s'écrit

$$\rho_{h,\text{LTP}}^n(x) = \sum_k \omega_k \det(D_k^n) \varphi_{h,k}^0(B_{h,k,1}^{0,n}(x)). \quad (1.32)$$

Dans ce cas, la méthode conserve la masse.

### Principe de l'analyse de convergence

On suppose ici que  $\varphi \in W^{1,\infty}$ . En écrivant la différence entre la solution LTP (1.31) et la solution exacte de l'équation (1.2) sous la forme

$$\rho(t^n, x) - \rho_{h,\text{LTP}}^n(x) = \rho^0(F^{t^n,0}(x)) - \rho_h^0(F^{t^n,0}(x)) + \sum_k \omega_k \left( \varphi_{h,k}^0(F^{t^n,0}(x)) - \varphi_{h,k}^0(B_{h,k,1}^{0,n}) \right)$$

on voit que l'erreur sur la densité approchée fait intervenir :

- ▷ l'erreur d'approximation de la densité initiale. En introduisant l'opérateur d'approximation en 1d

$$A_h^{(1d)} : g_1 \mapsto \sum_{k \in \mathbb{Z}} \omega_k^{(1d)}(g_1) \varphi_h^{(1d)}(x - x_k^0), \quad \text{avec } \omega_k^{(1d)}(g_1) = h \sum_{|l| \leq m_p} a_l g_1(x_{k+l}^0) \quad (1.33)$$

choisi de façon à être exact sur  $\mathcal{P}_p$ , pour un  $p \in \mathbb{N}$ , et en tensorisant ensuite les poids et fonctions de forme [32], on obtient un opérateur d'approximation

$A_h$  pour fonction  $g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ . On supposera dans toute la suite que cet opérateur vérifie, pour  $1 \leq r \leq \infty$  et  $0 \leq s \leq q \leq p + 1$

$$\|A_h g - g\|_{W^{s,r}} \leq C h^{q-s} \|g\|_{W^{q,r}} \quad (1.34)$$

(voir [C3] pour des exemples de tels opérateurs).

- ▷ l'erreur sur le flot arrière, que l'on peut relier à l'erreur sur le flot avant entre 0 et un instant  $t^n$

$$\bar{e}_F^n := \sup_k \|F^{0,t^n} - F_{h,k,1}^{0,n}\|_{L^\infty(S_{h,k}^0)}, \quad \text{avec} \quad S_{h,k}^0 = \text{Supp}(\varphi_{h,k}^0).$$

Cette erreur est ensuite décomposée en introduisant l'erreur sur les trajectoires des particules, l'erreur induite par la linéarisation du flot autour de chaque particule, et l'erreur induite par l'approximation des matrices jacobiniennes.

- ▷ l'estimation du recouvrement des fonctions de forme des particules en un point  $x$ . On définit

$$\kappa_n := \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \text{Card}(\mathcal{K}_n(x)), \quad \mathcal{K}_n(x) := \{k \in \mathbb{Z}^d, x \in F^{0,t^n}(S_{h,k}^0) \cup F_{h,k,1}^{0,n}(S_{h,k}^0)\}$$

et on peut majorer ce recouvrement en fonction de l'erreur sur le flot :

$$\kappa_n \leq C \left(1 + \frac{\bar{e}_F^n}{h}\right)^d.$$

### 1.3.2 Application à l'équation de Vlasov-Poisson

Dans [C3], en collaboration avec M. Campos-Pinto, on s'est intéressé à l'approximation par la méthode LTP de l'équation de Vlasov-Poisson 1d1v (1.23)-(1.24), en domaine périodique en espace, avec une donnée initiale  $f_{\text{ini}} \in W^{2,\infty}([0, T] \times \mathbb{R})$  à support compact en  $v$ . Pour alléger les notations, on notera  $f_h^n$  la solution approchée obtenue par méthodes LTP,  $z = \begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix}$  la variable dans le plan des phases et

$z_k^n = \begin{pmatrix} x_k^n \\ v_k^n \end{pmatrix}$ , pour  $k \in K$  ( $K$  un sous-ensemble de  $\mathbb{Z}^2$ ) les positions et vitesses des particules. Le transport de celles-ci est basé ici encore sur un splitting de Strang : en appelant

$$F_{1,\Delta t/2} : (x, v) \mapsto \left(x + \frac{\Delta t}{2}v, v\right) \quad \text{et} \quad F_{2,A,\Delta t} : (x, v) \mapsto (x, v + \Delta t A(x))$$

les flots de transport dans chaque direction (pour une fonction  $A$  indépendante du temps), la suite  $(x_k^n, v_k^n)_{k \in K}$  est définie par

$$(x_k^{n+1}, v_k^{n+1}) = F_{1,\Delta t/2} \circ F_{2,E_h^{n,1},\Delta t} \circ F_{1,\Delta t/2}(x_k^n, v_k^n),$$

où  $E_h^{n,1}(x)$  est une approximation du champ électrique après la première phase de transport en  $x$  à  $t^n + \Delta t/2$ . Le flot  $F_{1,\Delta t/2}$  étant linéaire, son linéarisé autour de chaque particule est lui-même. On définit aussi les densités approchées par méthodes LTP  $(f_h^n)_{n \geq 0}$  avec ce splitting.

▷ on définit une solution intermédiaire

$$f_h^{n,1} = \sum_k \omega_k \varphi_{h,k}^{n,1}, \quad \text{avec} \quad \varphi_{h,k}^{n,1}(z) = \varphi_h \left( D_k^{n,1}(z - F_{1,\Delta t/2}(z_k^n)) \right),$$

et

$$D_k^{n,1} = D_k^n \left( J_{F_{1,\Delta t/2}} \right)^{-1} = D_k^n \begin{pmatrix} 1 & -\Delta t/2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

▷ on calcule le champ électrique, donné de façon exacte pour notre analyse (et en pratique par quadrature ou résolution de l'équation de Poisson) par

$$E_h^{n,1}(x) = \int_0^L K(x, y) \left( \int_{\mathbb{R}} f_h^{n,1}(t, y, v) dv - 1 \right) dy \quad (1.35)$$

▷ on calcule la solution approchée au temps  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$

$$f_h^{n+1} = \sum_k \omega_k \varphi_{h,k}^{n+1}, \quad \text{avec} \quad \varphi_{h,k}^{n+1}(z) = \varphi_h \left( D_k^{n+1}(z - z_k^{n+1}) \right).$$

La matrice de déformation au temps  $t^{n+1}$  est calculée par  $D_k^{n+1} = D_k^{n+1}(J_k^{n,1})^{-1}$ , où  $J_k^{n,1}$  est une approximation de la matrice jacobienne de  $F_{1,\Delta t/2} \circ F_{2,E_h^{n,1},\Delta t}$  en  $z_k^n$ , calculée en utilisant une approximation par différences finies de  $E_h^{n,1}$ .

**Remarque 1.2.** *En pratique, on peut aussi calculer directement  $J_k^{0,n} = (D_k^n)^{-1}$  la matrice jacobienne du flot entre 0 et  $t^n$  par différences finies sur la grille d'initialisation des positions des particules, avec une renormalisation pour que  $\det(J_k^{0,n}) = 1$  afin de préserver la conservation de la masse. On renvoie à [32, 117] pour plus de détails.*

**Remarque 1.3.** *Pour faire le lien avec la partie 1.2.2, on peut remarquer que  $f_h^{n,1} = \mathcal{T}_{x,\Delta t/2} f_h^n$ , car le flot  $F_{1,\Delta t/2}$  est linéaire, donc son linéarisé (lui-même) est le même pour toutes les particules.*

Ici encore, l'erreur sur le splitting  $\|F^{t^n, t^{n+1}} - F_{1,\Delta t/2} \circ F_{2,E,\Delta t/2} \circ F_{1,\Delta t/2}\|_{L^\infty(\Omega)}$ , où  $E = E(\mathcal{T}_{x,\Delta t/2} f(t^n))$ , est en  $O(\Delta t)^3$ . Des premières estimations a priori permettent de borner l'erreur sur le flot et sur le champ  $E$ . On relie ensuite les erreurs sur la Jacobienne et sur le champ à l'erreur sur le flot  $\bar{e}_F^n$ , ce qui permet d'établir, sous la condition  $\Delta t \lesssim \sqrt{h}$ , l'inégalité  $\bar{e}_F^{n+1} \leq \bar{e}_F^n + C\Delta t(\bar{e}_F^n + h^2 + \Delta t^2)$ , et de d'appliquer finalement un lemme de Gronwall discret. On obtient finalement, sous la condition  $\Delta t \lesssim \sqrt{h}$ , une convergence des trajectoires et du champ  $E$

$$\sup_{0 \leq n \leq T/\Delta t} \|E_h^{n,1} - E(t_{n+1/2})\|_{L^\infty} + \sup_k \|z_k^n - F^{0,t^n}(z_k^0)\| \leq C_T (h^2 + \Delta t^2)$$

à un ordre plus élevé que pour une méthode PIC "smooth particle" (l'estimation de [50] est en  $O(h)$ ), ainsi que la convergence de la densité approchée

$$\|f_h^n - f_{\text{ex}}^n\|_{L^\infty(\mathbb{R}^2)} \leq C_T \left( h + \frac{\Delta t^2}{h} \right)$$

où la constante  $C_T$  dépend de  $\|f\|_{W^{2,\infty}([0,T] \times [0,L] \times [-v_{\text{max}}, v_{\text{max}}])}$ .

### 1.3.3 Méthode LTP pour une équation d'agrégation

Dans [C2], en collaboration avec M. Campos-Pinto, J. A Carrillo et Y-P Choi, on s'intéresse à la discrétisation d'une équation modélisant l'agrégation de particules, qui s'écrit sous la forme d'une équation de transport non linéaire

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\mathbf{u}\rho) &= 0, & \rho(0, \cdot) &= \rho^0 \\ \mathbf{u}(t, x) &= -(\nabla_x W \star \rho(t))(x) \end{aligned} \quad (1.36)$$

où  $W : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  est un potentiel d'interaction. On considère ici deux types de potentiel.

**Les potentiels réguliers** (*smooth*) c'est-à-dire  $\nabla W \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d)$ . Dans ce cas on voit facilement que dès que  $\rho^0 \in L^1(\mathbb{R}^d)$  le champ de vitesse est Lipschitzien, avec

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \|\mathbf{u}(t, \cdot)\|_{W^{1,\infty}} \leq C \|\rho^0\|_{L^1} \|\nabla W\|_{W^{1,\infty}}.$$

Le caractère bien posé de (1.36) dans ce contexte a été étudié dans [16]. Si  $\rho^0 \in W^{1,1}$ ,  $\rho_0 \geq 0$  alors il existe une unique solution de (1.36) qui vérifie  $\rho \in L^\infty(0, T, W^{1,1})$ ,  $\rho \geq 0$  pour tout  $T > 0$ . De plus, l'approche introduite par Dobrushin [82] pour les solutions mesures peut s'appliquer et conduit à l'existence de solutions mesures [33, 34].

**Les potentiels singuliers.** On suppose pour ceux-ci que  $\nabla W \in W_{\text{loc}}^{1,q}(\mathbb{R}^d)$ , ainsi que les propriétés suivantes

$$|\nabla W(x)| \leq \frac{C}{|x|^\alpha}, \quad |D^2 W(x)| \leq \frac{C}{|x|^{\alpha+1}}, \quad (1.37)$$

avec  $-1 < \alpha < d - 1$ , et  $1 \leq q \leq \frac{d}{\alpha+1}$ . C'est le cas par exemple du potentiel attractif-repulsif

$$W_{ab}(x) = \frac{|x|^a}{a} - \frac{|x|^b}{b}, \quad \text{avec} \quad 2 - d < b < a < 2.$$

Les hypothèses  $\nabla W \in W_{\text{loc}}^{1,q}(\mathbb{R}^d)$  et (1.37) permettent de garantir que le champ de vitesse est Lipschitzien en  $x$  (localement en temps) pour des densités dans  $L^1(\mathbb{R}^d) \cap L^p(\mathbb{R}^d)$ , où  $p$  est l'exposant conjugué de  $q$ . Sous ces hypothèses, il a été montré [15] que si  $\rho^0 \in W^{1,1} \cap W^{1,p}(\mathbb{R}^d)$ ,  $1 \leq q \leq d/(\alpha + 1)$ ,  $\rho^0 \geq 0$ , alors il existe un temps  $T^*$  tel que pour  $0 \leq T < T^*$ ,  $\rho \in L^\infty(0, T, W^{1,1} \cap W^{1,p}(\mathbb{R}^d))$ . Il peut dans ce cas il avoir *blow-up* en temps fini.

Des discrétisations de l'équation (1.36) ont été proposés dans [55] par une méthode particulaire, dans [102] par une méthode de volumes finis, ou encore dans [37] par des méthodes utilisant la structure de Flot de gradient de l'équation. Nous introduisons ici une méthode LTP en dimension quelconque  $d$ , qui s'écrira sous la forme (1.32), et pour lequel la matrice Jacobienne approchée du flot entre  $t^n$  et  $t^{n+1}$  sera une approximation (calculée en chaque position de particule) de

$$\tilde{J}^{t^n, t^{n+1}}(x) = \exp \left( - \int_{t^n}^{t^{n+1}} (D^2 W \star \rho(s)) (F^{t^n, s}(x)) ds \right).$$

Cette matrice ne correspond pas (pour  $d > 1$ ) à  $J^{t^n, t^{n+1}}(x)$ , mais cette dernière vérifiant l'équation  $\frac{d}{dt} J^{s,t}(x) = D_x \mathbf{u}(t, F^{s,t}(x)) J^{s,t}(x)$  nous prouvons que pour  $\mathbf{u} \in L^\infty(0, T; W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d))$  la différence entre les deux est en  $O(\Delta t^2)$ .

Nous obtenons des résultats de convergence forte en normes  $L^1$  et  $L^\infty$  pour les potentiels réguliers.

**Théorème 1.4.** *On suppose que  $\Delta t = O(h)$ . Si  $\rho^0 \in W^{1,1}(\mathbb{R}^d)$ ,  $\rho^0 \geq 0$  et  $\nabla W \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d)$ , alors il existe  $C$  (dépendant de  $d$ ,  $T$ ,  $\|\nabla W\|_{W^{1,\infty}}$  et de  $\|\rho^0\|_{W^{1,1}}$  uniquement) tel que*

$$\max_{0 \leq n \leq N} \|\rho(t_n) - \rho_h^n\|_{L^1} \leq C \left( \|\rho^0 - \rho_h^0\|_{L^1} + h + \frac{\Delta t}{h} \right)$$

De plus si  $\rho^0 \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$  alors on a aussi convergence en norme  $L^\infty$

$$\max_{0 \leq n \leq N} \|\rho(t_n) - \rho_h^n\|_{L^\infty} \leq C \left( \|\rho^0 - \rho_h^0\|_{L^\infty} + \|\rho^0 - \rho_h^0\|_{L^1} + h + \frac{\Delta t}{h} \right).$$

On prouve aussi la convergence (sans condition sur le pas de temps) des solutions mesures pour la distance  $d_{BL}$  (voir par exemple [34]) définie par

$$d_{BL}(\rho_1, \rho_2) := \sup \left\{ \left| \int_{\mathbb{R}^d} \psi d\rho_1 - \int_{\mathbb{R}^d} \psi d\rho_2 \right| : \psi \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d) \text{ and } \|\psi\|_{W^{1,\infty}} \leq 1 \right\}.$$

**Théorème 1.5.** *Si  $\rho^0 \in \mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$  et  $\nabla W \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d)$  alors il existe  $C$  ne dépendant que de  $d$ ,  $T$ ,  $\|\nabla W\|_{W^{1,\infty}}$  tel que*

$$\max_{0 \leq n \leq \frac{T}{\Delta t}} d_{BL}(\rho(t^n), \rho_h^n) \leq C(d_{BL}(\rho^0, \rho_h^0) + h + \Delta t).$$

Dans le cas de potentiels singuliers, la preuve de la convergence est plus délicate. Le problème est qu'on ne peut pas obtenir de borne *a priori* sur  $\sup_{0 \leq n \leq N} \|\rho_h^n\|_{L^p}$  (comme c'était le cas pour la norme  $L^1$  dans le cas précédent), qui nous est nécessaire pour estimer la vitesse des particules. On considère alors  $0 < T < T^*$  (où  $T^*$  est le temps d'existence de la solution),  $N \in \mathbb{N}$ ,  $\Delta t = T/N$  et introduit

$$\|\cdot\| := \|\cdot\|_{L^1} + \|\cdot\|_{L^p}, \quad \Gamma_h^n := \|\rho(t^n) - \rho_h^n\|, \quad \text{and} \quad \widetilde{\Gamma}_h^n := \sup_{0 \leq m \leq n} \Gamma_h^m.$$

et on prouve par induction sur  $n$  qu'il existe un  $h_* > 0$  pour lequel  $\sup_{0 < h \leq h_*} \widetilde{\Gamma}_h^N \leq 1$ . On obtient finalement le Théorème suivant.

**Théorème 1.6.** *On suppose que le potentiel  $W \in W_{\text{loc}}^{1,q}(\mathbb{R}^d)$  vérifie (1.37). On considère  $\rho^0 \in W^{2,p}(\mathbb{R}^d)$ , avec  $1/p + 1/q = 1$ , et  $\rho$  une solution de (1.36) définie sur un intervalle de temps  $[0, T]$ , telle que  $\rho \in L^\infty(0, T; (W^{1,1} \cap W^{1,p} \cap L^\infty)(\mathbb{R}^d))$ . On suppose que  $\Delta t \lesssim h^2 \leq 1$ . Alors il existe  $h_* > 0$  et  $C$  indépendante de  $h$  et de  $\Delta t$  tels que*

$$\sup_{0 < h \leq h_*} \sup_{0 \leq n \leq N} \|\rho_h^n - \rho^n\| \leq Ch.$$

On remarque dans les Théorèmes 1.5 et 1.6 une contrainte entre  $h$  et  $\Delta t$  pour obtenir la convergence. Celle-ci n'est cependant pas aussi restrictive qu'une condition CFL. De plus, l'utilisation d'un schéma en temps d'ordre plus élevé pour la discrétisation des trajectoires des particules devrait peut-être pouvoir affaiblir cette contrainte.

## 1.4 La méthode FBL (Forward-Backward Lagrangian)

La méthode LTP permet d'améliorer la qualité de la reconstruction dans une méthode particulière, mais nécessite cependant des remappings réguliers (même s'ils sont moins fréquents que dans une méthode particulière standard). En effet, les supports des fonctions de forme des particules  $\varphi_{h,k}^n$  peuvent s'étirer trop dans une direction (si la matrice  $D_k^n$  possède une valeur propre significativement plus petite que les autres), ce qui conduit à une perte de localité dans la reconstruction. La précision de la densité approchée est alors altérée, et le coût CPU de reconstruction augmente également.

### 1.4.1 Principe

La méthode proposée dans [C4] peut se voir comme une méthode semi-Lagrangienne, basée sur l'expression de la solution (1.5) ou (1.7), dans laquelle le flot arrière entre  $t^n$  et 0 est reconstruit à partir du déplacement de particules. Ces particules, poussées en avant comme dans une méthode particulière, peuvent être vues uniquement comme des "marqueurs" sans poids et "sans forme" puisque les fonctions de forme  $\varphi$  ne sont plus utilisées ici. Contrairement à une méthode semi-Lagrangienne classique, c'est le flot arrière entre  $t^n$  et 0, ou un instant de remapping, qui est approché (et non plus celui entre  $t^{n+1}$  et  $t^n$ ). Décrivons ici la méthode pour un flot passif  $\mathbf{a}$  et sans s'occuper du solveur en temps de (1.3) permettant de calculer les positions des particules  $(x_k^n)_{k \in K, n \geq 0}$ .

- (i) A chaque particule de position  $x_k^n$  on associe le flot arrière polynomial  $B_{h,k}^{0,n}$  obtenu par développement de Taylor local autour de  $x_k^n$ , à l'ordre 1 comme dans  $B_{h,k,1}^{0,n}$  donné par (1.29), ou à l'ordre supérieur comme

$$B_{h,k,2}^{0,n} : x \mapsto x_k^0 + D_k^n(x - x_k^n) + \frac{1}{2} \left( (x - x_k^n)^t (Q_k^n)_i (x - x_k^n) \right)_{1 \leq i \leq d} \quad (1.38)$$

où  $(Q_k^n)_i$  est une approximation de la matrice Hessienne de la  $i$ ème composante du flot arrière de  $t^n$  à 0.

- (ii) On construit une approximation globale du flot arrière à partir de ces approximations locales. Pour cela on peut considérer une partition de l'unité à l'aide d'une fonction  $S$  positive et à support compact et vérifiant

$$\sum_{i \in \mathbb{Z}^d} S(x - i) = 1, \quad x \in \mathbb{R}^d \quad (1.39)$$

C'est le cas par exemple des B-splines. On introduit ensuite une grille  $\mathcal{G}_F$  de reconstruction du flot (dont on note les noeuds  $\xi_i = ih_F$ ,  $i \in \mathbb{Z}^d$  pour éviter la confusion avec la grille d'initialisation des particules) et la fonction

$$S_{h_F,i}(x) = S\left(\frac{x - \xi_i}{h_F}\right).$$

Pour chaque noeud de  $\mathcal{G}_F$  on définit  $k^*(n, i)$  l'indice de la particule la plus proche du noeud  $\xi_i$

$$k^*(n, i) := \operatorname{argmin}_{k \in \mathbb{Z}^d} \|x_k^n - \xi_i\|_\infty,$$

et on introduit l'approximation globale du flot par

$$B_h^{n,0}(x) := \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} B_{h,k^*(n,i)}^{n,0}(x) S_{h_F,i}(x), \quad (1.40)$$

et éventuellement (dans le cas de l'équation (1.6) une approximation globale du jacobien arrière  $\det(J_{\text{ex}}^{t_n,0}(x))$

$$j_{B,h}^n(x) = \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} \det(D_{k^*(n,i)}^n) S_{h_F,i}(x). \quad (1.41)$$

(iii) On utilise finalement la densité initiale (ou une interpolation de la densité au dernier temps de remapping) pour définir la densité approchée

$$f_h^{n,\text{FBL}}(x) := f^0(B_h^n(x)) \quad (1.42)$$

(ou  $f_h^{n,\text{FBL}}(x) := f^0(B_h^n(x)) j_{B,h}^n(x)$  dans le cas de (1.7)).

Dans (1.29) et (1.38) les matrices Jacobiennes (et éventuellement Hessiennes) approchées du flot avant (qui permettent d'obtenir les approximations  $D_k^n$  et  $Q_{k,i}^n$ , voir les Annexes A et B de [C4] ) peuvent être calculées par une expression approchée (comme pour les équations de Vlasov-Poisson et d'agrégation que nous avons considérées dans les parties 1.3.2 et 1.3.3), ou par différences finies des positions des particules  $x_k^n$  sur la grille d'initialisation (voir [32, 117]).

### 1.4.2 Estimation d'erreur pour un flot passif

Nous prouvons le théorème suivant, pour un flot passif, en supposant exactes les trajectoires des particules, c'est-à-dire  $x_k^n = F^{0,t_n}(x_k^0)$  pour  $k \in K$ , et un nombre  $R$  de remappings fixé sur l'intervalle de temps  $[0, T]$  considéré. On suppose pour les remappings que l'opérateur d'interpolation ou d'approximation  $A_h$  d'ordre  $p$  vérifie (1.34). On prend ici  $h_F = h$  pour simplifier.

**Théorème 1.7.** *On suppose que  $\rho^0 \in W^{1,\infty}$  et que les flots exacts avant et arrière  $F^{0,t_n}$  et  $F^{t_n,0}$  sont dans  $W^{2,\infty}(\mathbb{R}^d)$ . Alors il existe  $h^*$  tel que pour  $h \leq h^*$  l'approximation FBL pour (1.2) à l'ordre 1 vérifie*

$$\|\rho_{h,\text{FBL}}^n - \rho_{\text{ex}}^n\|_{L^\infty} \leq C_{1,n} h^2, \quad (1.43)$$

où la constante  $C_{1,n}$  dépend de  $|\rho^0|_{W^{1,\infty}}$ , de  $|F^{0,t_n}|_{W^{1,\infty}}$  et de  $|F^{t_n,0}|_{W^{2,\infty}}$ . De plus si  $F^{0,t_n}$  et  $F^{t_n,0}$  sont dans  $W^{3,\infty}(\mathbb{R}^d)$ , l'approximation à l'ordre 2 vérifie

$$\|\rho_{h,\text{FBL}}^n - \rho_{\text{ex}}^n\|_{L^\infty} \leq C_{2,n} h^3, \quad (1.44)$$

où la constante  $C_{2,n}$  dépend de  $|\rho^0|_{W^{1,\infty}}$ , de  $|F^{0,t_n}|_{W^{2,\infty}}$  et de  $|F^{t_n,0}|_{W^{3,\infty}}$ .

On gagne donc un ordre en  $h$  comparativement à la méthode LTP [32]. Ce gain provient du fait que l'estimation d'erreur fait maintenant intervenir  $|\rho^0|_{W^{1,\infty}}$  (ou la norme de la densité reconstruite à un instant de remapping) et non plus les termes  $|\varphi_{h,k}^n|_{W^{1,\infty}}$ , qui sont de l'ordre de  $\frac{1}{h}$ . De plus, dans le cas d'une équation de transport linéaire comme ici, on voit que le gain en ordre obtenu par augmentant l'ordre du développement asymptotique fait appel la régularité du flot (et donc à  $a(t, x)$ ), et ne requiert pas une régularité plus grande de la solution (et donc de la condition initiale), comme c'est le cas pour les méthodes semi-Lagrangiennes.

Par ailleurs, nous montrons que la régularité de la solution approchée est préservée.

**Théorème 1.8.** *Sous les mêmes hypothèses que le Théorème 1.7, la reconstruction FBL à l'ordre  $r \in \{1, 2\}$  vérifie*

$$\|\rho_{h,\text{FBL}}^n\|_{W^{q,\infty}} \leq C\|\rho^0\|_{W^{q,\infty}}, \quad \text{pour } 1 \leq q \leq r+1$$

où la constante  $C$  dépend des flots avant et arrière  $F^{0,t_n}$  et  $F^{t_n,0}$  mais pas de  $h$ .

**Remarque 1.4.** *Les estimations d'erreur (1.43) et (1.43) ne dépendent pas de  $\Delta t$  car nous n'avons pas introduit de discrétisation en temps pour la résolution de (1.3). Par ailleurs, dans le cas de la méthode avec remappings, l'erreur après  $r$  remappings  $e_r := \max_{m_{r-1} \leq n \leq m_r} \|\rho_{h,\text{FBL}}^n\|_{W^{1,\infty}}$ , où  $(m_r)_{1 \leq r \leq R+1}$  sont les indices des temps de remapping, vérifie*

$$\max_{1 \leq r \leq R+1} e_r \leq CT \|A_h\|_{L^\infty}^R \frac{h^2}{\Delta r}$$

où  $\Delta r = T/(R+1)$ . Cette estimation peut alors exploser si  $\|A_h\|_{L^\infty} > 1$  et que le nombre de remappings est proportionnel au pas de temps lorsqu'on introduit une discrétisation en temps. Cependant, on constate en pratique que ce n'est pas nécessaire.

## 1.5 Illustrations numériques

Je présente dans cette section quelques illustrations numériques et comparaisons des différentes méthodes dont il est question dans ce chapitre. D'autres simulations numériques (notamment sur l'équation de Vlasov-Poisson ou des équations d'aggrégation) peuvent être trouvées dans [C3, C2, C4].

### 1.5.1 Équation de transport 1d

**Advection à vitesse constante** On peut tout d'abord s'intéresser à l'équation d'advection (1.15) à vitesse constante  $a = 1$ . La Figure 1.2 présente des cas tests

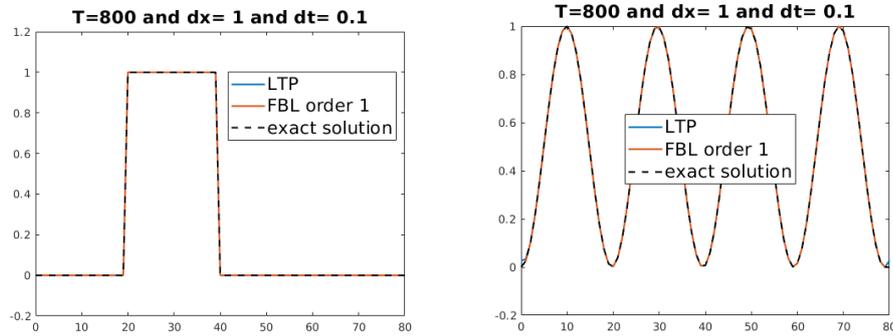


FIGURE 1.2 – Cas test pour l'équation d'advection à vitesse constante (1.15) avec des conditions aux limites périodiques, au temps  $T=800$ . Les particules (initialement sur une grille de pas  $h = 1$ ) sont poussées avec un schéma d'Euler explicite et un pas de temps de  $\Delta t = 1$ . La condition initiale est sur la figure de gauche  $\rho_{\text{ini}}(x) = \mathbb{1}_{[20,40]}(x)$ , et sur celle de droite  $\rho_{\text{ini}}(x) = \frac{1 - \cos(x/\pi)}{2}$ .

issus de [133] et repris dans [57], dans lesquels les auteurs comparent différents schémas (MUSCL, WENO, le schéma d’Umeda, schéma semi-Lagrangien conservatif...) pour l’équation (1.15) avec deux conditions initiales différentes (un rectangle ou une sinusoïde) et des conditions aux limites périodiques. Pour les mêmes paramètres de discrétisation, les résultats fournis par les méthodes LTP et FBL sont clairement meilleurs, ce qui n’est pas très étonnant : le flot étant ici linéaire, l’erreur faite sur l’approximation des flots arrières est nulle.

**Advection à vitesse non constante** On considère ici l’équation d’advection (1.2) avec un champ  $a(t, x) = x^2$ , pour lequel on peut calculer explicitement la solution.

La figure 1.3 compare les méthodes LTP et FBL avec des schémas semi-Lagrangien (BSL) (à 2 et 5 points) pour une donnée initiale continue mais non  $C^1$ . Comme attendu, la méthode BSL à 2 points vérifie le principe du maximum mais est plus diffuse. Le schéma LTP est moins précis que le BSL à 5 points (et ni l’un ni l’autre ne vérifie le principe du maximum), mais ce dernier présente des oscillations. La méthode FBL (sans remapping) fournit une solution approchée quasiment confondue avec la solution exacte. La figure 1.4 présente des courbes de

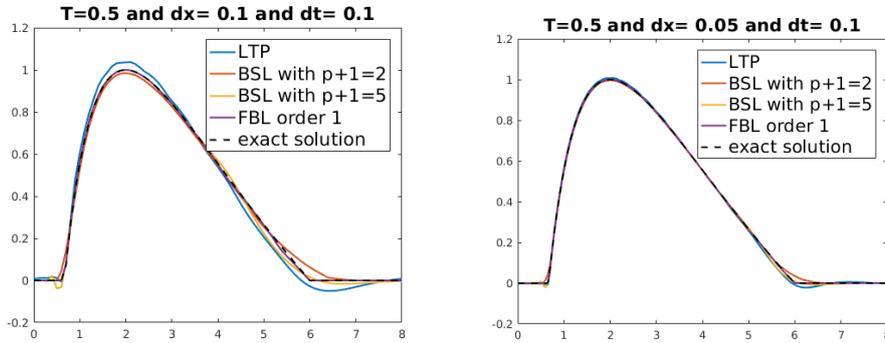


FIGURE 1.3 – Cas test pour l’équation d’advection (1.2) avec un champ  $a(t, x) = x^2$  et la condition initiale  $\rho_{\text{ini}}(x) = \max(0, -4x^2 + 8x - 3)$ . On utilise le schéma RK4 pour l’advection des particules. À gauche :  $h = \Delta x = 0.1$  ; à droite  $h = \Delta x = 0.05$ .

convergence des méthodes BSL, LTP et FBL (à l’ordre 1, noté  $\text{FBL}_1$ , et à l’ordre 2, noté  $\text{FBL}_2$ ), pour deux conditions initiales de régularités différentes. Le tableau 1.1 donne les ordres de convergence calculés. La méthode  $\text{FBL}_2$  a comme prévu un ordre de convergence plus élevé que la méthode  $\text{FBL}_1$  et la méthode LTP. De plus, on retrouve ce qui a été observé dans le Théorème 1.7 : l’ordre de convergence de la méthode FBL n’est pas sensible à la régularité de la condition initiale (à partir du moment où celle-ci est au moins dans  $W^{1,\infty}$ ). En particulier, si la méthode BSL à 5 points est plus précise que la méthode  $\text{FBL}_1$  lorsque la condition initiale est une B3-spline (qui est dans  $W^{2,\infty}$ ), ce n’est plus le cas plus la fonction  $\rho_{\text{ini}}(x) = \max(0, -4x^2 + 8x - 3)$ .

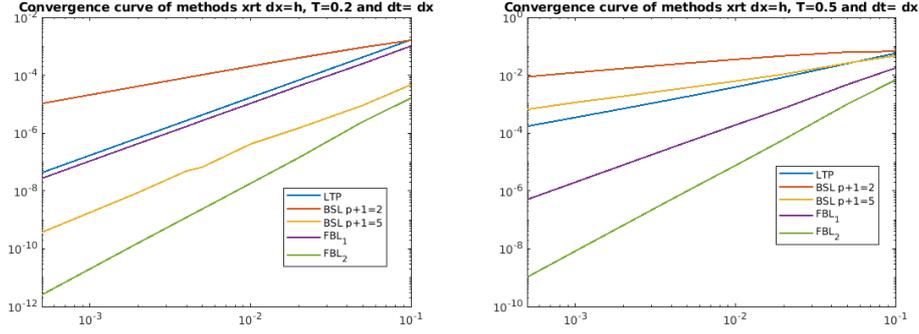


FIGURE 1.4 – Courbes de convergence en norme  $L^\infty$  en fonction de  $\Delta x = h$  de différentes méthodes pour l'équation d'advection (1.2) avec un champ  $a(t, x) = x^2$ . On utilise le schéma RK4 pour l'advection des particules et un pas de temps  $\Delta t = h$ . A gauche : pour la donnée initiale  $\rho_{\text{ini}}^1(x) = B_3(x)$  ; à droite  $\rho_{\text{ini}}^2(x) = \max(0, -4x^2 + 8x - 3)$ .

	$\rho_{\text{ini}}^1$	$\rho_{\text{ini}}^2$
LTP	2	1.1
BSL $p = 1$	0.96	0.4
BSL $p = 4$	2.2	0.8
FBL <sub>1</sub>	1.99	1.98
FBL <sub>2</sub>	2.97	2.97

TABLE 1.1 – Ordres de convergence calculés pour les courbes de la Figure 1.4.

### 1.5.2 Équation d'Euler incompressible en formulation vorticité

On considère ici l'équation d'Euler incompressible en formulation vorticité

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial w}{\partial t} + u \cdot \nabla w = 0, \\ \text{rot } u = w, \\ \text{div } u = 0, \\ \lim_{|x| \rightarrow +\infty} |u| = 0, \end{array} \right. \quad (1.45)$$

avec la même condition initiale que dans [11]

$$w^0(x) = w_I^0(\sqrt{(x_1/0.8)^2 + (x_2/1.6)^2}), \quad w_I^0(r) = 20(1 - e^{-\frac{2.56085}{r}} e^{\frac{1}{(r-1)}}). \quad (1.46)$$

Le champ de vitesses peut être exprimé en fonction de  $w$  par (voir [53])

$$u = K * w \quad \text{where} \quad K(x) = \frac{1}{2\pi|x|^2}(-x_2, x_1). \quad (1.47)$$

Cet exemple a été utilisé comme cas test dans [103] et dans [11] pour illustrer des méthodes particulières utilisant du remapping adaptatif et multi-échelle. On utilise pour ici la même expression du champ de vitesses que dans les méthodes

particulaires standards, c'est-à-dire une représentation particulière régularisée

$$u_{h,\varepsilon}(t, x_k(t)) = \sum_{j \neq k} \omega_j K_\varepsilon(x_k(t) - x_j(t)).$$

avec  $K_\varepsilon = K * \zeta_\varepsilon$ . On peut trouver des exemples de fonctions de régularisation  $\zeta$  et de noyaux  $K_\varepsilon$  en résultant dans [11] et [97]. La figure 1.5 présente une comparaison des solutions approchées obtenues par des méthodes LTP et FBL. Si les résultats sont comparables lorsque le pas de temps entre deux remappings est de 0.1, on observe une dégradation de la précision de la méthode LTP lorsque la période de remapping augmente.

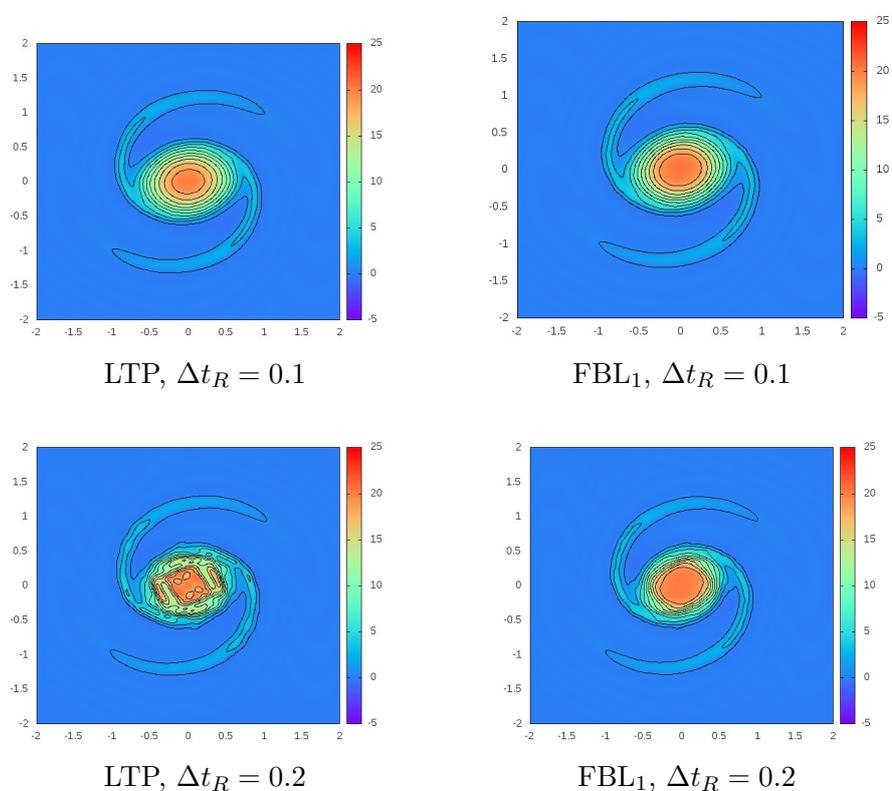


FIGURE 1.5 – Approximation de la vorticité solution de l'équation (1.45)-(1.46) avec les schémas LTP ou FBL (à l'ordre 1, noté FBL<sub>1</sub>) au temps  $t = 1.5$ , pour différentes périodes de remapping. On a ici utilisé un schéma RK4 avec  $\Delta t = 0.01$  pour les trajectoires de particules, un paramètre  $\varepsilon = 0.01$  de régularisation du noyau  $K$ . On utilise une grille d'initialisation de  $50 \times 50$ , soit  $h = 0.08$ .

La méthode FBL nécessite alors moins de remappings (re-création des particules numériques sur la grille initiale et recalcul des poids) que la méthode LTP.

## 1.6 Perspectives

J'aimerais poursuivre l'application et l'analyse des méthodes LTP/FBL à divers modèles issus de la physique. L'un des projets auxquels j'ai commencé à m'intéresser est l'approximation des équations de convection-diffusion

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - \Delta \rho^m + \nabla(\mathbf{a}\rho) = 0,$$

où  $\mathbf{a}$  est un champ d'advection, notamment en vue d'applications à des problèmes à géométries complexes (pour lesquels une méthode particulière pourrait être plus adaptée qu'une méthode avec maillage). L'idée, déjà exploitée par P. Degond et F-J Mustieles dans [67] et justifiée théoriquement par [107] (dans le cas  $m = 1$  et  $m = 2$ ), est de se ramener à la forme d'une équation de transport

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}(\rho)\rho) = 0, \quad \text{avec} \quad \mathbf{u}(\rho) = -m\rho^{m-2}\nabla\rho + \mathbf{a}$$

et d'effectuer une approximation de  $\nabla\rho$  pour reconstruire le champ de vitesses  $\mathbf{u}(\rho)$ . Différentes approches sont possibles. L'approche considérée par [67] en 1d (pour  $m = 1$  ou  $m = 2$ , c'est-à-dire l'équation de la chaleur ou des milieux poreux, est d'approcher  $\rho'(t^n, \cdot)$  par  $\rho_\varepsilon^{n'}(x) = \sum_{k=1}^n \frac{\omega_k}{\varepsilon^2} \varphi' \left( \frac{x - x_k^n}{\varepsilon} \right)$ . Cette idée est facilement adaptable à la méthode LTP en dérivant les fonctions de forme  $\varphi_{h,k}^n$  de chaque particule. En collaboration avec F. Plouraboué et J. Dichamp (Laboratoire de Mécanique des Fluides de Toulouse), nous avons commencé à nous intéresser à l'application de cette idée pour la simulation de la diffusion de température dans une géométrie complexe (type réseau vasculaire). Le choix d'une méthode particulière qui ne nécessite pas de maillage est dans ce contexte motivé par la complexité de maillage des interfaces.

Il reste beaucoup de possibilités d'adaptation à investiguer, notamment sur le choix du calcul de  $\nabla\rho$ . En collaboration avec J-A Carrillo nous étudions la possibilité de se ramener à une équation de type agrégation en approchant  $\nabla\rho$  par  $\nabla\varphi_\varepsilon \star \rho$ , où  $\varphi_\varepsilon$  est une approximation régulière de Dirac, comme dans [35].

Une autre approche possible est l'utilisation d'une méthode de type FBL, en utilisant une approximation de la solution et de sa dérivée le long des trajectoires des particules numériques, uniquement, avec la vision Lagrangienne sur laquelle se base la méthode FBL. L'intérêt est ici que l'on peut obtenir une approximation de  $\rho(t^n, x_k^n)$  et  $\nabla\rho(t^n, x_k^n)$  dépendant uniquement des valeurs de  $\rho(t^0, x_k^0)$ , de  $\nabla\rho(t^0, x_k^0)$ , et des approximations locales des matrices jacobiniennes et Hessiennes du flot entre 0 et  $t^n$ , et que l'on devrait pouvoir se passer de reconstruire  $\rho$  à chaque pas de temps.



## Chapitre 2

# Modèles cinétiques d'écoulements gaz-particules

Le contenu de ce chapitre s'appuie sur les travaux [C7, C8, C14, C10] et [C15].

### Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>30</b>
<b>2.2</b>	<b>Un modèle avec opérateurs de collisions</b>	<b>31</b>
2.2.1	Modélisation	31
2.2.2	Dissipation d'entropie et états d'équilibre	34
2.2.3	Asymptotique à faible rapport de masse	36
2.2.4	Perspectives	38
<b>2.3</b>	<b>Un modèle avec domaine à frontière mouvante</b>	<b>39</b>
2.3.1	Modélisation et existence de solutions	39
2.3.2	Simulations numériques	42
2.3.3	Perspectives	43

---

## 2.1 Introduction

On s'intéresse dans ce chapitre à des modèles décrivant l'évolution de particules (telles que des particules solides de poussière ou des gouttelettes) dans un gaz raréfié. Ceux-ci peuvent s'appliquer à différents contextes, par exemple un accident de perte de vide dans une enceinte contenant des poussières comme dans [C8], l'étude de la dynamique d'un gaz contenant des impuretés à l'intérieur d'un système micro-électronique (MEMS) dans [C15], le comportement de poussières de comètes [112]. De nombreux modèles de spray pour les mélanges gaz-particules existent (voir par exemple l'article [77] pour une présentation et classification de ces modèles), mais la plupart du temps le gaz (appelé aussi la "phase porteuse" dans les modèles de spray) est décrit par des équations dites fluides, c'est-à-dire portant sur les grandeurs macroscopiques du fluide (densité, quantité de mouvement, énergie . . .). Or ces modèles ne décrivent pas de façon satisfaisante des gaz qui ne sont pas à l'équilibre thermodynamique, comme cela peut être le cas des gaz raréfiés.

On adopte ici une approche à l'échelle mésoscopique, intermédiaire entre l'échelle microscopique et l'échelle macroscopique, pour décrire le gaz. L'évolution de la densité en molécules, en l'absence d'autre espèce ou de force intervenant, est alors modélisée par une équation cinétique avec un opérateur de Boltzmann [40], de Boltzmann linéarisé (autour d'un équilibre Maxwellien), de BGK, ou encore de transport libre (sans second membre) si le libre parcours moyen entre deux collisions est suffisamment grand devant les autres échelles d'espace pour négliger les collisions.

On peut également décrire un mélange (par exemple un mélange gazeux de deux molécules différentes) en introduisant une densité par espèces, l'interaction entre ces espèces étant décrite par des opérateurs de collisions de type Boltzmann ou de BGK bi-espèces (on pourra se référer à [118, 21, 22, 23] pour une présentation de ces modèles), contruits comme pour l'opérateur de collision de Boltzmann à partir des relations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie au niveau microscopique lors d'une collision.

Nous proposons ici des modèles dont le but est de décrire une situation où les particules (correspondant à la phase "dispersée" du spray) sont "macroscopiques" comparées aux molécules (typiquement, d'un rayon d'un micromètre ou plus). L'interaction entre les molécules et les particules semble dans ce contexte plus proche d'une interaction gaz-paroi que d'une interaction microscopique entre molécules. De plus, la cohabitation de plusieurs échelles de temps et d'espace très différentes engendre des difficultés pour la simulation numérique des modèles cinétiques de mélanges gazeux dans ce contexte (cette problématique est aussi présente dans les modèles de plasma, voir [20, 6]).

Notons que d'autres approches ont été développées pour décrire la diffusion de particules dans un gaz : sans être exhaustifs citons celles de Ferrari et Pareschi [87], où la densité en particules est décrite par une équation de Boltzmann linéaire inélastique et le gaz par un équilibre Maxwellien ; et celle de Frezzotti, Ostmo et Ytrhus [112] qui couple un modèle cinétique pour le gaz avec une équation de Vlasov pour les particules.

## 2.2 Un modèle avec opérateurs de collisions

### 2.2.1 Modélisation

Dans l'approche décrite dans cette partie nous considérons deux fonctions de densité  $F := F(t, x, v) \geq 0$  et  $f := f(t, x, v) \geq 0$ , correspondant à la densité en nombre de particules et en molécules respectivement, à l'instant  $t \in \mathbb{R}^+$ , la position  $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$  et à la vitesse  $v \in \mathbb{R}^3$ . Le modèle est constitué du couplage de deux équations de transport avec opérateurs de collisions entre les différentes espèces :

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial t} + v \cdot \nabla_x F = \mathcal{D}(F, f), & \text{(a)} \\ \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = \mathcal{R}(F, f) + \mathcal{C}(f), & \text{(b)} \end{cases} \quad (2.1)$$

$$(t, x, v) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega \times \mathbb{R}^3$$

Dans (2.1),  $\mathcal{C}(f)$  est un opérateur de collision de Boltzmann standard [43] décrivant l'interaction entre molécules, qu'on suppose modélisée par un potentiel dur avec cutt-off. Je renvoie à [134] ou [C8] pour une présentation de l'opérateur de Boltzmann. Il vérifie, comme conséquence de la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie dans le mécanisme collisionnel entre molécules, les relations :

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{C}(f)(w) \begin{pmatrix} 1 \\ w \\ |w|^2 \end{pmatrix} dw = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Nous négligeons ici les collisions entre particules, ce qui est justifié par une analyse dimensionnelle dans [C8] lorsque l'on se place dans des conditions où la fréquence de collisions entre les particules est négligeable devant celle des autres types de collisions. Mais il est aussi possible d'introduire dans (2.1)-(a) un opérateur de collision élastique ou inélastique tels que ceux intervenant dans les modèles de gaz granulaires [8, 10, 41, 135, 36].

Les opérateurs  $\mathcal{D}(F, f)$  et  $\mathcal{R}(F, f)$  décrivent les interactions entre particules et les molécules. Une première possibilité est de considérer les opérateurs de collisions élastiques intervenant dans les mélanges gazeux [42, 118] ; pour ces opérateurs (notés ici  $\mathcal{D}^e(F, f)$  et  $\mathcal{R}^e(F, f)$ ) la masse, la quantité de mouvement ainsi que l'énergie cinétique totale sont préservés

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{D}^e(F, f)(v) dv = 0, \quad \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{R}^e(F, f)(w) dw = 0, \quad (2.3)$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{D}^e(F, f)(v) \begin{pmatrix} v \\ |v|^2 \end{pmatrix} dv + \varepsilon \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{R}^e(F, f)(w) \begin{pmatrix} w \\ |w|^2 \end{pmatrix} dw = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

où  $\varepsilon$  est le rapport de masse entre les deux espèces :

$$\varepsilon := \frac{m_g}{m_p} \quad (2.5)$$

Nous pouvons introduire une entropie (définie pour  $(F, f)$  dans les bons espaces)

$$\mathcal{H}^e(F, f) = \int_{\mathbb{R}^3} F \ln(F) dv + \int_{\mathbb{R}^3} f \ln(f) dw \quad (2.6)$$

dont l'intégrale en espace (ou elle-même lorsque le système est homogène en espace) joue le rôle de fonction de Lyapounov du système. Grâce à ces propriétés et suivant l'approche de [40], j'ai prouvé dans [C8] un résultat d'existence au système (2.1) homogène en espace, lorsque les opérateurs  $\mathcal{D}^e(F, f)$  et  $\mathcal{R}^e(F, f)$  ont des sections de collisions de sphères dures. Si la condition initiale est  $(F^{\text{ini}}, f^{\text{ini}}) \in (L^1((1 + |v|^2)dv) \cap L \log L)^2$  (avec  $L \log L$  l'ensemble des fonctions  $h : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^+$  vérifiant  $\int h |\ln(h)| dv < \infty$ ) et strictement positive p.p., alors il existe une solution  $(F, f) \in (\text{Lip}(\mathbb{R}^+, L^1((1 + |v|^\gamma)dv)) \cap L^\infty(\mathbb{R}^+, L^1((1 + |v|^2)dv) \cap L \log L))^2$ , pour tout  $\gamma \in [0, 1]$ , du système (2.1) homogène en espace, vérifiant des relations de conservation de la masse et de décroissance de l'entropie. Pour obtenir la relation de conservation de l'énergie, on a supposé  $(F^{\text{ini}}, f^{\text{ini}}) \in (L^1((1 + |v|^{2s})dv))$  pour un  $s > 1$ , mais il devrait être possible de se passer de cette hypothèse en adaptant la preuve de [110] ou de [108]. De même la condition de stricte positivité devrait pouvoir être affaiblie en suivant la preuve de [121]. Le principe de la preuve est d'introduire des opérateurs à sections tronqués, qui permettent de construire des suites de solutions fortes pour un problème modifié, positives et vérifiant les relations de conservation de la masse, de l'énergie et de décroissance de l'entropie, et d'en extraire ensuite une sous-suite convergeant faiblement dans  $L^1((1 + |v|)dv)^2$ .

L'autre approche collisionnelle que nous avons développée dans [C8, C10] est basée sur une hypothèse de réflexion diffuse : lors d'une collision entre une molécule et une particule, la densité de probabilité de la vitesse post-collisionnelle relative est donnée par une demi-Maxwellienne à la température de surface de la particule. On suppose cette température fixée et identique pour toutes les particules. De plus, la quantité de mouvement totale est conservée, ce qui permet d'exprimer les vitesses post-collisionnelles d'une particules et d'une molécule,  $v'$  et  $w'$  respectivement, en fonction de  $z := w' - v'$  la vitesse post-collisionnelle relative

$$\begin{cases} v' = \frac{v + \varepsilon w}{1 + \varepsilon} - \frac{\varepsilon}{1 + \varepsilon} z, \\ w' = \frac{v + \varepsilon w}{1 + \varepsilon} + \frac{1}{1 + \varepsilon} z, \end{cases} \quad (2.7)$$

où  $\varepsilon$  est définie par (2.5). La vitesse post-collisionnelle relative  $z$  peut être vue comme une variable aléatoire de densité

$$h_n(v) := \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{\beta}^4}{T_p^2} (n \cdot v) e^{-\frac{\tilde{\beta}^2 |v|^2}{2T_p}} \mathbf{1}_{\{n \cdot v \geq 0\}}, \quad (2.8)$$

avec

$$\tilde{\beta} := \sqrt{\frac{m_g}{k_B}}. \quad (2.9)$$

De plus, on suppose que la section de collision entre les deux espèces est une section de sphère dure, que l'on écrit sous forme  $\sigma_{gp} \varsigma(v - w, n)$ , où  $\sigma_{gp}$  est une constante dépendant des rayons des espèces, et

$$\varsigma(v - w, n) := [n \cdot (v - w)] \mathbf{1}_{\{n \cdot (v - w) \geq 0\}}. \quad (2.10)$$

Sous ces hypothèses, nous avons établi dans [C8] les expressions des opérateurs  $\mathcal{D}$

et  $\mathcal{R}$

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(F, f)(v) = \sigma_{gp} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{S}} & \left[ F(v')f(w')e^{\frac{\tilde{\beta}^2|v'-w'|^2}{2T_p}} - F(v)f(w)e^{\frac{\tilde{\beta}^2|v-w|^2}{2T_p}} \right] \\ & \times e^{-\frac{\tilde{\beta}^2|v-w|^2}{2T_p}} \zeta(v-w, n) h_n(z) dn dz dw \end{aligned} \quad (2.11)$$

et

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(F, f)(w) = \sigma_{gp} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{S}} & \left[ F(v')f(w')e^{\frac{\tilde{\beta}^2|v'-w'|^2}{2T_p}} - F(v)f(w)e^{\frac{\tilde{\beta}^2|v-w|^2}{2T_p}} \right] \\ & \times e^{-\frac{\tilde{\beta}^2|v-w|^2}{2T_p}} \zeta(v-w, n) h_n(z) dn dz dv \end{aligned} \quad (2.12)$$

avec  $(v', w')$  données par (2.7), ainsi que leurs formes faibles :

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{D}(F, f)(v) \varphi(v) dv = \sigma_{gp} \iiint \int [\varphi(v') - \varphi(v)] F(v) f(w) \zeta(v-w, n) h_n(z) dz dn dw dv \quad (2.13)$$

et

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{R}(F, f)(w) \psi(w) dw = \sigma_{gp} \iiint \int [\psi(w') - \psi(w)] F(v) f(w) \zeta(v-w, n) h_n(z) dz dn dv dw \quad (2.14)$$

pour des fonctions test  $\varphi, \psi$ . Le passage de la forme faible à la forme forte est obtenue en considérant le changement de variable involutif  $(v, w, z) \rightarrow (v', w', w-v)$ , puis  $n \rightarrow -n$  dans le terme de gain de l'opérateur. On peut également établir les expressions suivantes des formes faibles.

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{D}(F, f)(v) \varphi(v) dv = \frac{-\sigma_{gp}}{2} \iiint \int & \zeta(v-w, n) h_n(z) e^{-\frac{\tilde{\beta}^2|v-w|^2}{2T_p}} \\ & \times [\varphi(v') - \varphi(v)] \left[ F(v')f(w')e^{\frac{\tilde{\beta}^2|v'-w'|^2}{2T_p}} - F(v)f(w)e^{\frac{\tilde{\beta}^2|v-w|^2}{2T_p}} \right] dz dn dw dv \end{aligned} \quad (2.15)$$

et

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{R}(F, f)(v) \psi(v) dv = \frac{-\sigma_{gp}}{2} \iiint \int & \zeta(v-w, n) h_n(z) e^{-\frac{\tilde{\beta}^2|v-w|^2}{2T_p}} \\ & \times [\psi(w') - \psi(w)] \left[ F(v')f(w')e^{\frac{\tilde{\beta}^2|v'-w'|^2}{2T_p}} - F(v)f(w)e^{\frac{\tilde{\beta}^2|v-w|^2}{2T_p}} \right] dz dn dv dw \end{aligned} \quad (2.16)$$

On déduit en particulier des formes (2.13) et (2.14) et du mécanisme collisionnel (2.7) les relations :

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{D}(F, f)(v) dv = 0, \quad \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{R}(F, f)(w) dw = 0, \\ \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{D}(F, f)(v) dv + \varepsilon \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{R}(F, f)(w) dw = 0, \end{aligned} \quad (2.17)$$

Notons qu'énergie cinétique n'étant pas conservée lors d'une collision, la seconde relation de (2.4) n'est plus vérifiée. Il n'est pas non plus possible *a priori* d'obtenir une relation de dissipation de l'énergie comme c'est le cas pour l'opérateur de Boltzmann inélastique des modèles granulaires [135].

### 2.2.2 Dissipation d'entropie et états d'équilibre

Pour l'opérateur de Boltzmann classique  $\mathcal{C}$ , le Théorème H de Boltzmann [43] exprime que la fonction de dissipation de l'entropie est négative

$$\forall x \in \mathbb{R}^3, \quad \forall t \in \mathbb{R}, \quad \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{C}(f) \ln(f) dw \leq 0$$

et caractérise les fonctions tels que  $\mathcal{C}(f) = 0$  :

$$\mathcal{C}(f) = 0 \Leftrightarrow f = \mathcal{M}[n_g, u_g, \theta_g], \quad (2.18)$$

où  $\mathcal{M}[n_g, u_g, \theta_g]$  est la Maxwellienne locale associée aux grandeurs macroscopiques de  $f$  :

$$\mathcal{M}[n_g, u_g, \theta_g](t, x, w) = \frac{n_g \tilde{\beta}^3}{(2\pi\theta_g)^{3/2}} e^{-\frac{\tilde{\beta}^2 |w - u_g|^2}{2\theta_g}} \quad (2.19)$$

avec

$$n_g(t, x) := \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, w) dw, \quad u_g(t, x) := \frac{1}{n_g(t, x)} \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, w) w dw,$$

$$\theta_g(t, x) := \frac{\tilde{\beta}^2}{3n_g(t, x)} \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, w) |w - u_g(t, x)|^2 dw.$$

Notons que l'entropie mathématique  $\mathcal{H}(f) = \int_{\mathbb{R}^3} f \ln(f) dv$  correspond à l'opposée de l'entropie physique (qui elle, augmente).

Pour les opérateurs à réflexions diffuses (2.11) et (2.12), l'application  $(v, w) \mapsto (v', w')$  n'est pas involutive, ce qui ne permet pas de montrer que la fonction de dissipation d'entropie pour les opérateurs de collisions élastiques  $D^e(F, f) := \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{R}^e(F, f) \ln(f) dw + \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{D}^e(F, f) \ln(F) dv$  est négative pour les opérateurs de réflexion diffuse. En revanche, en posant

$$\begin{aligned} D^d(F, f)(t, x) &:= \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{R}(F, f)(w) \ln \left( f(w) e^{\frac{\tilde{\beta}^2}{2T_p} (1+\varepsilon) |w|^2} \right) dw \\ &+ \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{D}(F, f)(v) \ln \left( F(v) e^{\frac{\tilde{\beta}^2}{2T_p} \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon} |v|^2} \right) dv, \end{aligned} \quad (2.20)$$

on peut écrire, grâce à (2.15) et (2.16),  $D^d(F, f)$  sous la forme

$$\begin{aligned} D^d(F, f)(t, x) &= -\frac{\sigma_{gp}}{2} \iiint \zeta(v - w, n) h_n(z) e^{-\frac{\tilde{\beta}^2 |v - w|^2}{2T_p}} \\ &\times \left[ \ln \left( F(v') f(w') e^{\frac{\tilde{\beta}^2}{2T_p} \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon} (|v'|^2 + \varepsilon |w'|^2)} \right) - \ln \left( F(v) f(w) e^{\frac{\tilde{\beta}^2}{2T_p} \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon} (|v|^2 + \varepsilon |w|^2)} \right) \right] \\ &\times \left[ F(v') f(w') e^{\frac{\tilde{\beta}^2 |v' - w'|^2}{2T_p}} - F(v) f(w) e^{\frac{\tilde{\beta}^2 |v - w|^2}{2T_p}} \right] dz dn dw dv \end{aligned} \quad (2.21)$$

puis, grâce à (2.2) et à la relation

$$|v' - w'|^2 - |v - w|^2 = \frac{1 + \varepsilon}{\varepsilon} (|v'|^2 + \varepsilon |w'|^2 - |v|^2 - \varepsilon |w|^2), \quad (2.22)$$

montrée à partir de (2.7), sous la forme

$$\begin{aligned}
D^d(F, f)(t, x) &= -\frac{\sigma_{gp}}{2} \iiint \varsigma(v-w, n) h_n(z) e^{-\frac{\beta^2}{2T_p} \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon} (|v|^2 + \varepsilon|w|^2)} \\
&\times \left[ \ln \left( F(v') f(w') e^{\frac{\beta^2}{2T_p} \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon} (|v'|^2 + \varepsilon|w'|^2)} \right) - \ln \left( F(v) f(w) e^{\frac{\beta^2}{2T_p} \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon} (|v|^2 + \varepsilon|w|^2)} \right) \right] \\
&\times \left[ F(v') f(w') e^{\frac{\beta^2}{2T_p} \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon} (|v'|^2 + \varepsilon|w'|^2)} - F(v) f(w) e^{\frac{\beta^2}{2T_p} \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon} (|v|^2 + \varepsilon|w|^2)} \right] dz dn dw dv
\end{aligned} \tag{2.23}$$

La relation (2.23) ainsi que la croissance de  $\ln : (y_1 - y_2)(\ln(y_1) - \ln(y_2)) \geq 0$  pour  $(y_1, y_2) \in \mathbb{R}^{+*} \times \mathbb{R}^{+*}$ , permet de montrer que la production d'entropie est négative :

$$D^d(F, f)(t, x) \leq 0. \tag{2.24}$$

Nous pouvons de plus caractériser les fonctions  $F$  et  $f$  telles que  $D^d(F, f)(t, x) = 0$ , en prouvant le Lemme suivant.

**Lemme 2.1.** *Soient  $F = F(v)$  et  $f = f(w)$  deux fonctions régulières,  $c \in \mathbb{R}$ , telles que*

$$\forall (v, w, z) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, \quad F(v') f(w') e^{c(|v'|^2 + \varepsilon|w'|^2)} = F(v) f(w) e^{c(|v|^2 + \varepsilon|w|^2)}, \tag{2.25}$$

où  $v'$  et  $w'$  sont données par (2.7). Alors il existe  $u \in \mathbb{R}^3$ ,  $n_1, n_2$  tels que

$$\begin{cases} F(v) = n_1 e^{-c|v-u|^2} \\ f(w) = n_2 e^{-c\varepsilon|w-u|^2}. \end{cases} \tag{2.26}$$

*Démonstration.* La preuve suit la même idée que dans [134], en l'adaptant au mécanisme collisionnel que nous considérons ici. En introduisant  $p = v + \varepsilon w$  et en utilisant (2.7), on peut écrire que  $|v'|^2 + \varepsilon|w'|^2 = \frac{1}{1+\varepsilon} (|p|^2 + \varepsilon|z|^2)$ . De plus, comme  $\int_{\mathbb{S}} \int_{\mathbb{R}^3} h_n(z) dn dz = 1$ , on obtient

$$\begin{aligned}
F(v) f(w) e^{c(|v|^2 + \varepsilon|w|^2)} &= \int_{\mathbb{S}} \int_{\mathbb{R}^3} F(v) f(w) e^{c(|v|^2 + \varepsilon|w|^2)} h_n(z) dn dz \\
&= \int_{\mathbb{S}} \int_{\mathbb{R}^3} F \left( \frac{p - \varepsilon z}{1 + \varepsilon} \right) f \left( \frac{p + z}{1 + \varepsilon} \right) e^{\frac{c(\varepsilon|z|^2 + |p|^2)}{1+\varepsilon}} h_n(z) dn dz
\end{aligned}$$

ce qui montre que

$$\Psi(p) := F(v) f(w) e^{c(|v|^2 + \varepsilon|w|^2)}$$

est une fonction (régulière) du seul vecteur  $p$ . Ensuite, en appelant  $E = |v|^2 + \varepsilon|w|^2$ , on obtient

$$\ln F(v) + \ln f(w) = \ln \Psi(p) - cE,$$

et ainsi

$$\begin{cases} \nabla_v \ln F(v) = \Psi'(p) - 2cv \\ \nabla_w \ln f(w) = \varepsilon \Psi'(p) - 2c\varepsilon w. \end{cases} \tag{2.27}$$

Le vecteur  $\varepsilon \nabla_v \ln F(v) - \nabla_w \ln f(w)$  est donc colinéaire à  $v - w$ , et on peut en conclure qu'il existe  $u \in \mathbb{R}^3$  tel que

$$\begin{cases} \nabla_v \ln F(v) = -2c(v - u) \\ \nabla_w \ln f(w) = -2c\varepsilon(w - u). \end{cases} \tag{2.28}$$

□

**Théorème 2.1.** Soit  $(t, x) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^3$  et  $(F, f)$  un couple de fonctions positives telles que les intégrales  $\mathcal{D}(F, f)$ ,  $\mathcal{R}(F, f)$  et  $D^d(F, f)$  soient bien définies. Alors les propriétés suivantes sont équivalentes :

(i) Pour tous  $(v, w) \in \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$

$$\mathcal{D}(F, f)(t, x, v) = 0 \quad \text{et} \quad \mathcal{R}(F, f)(t, x, w) = 0. \quad (2.29)$$

(ii) La production d'entropie est nulle :  $D^d(F, f)(t, x) = 0$ .

(iii) Il existe  $u^{eq} := u^{eq}(t, x)$ ,  $n_g := n_g(t, x)$ ,  $n_p := n_p(t, x)$  tels que

$$\begin{cases} f(w) = n_g e^{-\frac{\tilde{\beta}^2}{2T_p}(1+\varepsilon)|w-u^{eq}|^2} \\ F(v) = n_p e^{-\frac{\tilde{\beta}^2}{2T_p} \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon}|v-u^{eq}|^2}. \end{cases} \quad (2.30)$$

*Démonstration.* Pour (ii)  $\Rightarrow$  (iii), on utilise le Lemme 2.1 avec  $c = \frac{\tilde{\beta}^2}{2T_p} \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon}$ . L'implication (iii)  $\Rightarrow$  (ii) utilise la réciproque du Lemme 2.1, qui repose uniquement sur la relation de conservation de la quantité de mouvement  $v' + \varepsilon w' = v + \varepsilon w$ . Enfin on monte (iii)  $\Rightarrow$  (i) grâce aux expressions (2.11) et (2.12) des opérateurs, de la relation (2.22) et de la conservation de la quantité de mouvement.  $\square$

Notons que dans le cas des modèles de gaz granulaire une fonction de dissipation de l'entropie a été introduite dans [62], mais sa négativité n'a pu être prouvée que numériquement.

### 2.2.3 Asymptotique à faible rapport de masse

L'expression de la vitesse post-collisionnelle des particules  $v'$  dans (2.7) montre que  $v' - v$  est de l'ordre de  $\varepsilon$  : une particule est peu déviée lors d'une collision avec une molécule.

Ce phénomène de collisions rasantes intervient dans d'autres contextes : dans le cas d'un opérateur de Boltzmann sans cutt-off (troncature angulaire), les collisions rasantes (pour des angles  $\theta$  petits) induisent une singularité dans le noyau de collision. Dans [76], L. Desvillettes dérive l'asymptotique de Fokker-Planck-Landau à partir de Boltzmann sans cutt-off en effectuant un développement asymptotique en  $\theta$ . Le modèle asymptotique avec opérateur de Fokker-Planck-Landau a également été obtenu à partir de Boltzmann, celle fois pour un potentiel Coulombien (modélisant des collisions dans un plasma) par P. Degond et B. Lucquin dans [64]. Ces deux contextes ont ensuite été unifiés par C. Villani et R. Alexandre dans [1]. Cependant la structure du modèle asymptotique que nous obtenons par un développement limité en  $\varepsilon$  est très différente : dans l'asymptotique Boltzmann-Fokker-Planck, le terme d'ordre 1 du petit paramètre se révèle nul après intégration, ce qui n'est pas le cas dans notre asymptotique.

Par ailleurs, l'asymptotique à faible rapport de masse a également été investiguée dans [65, 66, 46] par P. Degond et B. Lucquin dans le contexte d'un plasma (le rapport de masse faible étant là celui entre les ions et les électrons). Après adimensionnement, les auteurs effectuent un développement de Chapman-Enskog sur les densités des deux espèces, conduisant à un couplage entre une équation cinétique et une équation de Navier-Stokes incompressible ou un couple d'équations de Navier-Stokes compressible, suivant l'échelle de temps considérée.

Afin de mettre en évidence la différence entre les vitesses de relaxation vers l'équilibre iso-therme et iso-vitesse de la poussière et du gaz, phénomène déjà décrit par Grad [96] puis par Degond et Lucquin [65, 66, 46] il est intéressant de travailler sur des quantités adimensionnées. Quelques points diffèrent dans les hypothèses d'adimensionnement que nous avons faites, comme la différence d'ordre de grandeur entre les densités des espèces ou des sections de collisions.

Pour introduire l'ordre de grandeur des vitesses, deux possibilités se présentent : adimensionner celle-ci par le même ordre de grandeur  $V^\circ$  pour les deux espèces, ou par des ordres de grandeur provenant des vitesses thermiques. Si on suppose que les deux espèces sont à la même température comme dans [65], leurs vitesses thermiques  $V_p^b$  (pour les particules) et  $V_g^b$  (pour le gaz) sont alors liées par la relation  $V_p^b = \sqrt{\varepsilon}V_g^b$ . Pour les adimensionnements du temps et de l'espace, plusieurs temps et longueurs caractéristiques peuvent aussi être envisagés, voir [C8] pour une discussion détaillée. Dans la situation envisagée dans [C8, C10], nous nous retrouvons avec un système pouvant se ré-écrire (en notant de la même façon les variables adimensionnées et en renommant les opérateurs pour faire apparaître la dépendance en  $\varepsilon$ )

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial t} + v \cdot \nabla_x F = \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{D}_\varepsilon(F, f), & \text{(a)} \\ \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = \mathcal{R}_\varepsilon(F, f) + \mathcal{C}(f), & \text{(b)} \\ (t, x, v) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega \times \mathbb{R}^3 \end{cases} \quad (2.31)$$

Afin de dériver le modèle asymptotique, nous sommes partis de la forme faible de l'opérateur  $\mathcal{D}_\varepsilon(F, f)$ . Dans le cas d'un adimensionnement des vitesses au même ordre de grandeur, un développement asymptotique au premier ordre en  $\varepsilon$  conduit à :

$$\mathcal{D}_\varepsilon(F, f) = -\varepsilon \nabla_v \cdot (a(f)F) + O(\varepsilon^2),$$

avec

$$a(f)(t, x, v) = \pi \sigma_{gp} \int_{\mathbb{R}^3} \left( |w - v| + \frac{\sqrt{2\pi T_p}}{3\tilde{\beta}} \right) (w - v) f(t, x, w) dw \quad (2.32)$$

Ce terme  $a$  peut s'interpréter (à la masse près) comme une force de trainée exercée par le gaz sur les particules, et on peut introduire une équation de Vlasov

$$\frac{\partial F}{\partial t} + v \cdot \nabla_x F + \nabla_v \cdot (a(f)F) = 0 \quad (2.33)$$

modélisant asymptotiquement l'évolution de la densité de particules. Ce modèle asymptotique est notamment intéressant à des fins de simulation numérique, l'opérateur  $\mathcal{D}(F, f)$  étant très coûteux à discrétiser [C8].

Le premier terme  $\pi \int_{\mathbb{R}^3} |w - v| (w - v) f(t, x, w) dw$  de l'expression (2.32) (qui correspond aussi à ce que l'on obtient si l'on modélise les collisions gaz-particules avec des réflexions spéculaires au lieu de réflexions diffuses) présente des similarités avec des modèles existants de force de trainée, comme par exemple la formule d'Otterman et Levinet [113] (pour un modèle fluide diphasique), ou celle de [59] qui propose une correction de la force de trainée de Stokes permettant d'étendre la

validité de celle-ci lorsque le nombre de Knudsen augmente. De plus notons qu'à la différence des modèles de [113] ou [59] aucun terme ni constante n'est ici empirique.

La dérivation formelle du modèle asymptotique a été justifiée de façon rigoureuse dans un cadre particulier dans [C14], où nous prouvons la convergence des solutions  $(F_\varepsilon, f_\varepsilon)$  du couplage de type Boltzmann-Boltzmann, homogène en espace, muni des opérateurs de collisions élastiques et pour un adimensionnement particulier, vers un couple de solution du modèle asymptotique Vlasov-Boltzmann lorsque  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Notre preuve est basée sur une nouvelle variante de l'inégalité de Povzner [119], spécialement adaptée au cas de particules de masses très différentes. L'une des difficultés du passage à la limite était l'absence d'estimation uniforme en  $\varepsilon$  du terme d'entropie pour la densité  $F_\varepsilon$ .

Nous nous sommes aussi intéressées à la discrétisation des modèles (2.1) et (2.33); j'ai ainsi développé (à partir d'un code existant au CEA) un code 3d3v basé sur une méthode DSMC (Direct Simulation Monte-Carlo) de type Nanbu [19] et sur une méthode PIC (Particles in Cell) [50] pour le modèle asymptotique. Des exemples de simulations peuvent être trouvés dans [C8, C10].

Notons que l'on peut également considérer des limites hydrodynamiques du modèle (2.31) en introduisant  $\frac{1}{\delta}$  (avec  $\delta$  lié au nombre de Knudsen du gaz) devant l'opérateur  $\mathcal{C}(f)$ . L'asymptotique vers Vlasov-Euler lorsque  $\varepsilon \rightarrow 0$  et  $\delta \rightarrow 0$  a été effectué de façon formelle dans [78] par L. Desvillettes, F. Golse et V. Ricci; les asymptotiques vers des systèmes Vlasov-Navier-Stokes et Vlasov-Stokes ont aussi été étudiées dans [13] et [14] par les mêmes auteurs ainsi qu'E. Bernard.

## 2.2.4 Perspectives

### 2.2.4.1 Étude du modèle inélastique

Les propriétés des opérateurs de collisions avec réflexion diffuse, ainsi que l'existence d'une entropie

$$\mathcal{H}(F, f) = \int_{\mathbb{R}^3} f(w) \ln \left( f(w) e^{\frac{\beta^2}{2T_p}(1+\varepsilon)|w|^2} \right) dw + \int_{\mathbb{R}^3} F(v) \ln \left( F(v) e^{\frac{\beta^2}{2T_p} \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon} |v|^2} \right) dv \quad (2.34)$$

laissent espérer, même si l'énergie cinétique n'est pas conservée, pouvoir démontrer l'existence de solutions au problème homogène en espace (2.1), de façon analogue à la preuve pour le modèle élastique. C'est l'objet d'un travail en cours. De plus, on pourrait s'intéresser à justifier de façon rigoureuse, comme dans [C14], le développement asymptotique par rapport à  $\varepsilon$  effectué de façon formelle dans [C8].

Par ailleurs, la décroissance de l'entropie donnent envie d'étudier l'existence d'états d'équilibre ainsi que l'éventuelle convergence des solutions vers ceux-ci en temps long. La convergence vers l'équilibre de solutions d'équations cinétiques est un point largement étudié, que cela soit pour l'équation de Boltzmann - conjecturée par Cercignani [134]- ainsi que pour d'autres modèles : dans le contexte de mélanges gazeux [104, 30] ou de l'équation de Fokker-Planck [38] par exemple. La difficulté majeure ici réside dans l'inexistence de relation de conservation ou de décroissance de l'énergie.

D'autres perspectives sont envisageables, comme l'établissement d'une asymptotique diffusive, à partir d'un développement asymptotique au second ordre en  $\varepsilon$  et/ou d'un adimensionnement à d'autres échelles de temps et d'espace.

#### 2.2.4.2 Un modèle préservant l'énergie cinétique

Une amélioration naturelle du modèle décrit dans la section 2.2 est de pouvoir obtenir un modèle préservant l'énergie totale du système. Pour cela, on peut penser à introduire la température comme variable dans la fonction  $F$ , comme cela est fait pour l'énergie interne pour les gaz polyatomiques ou réactifs [26, 80], et de modifier la température d'une particule après collision à partir de la relation de conservation de l'énergie

$$T' = T + \frac{1}{2c_p} [|v|^2 + \varepsilon|w|^2 - |v'|^2 - \varepsilon|w'|^2], \quad (2.35)$$

les expressions de  $v'$  et  $w'$  étant encore données par (2.7). On peut alors établir des opérateurs de collisions associés à ce mécanisme collisionnel, dont les formes faibles sont très proches de celles (2.13) et (2.14) obtenues pour les opérateurs (2.11) et (2.12). En collaboration avec L. Desvillettes, nous avons ensuite établi une asymptotique formelle vers un système Vlasov-Euler de fluide compressible lorsque le rapport de masse  $\varepsilon$  et le nombre de Knudsen du gaz tendent vers 0. Nous retrouvons dans le terme de trainée de ce modèle un terme déjà présent dans le travail [78], dans lequel les auteurs avaient dérivé une asymptotique Vlasov-Euler à partir du modèle de la partie 2.2.3. Un autre terme apparaît, provenant du développement limité de  $T' - T$ , et correspondant à un terme d'échange de température entre les deux espèces.

## 2.3 Un modèle avec domaine à frontière mouvante

### 2.3.1 Modélisation et existence de solutions

Dans [C15], le système gaz-particules est cette fois vu comme un gaz évoluant en domaine mouvant. Les particules sont alors traitées individuellement au lieu d'être considérées au niveau mésoscopique comme dans le modèle de la section 2.2. Pour simplifier, nous avons supposé que le gaz était suffisamment raréfié pour être considéré comme un gaz de Knudsen (pour lequel le libre parcours moyen entre deux collisions est suffisamment grand devant les autres échelles d'espace pour négliger les collisions), mais le modèle pourrait être enrichi par l'ajout d'un opérateur BGK ou de Boltzmann. On s'intéresse donc à une équation de transport libre (en dimension  $d$ ) dans un domaine d'espace  $D$  pour la densité de molécules  $f := f(t, x, v)$ ,  $(t, x, v) \in \mathbb{R}^+ \times D \times \mathbb{R}^d$ . Les particules, dont le mouvement est fixé, sont décrites par leurs centres  $\xi_i = \xi_i(t)$  et éventuellement une matrice de rotation  $A_i = A_i(t)$ , pour  $1 \leq i \leq N_d$ . On note  $B_i(t)$  la région occupée par la particule indiquée par  $i$  (pour une particule sphérique de rayon  $r$ ,  $B_i(t) = \{x \in \mathbb{R}^d, \|x - \xi_i(t)\| \leq r\}$ ), mais on peut aussi considérer des formes plus générales, comme des ellipsoïdes. On introduit le temps  $T_1$  garantissant une non-rencontre des particules

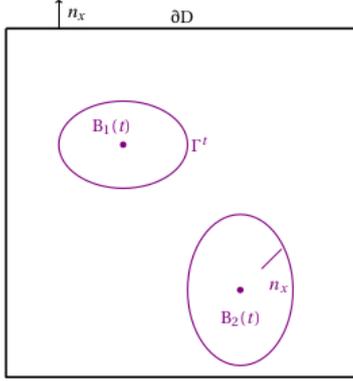
$$T_1 = \sup\{t \geq 0 : \forall s \in [0, t], B_j(s) \cap B_i(s) = \emptyset \text{ pour tous } j, i = 1, \dots, N_d, j \neq i\} \quad (2.36)$$

et le temps  $T_2$  garantissant la non-sortie du domaine des particules :

$$T_2 = \sup\{t \geq 0 : \forall s \in [0, t[, B_i(s) \cap \partial D = \emptyset \text{ pour tout } i = 1, \dots, N_d\}. \quad (2.37)$$

Pour ne pas avoir à s'occuper des collisions entre particules ou avec le bord du domaine, on s'intéressera au problème pour  $t \in [0, T[$ , avec  $T \leq \min(T_1, T_2)$ .

Pour  $t \in [0, T[$  on définit la région  $\Omega^t$  occupée par le gaz à l'instant  $t$  par



$$\Omega^t = D \setminus \bigcup_{i=1}^{N_d} B_i(t),$$

dont la frontière est  $\partial\Omega^t = \partial D \cup \Gamma^t$ , avec

$$\Gamma^t = \bigcup_{i=1}^{N_d} \partial B_i(t)$$

(voir Figure ci-contre) où  $\Omega^t \subset \mathbb{R}^d$  est le domaine mouvant, dont les frontières sont constituées des bords du domaine dans lequel évolue le mélange ainsi que des bords de particules.

On note  $c(t, x)$  la vitesse de la frontière au point  $x \in \partial\Omega^t$ . Si le domaine  $D$  est fixe on a  $c(t, x) = 0$  pour  $x \in \partial D$ ; et on peut choisir une condition de réflexion spéculaire ou diffuse, ou encore d'absorption sur  $\partial D$ . Comme dans le modèle de la partie 2.2, on suppose que l'interaction entre les molécules et les particules est décrite par une réflexion diffuse à la surface de la particule, et que toutes les particules ont la même température  $T_p > 0$ , uniforme sur la surface. Ces hypothèses se traduisent ici dans la condition sur les bords des particules

$$f(t, x, v) = \int_{\{(w-c(t,x)) \cdot n_x \geq 0\}} k(x, v-c(t,x), w-c(t,x)) f(t, x, w) dw \mathbb{1}_{\{(v-c(t,x)) \cdot n_x < 0\}}, \quad (2.38)$$

pour  $x \in \partial\Omega^t$ , où  $n_x \in \mathbb{S}^{d-1}$  est le vecteur normal sortant à la frontière en  $x$ . Pour  $x \in \Gamma^t$  (le bord des particules),  $k$  sera un noyau de réflexion diffuse  $k_d$  [130]

$$k_d(x, v, w) = \sqrt{\frac{2\pi}{T_p}} \mathcal{M}_{T_p}(v) w \cdot n_x,$$

où  $\mathcal{M}_{T_p}$  est la Maxwellienne centrée de température  $T_p$  :  $\mathcal{M}_{T_p}(s) = \frac{1}{(2\pi T_p)^{d/2}} e^{-\frac{|s|^2}{2T_p}}$ .

La masse de la particule, ainsi que la constante de Boltzmann  $k_B$  sont ici prises égales à 1. Ce noyau de réflexion diffuse possède les propriétés suivantes :  $\forall x \in \Gamma^t$

$$\int_{\{v \cdot n_x < 0\}} k_d(x, v, w) \frac{|v \cdot n_x|}{w \cdot n_x} dv = 1 \quad \text{et} \quad \int_{\{w \cdot n_x \geq 0\}} k_d(x, v, w) \mathcal{M}_{T_p}(w) dw = \mathcal{M}_{T_p}(v). \quad (2.39)$$

Sur  $\partial D$ , le noyau  $k$  peut être un noyau de réflexion spéculaire  $k_s(x, v, w) = \delta(w - v + 2(v \cdot n_x)n_x)$  ou de réflexion diffuse.

**Remarque 2.1.** Le noyau  $k_d(x, v, w)$  a bien sûr un lien avec  $h_n$  la densité de probabilité de la vitesse post-collisionnelle introduite en (2.8) pour la dimension  $d = 3$  :

$$k_d(x, v, w) \mathbb{1}_{\{w \cdot n_x \geq 0\}} M_{T_p}(w) = h_{n_x}(w) M_{T_p}(v). \quad (2.40)$$

La première relation de (2.39) justifie la constante dans  $k_d(x, v, w)$ , et la seconde est équivalente à la relation  $\int_{\mathbb{R}^3} h_n(v) dv = 1$ .

On obtient finalement le modèle suivant

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = 0 \quad (t, x, v) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega^t \times \mathbb{R}^d, \quad (2.41)$$

muni de la condition initiale

$$f(0, x, v) = f^{\text{in}}(x, v) \mathbb{1}_{\{\Omega^0 \times \mathbb{R}^d\}}(x, v) \quad (2.42)$$

et de la condition aux limites (2.38).

Nous prouvons ensuite le résultat d'existence de la solution au problème (2.41)-(2.42)-(2.38).

**Théorème 2.2.** On suppose  $c \in L^\infty([0, T[ \times \Omega)$ ,  $f^{\text{in}} \geq 0$  p.p., telle que  $e^{\frac{|v|^2}{T_p}} f^{\text{in}} \in L^\infty(\Omega^0 \times \mathbb{R}^d)$ . Alors il existe une solution faible positive  $f \in L^\infty((0, T) \times \Omega^t \times \mathbb{R}^d)$  au problème aux limites (2.41)-(2.42)-(2.38).

La stratégie de la preuve est la suivante (adaptée de [2])

- ▷ On introduit le temps  $\tau_{\Omega^t}(x, v)$  d'arrivée sur le bord lorsque l'on remonte la droite caractéristique de la trajectoire d'une molécule à partir de  $x \in \Omega^t$  dans la direction  $v \in \mathbb{R}^d$  :

$$\tau_{\Omega^t}(x, v) = \begin{cases} +\infty & \text{si } \{\theta > 0 : x - \theta v \in \Gamma^{t-\theta} \cup \partial D\} = \emptyset \\ \inf\{\theta > 0 : x - \theta v \in \Gamma^{t-\theta} \cup \partial D\} & \text{sinon.} \end{cases}$$

Celui-ci nous permet de justifier que le problème auxiliaire (2.41)-(2.42) avec une condition aux limites indépendante de  $f$

$$f(t, x, v) = \Phi(t, x, v) \mathbb{1}_{\{(v-c(t,x)) \cdot n_x < 0\}}, \quad \text{pour } x \in \partial \Omega^t \quad (2.43)$$

où  $\Phi \in L^\infty((0, T) \times (\partial \Omega^t \times \mathbb{R}^d))$ , a une unique solution, vérifiant

$$\|f\|_{L^\infty((0, T) \times \Omega^t \times \mathbb{R}^d)} \leq \max\{\|f^{\text{in}}\|_{L^\infty(\Omega^0 \times \mathbb{R}^d)}, \|\Phi\|_{L^\infty((0, T) \times (\partial \Omega^t \times \mathbb{R}^d))}\}.$$

- ▷ On introduit une suite  $\{f_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ , avec  $f_0 = 0$ , et pour  $n \geq 1$ ,  $f_n$  est solution du problème (2.41)-(2.42)-(2.43) avec

$$\Phi(t, x, v) = \int_{\{(w-c(t,x)) \cdot n_x \geq 0\}} k(x, v - c(t, x), w - c(t, x)) f_{n-1}(t, x, w) dw,$$

et on montre que cette suite est croissante et vérifie

$$0 \leq f_n(t, x, v) e^{\frac{|v-c(t,x)|^2}{2T_p}} \leq \|f^{\text{in}}\|_{L^\infty(\Omega^0 \times \mathbb{R}^d)} e^{\frac{\|c\|_\infty^2}{T_p}},$$

et converge donc simplement vers une solution faible de (2.41)-(2.42)-(2.38).

**Remarque 2.2.** Le Lemme de Darrozès-Guiraud [60, 130] peut-être généralisé dans le cas d'une paroi mobile : pour toute fonction  $G$  strictement convexe, si  $f$  vérifie (2.38), alors

$$\forall x \in \partial \Omega^t, \quad - \int_{\mathbb{R}^d} [v - c(t, x)] \cdot n_x M_{T_p}(v - c(t, x)) G\left(\frac{f}{M_{T_p}(\cdot - c(t, x))}\right)(v) dv \leq 0.$$

**Comparaison avec le modèle de la section 2.2** L'absence de la modélisation des collisions entre molécules du gaz dans le modèle (2.41)-(2.42)-(2.38) n'est qu'un détail puisqu'il est possible d'ajouter un opérateur de collisions de Boltzmann dans (2.41). La première vraie différence entre les modèles (2.1) (avec les opérateurs (2.11) et (2.12)) et (2.41)-(2.42)-(2.38) est l'absence de rétroaction du gaz sur les particules dans le second modèle. Cependant il me semble possible de prendre en compte celle-ci dans le modèle. Une autre différence est le caractère local du modèle (2.41)-(2.42)-(2.38) : le noyau  $k_d$  (2.40) dépend de  $x$  à travers  $n_x$ , tandis que dans le vecteur  $n$  intervenant dans (2.12) est intégré sur  $\mathbb{S}^2$ . Numériquement, cela se traduit (avec la méthode mise en œuvre dans 2.3.2) par un coût plus important (on détermine l'endroit de l'impact entre la molécule et la particule pour calculer  $n_x$ , tandis que ce vecteur  $n$  est tiré aléatoirement dans  $\{n \in \mathbb{S}^2, (w - v) \cdot n \geq 0\}$  dans le cas de la discrétisation de  $\mathcal{R}(F, f)$  (2.12)), mais également une plus grande précision de l'évolution de la densité du gaz dans les simulations numériques.

### 2.3.2 Simulations numériques

Nous avons réalisé des simulations numériques 2d-2v, pour des particules sphériques et en translation ou en forme d'ellipse et possédant une vitesse de rotation. Le code que j'ai construit est basé sur une méthode particulière, avec une implémentation probabiliste de la condition de réflexion diffuse mais une détermination non probabiliste des molécules interagissant avec les particules et des positions de l'interaction (contrairement aux méthodes DSMC, où le traitement des collisions est non-local au sein d'une cellule). Les densités et températures sont reconstruites à partir de fonctions  $B_3$ -splines. Deux stratégies peuvent être adoptées : soit une détermination exacte de l'intersection entre une particule et chaque molécule interagissant avec celle-ci, soit un splitting entre l'advection et le traitement de la condition aux limites. Cette dernière stratégie, qui donne des résultats similaires à la première pour des particules sphériques, permet de considérer facilement des particules en forme d'ellipse. Plusieurs scénarios sont considérés. La figure 2.1 (issue de [C15], auquel on renvoie pour les détails) présente l'évolution de la densité et de la température du gaz en présence de deux particules de vitesses de translation de directions opposées (suivant l'axe de  $y$ ), avec une vitesse macroscopique du gaz perpendiculaire à celles-ci, des réflexions spéculaires sur les côtés bas et haut de la boîte, et des conditions d'absorption pour les côtés gauches et droits. La figure 2.2 présente deux extraits de simulations pour des particules en forme d'ellipse : dans un cas une particule ne possédant qu'une vitesse de rotation, dans l'autre deux particules avec uniquement des vitesses de translation. Les caractéristiques du gaz et des conditions aux limites sur  $\partial D$  sont similaires à celles de la Figure 2.1.

Nous vérifions également numériquement dans [C15] que dans la situation d'une particule immobile, le gaz se thermalise et la température cinétique de celui-ci évolue pour tendre vers la température de surface de la particule, ce qui est cohérent avec le résultat théorique de [3].

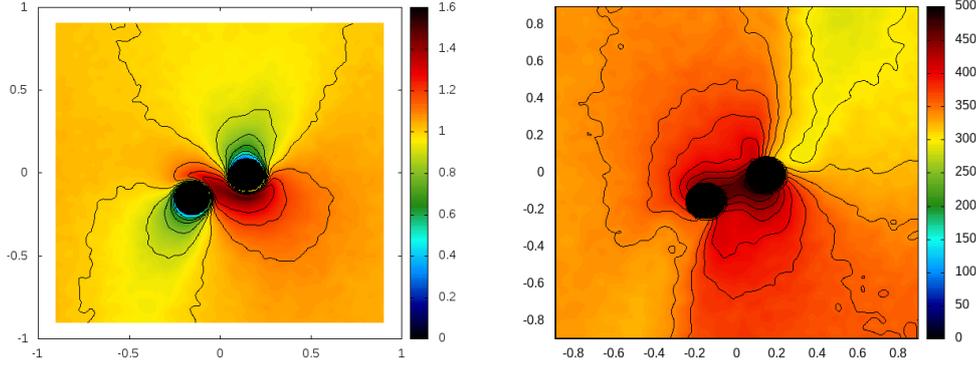


FIGURE 2.1 – Densité (à gauche) et température (à droite) du gaz au temps  $t = 5.0 \times 10^{-7}$ s. Ici la vitesse macroscopique du gaz est  $u_g = (0, -aM_a)$ , avec  $a$  la vitesse de l'air à la température  $\theta_g = 293$ K, et  $M_a$  le nombre Mach pris ici égal à 0.1. Les particules sont rondes, de température de surface  $T_p = 500$ K, de rayon  $r = 10^{-5}$ m ( $r = 0.1$  en quantité adimensionnée) et se déplacent aux vitesses  $u_1 = (0, 2aM_a)$  et  $u_2 = (0, -3aM_a)$ .

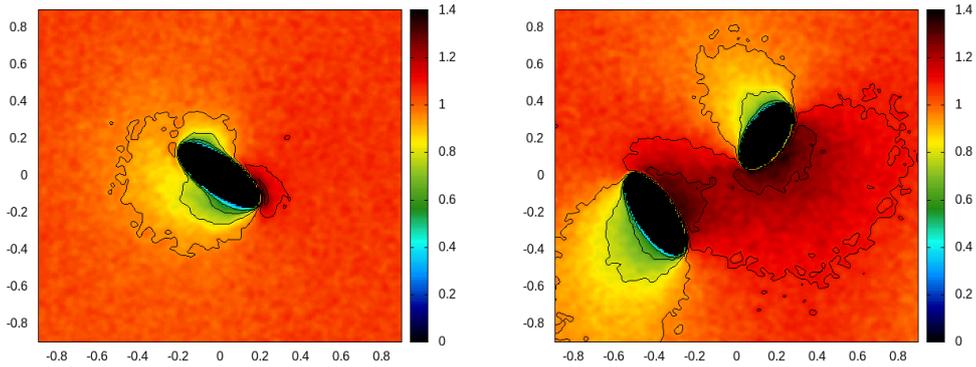


FIGURE 2.2 – Les caractéristiques du gaz sont ici les mêmes que dans la Figure 2.1. À gauche : Densité du gaz au temps  $t = 4.8 \cdot 10^{-7}$ s dans le cas d'une particule en forme d'ellipse (d'axes  $a_1 = 10^{-5}$ m et  $b_1 = 2.5 \cdot 10^{-5}$ m) sans vitesse de translation et une vitesse de rotation égale à  $\Omega_{\text{rot}} = 2\pi \cdot 10^6$  rad·s $^{-1}$ . À droite : densité du gaz au temps  $t = 4.1 \cdot 10^{-7}$ s, dans le cas de deux particules (d'axes  $a_1 = 10^{-5}$ m,  $b_1 = 2.5 \cdot 10^{-5}$ m et  $a_2 = 2 \cdot 10^{-5}$ m,  $b_2 = 10^{-5}$ m), sans vitesse de rotation, avec des vitesses de translation  $u_1 = (0, 2aM_a)$  et  $u_2 = (0, -2aM_a)$ .

### 2.3.3 Perspectives

En collaboration avec F. Salvarani et S. Tagushi (université de Kyoto) nous prévoyons d'étudier un modèle amélioré de celui que nous avons proposé dans [C15] où la condition au bord de  $f$  est une réflexion diffuse à une température locale  $T(t, x)$  au point  $x \in \Gamma^t$  d'une particule. L'évolution de la température au sein d'une particule (domaine  $B_i(t)$ ) pourrait être décrite par l'équation de la chaleur

$$\frac{\partial T}{\partial t} - k\Delta T = 0, \quad \text{for } x \in B_i(t)$$

avec des conditions aux limites de Neumann modélisant un flux de chaleur à la surface de la particule

$$\frac{\partial T}{\partial n}(t, x) = -c \int_{\mathbb{R}^d} (u_g(t, x) - v) |u_g(t, x) - v|^2 f(t, x, v) dv, \quad \text{pour } x \in \partial B_i(t)$$

où  $u_g(t, x)$  est la vitesse macroscopique du gaz. Des simulations numériques de ce problème ont déjà été amorcées par des étudiants de Polytech Sorbonne de la spécialité MAIN, dans le cadre d'un projet que j'encadrerais visant à incorporer la résolution de l'équation de la chaleur dans la particule (par différences finies, en coordonnées sphériques) au sein du code existant.

## Chapitre 3

# Modèles issus de la physique des plasmas

Le contenu de ce chapitre s'appuie sur les travaux [C12] et [C9].

### Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Un modèle de Vlasov-Poisson avec champ magnétique . . .</b>	<b>47</b>
3.1.1	Modélisation . . . . .	47
3.1.2	Analyse de la stabilité faible du modèle . . . . .	49
3.1.3	Perspectives . . . . .	51
<b>3.2</b>	<b>Réactions de fusion dans un plasma . . . . .</b>	<b>51</b>
3.2.1	Méthode numérique et simulations . . . . .	52
3.2.2	Un modèle asymptotique . . . . .	52
3.2.3	Perspectives . . . . .	53

---

On s'intéresse ici à une description cinétique d'un plasma, constitué d'ions et d'électrons, en introduisant les densités  $f_i := f_i(t, x, v)$  et  $f_e := f_e(t, x, v)$ ,  $t \in \mathbb{R}_+$ ,  $x \in \mathbb{R}^3$ ,  $v \in \mathbb{R}^3$ , en ions et électrons respectivement. Si on ne tient pas compte des collisions coulombiennes, qui peuvent être modélisées par l'opérateur de Fokker-Planck ou de Landau (voir [134]), le système le plus complet est celui de Vlasov-Maxwell

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t f_s + v \cdot \nabla_x f_s + \frac{q_s}{m_s} (\mathbf{E} + v \wedge \mathbf{B}) \cdot \nabla_v f_s = 0, \quad s \in \{i, e\} \\ -\frac{1}{c^2} \partial_t \mathbf{E} + \text{rot} \mathbf{B} = \mu_0 \sum_s q_s \int_{\mathbb{R}^3} f_s(t, x, v) v dv, \quad (\text{équation d'Ampère}) \\ \partial_t \mathbf{B} + \text{rot} \mathbf{E} = 0 \quad (\text{équation de Faraday}) \\ \text{div} \mathbf{E} = \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_s q_s \int_{\mathbb{R}^3} f_s(t, x, v) dv, \quad (\text{loi de Gauss}) \\ \text{div} \mathbf{B} = 0 \quad (\text{loi de Gauss magnétique}). \end{array} \right. \quad (3.1)$$

où  $\mathbf{E} := \mathbf{E}(t, x)$  et  $\mathbf{B} := \mathbf{B}(t, x)$  sont les champs électriques et magnétiques produits par les charges et courants dans le plasma, qui sont les interactions collectives dominantes,  $\varepsilon_0$ ,  $\mu_0$ , des constantes physiques,  $c$  la vitesse de la lumière, et  $q_i = -q_e$  la charge d'un ion. Notons que l'équation de Vlasov-Maxwell peut s'écrire indifféremment sous forme advective ou conservative, puisque  $\text{div}_v(\mathbf{E} + v \wedge \mathbf{B}) = 0$ . On renvoie par exemple à [70, 27] pour l'établissement de ce modèle. Le système (3.1) reste cependant trop coûteux à simuler numériquement, car il tient compte de toutes les échelles de la magnétohydrodynamique. On considère alors fréquemment des modèles simplifiés. En effectuant un adimensionnement du système, on peut introduire le terme  $1/c$  (où  $c$  est la vitesse de la lumière) devant la force magnétique de l'équation de Vlasov. Lorsque les échelles de temps  $t^\circ$  et  $L^\circ$  considérées vérifient  $L^\circ \ll t^\circ c$ , on peut considérer la limite  $c \rightarrow +\infty$  (justifiée par Degond dans [63] ou Usano et Ukai [5] pour un système à une espèce). Celle-ci conduit au système de Vlasov-Poisson à deux espèces

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t f_s + v \cdot \nabla_x f_s + \frac{q_s}{m_s} \mathbf{E} \cdot \nabla_v f_s = 0, \quad s \in \{i, e\} \\ \text{div} \mathbf{E} = \frac{1}{\varepsilon_0} \rho, \quad \text{avec } \rho(t, x) := \sum_s q_s \int_{\mathbb{R}^3} f_s(t, x, v) dv \end{array} \right. \quad (3.2)$$

Pour simplifier encore ce système, il est classique de faire l'une des deux approximations suivantes

- ▷ **L'approximation de masse lourde sur les ions.** L'approximation revient à dire qu'en raison de leur masse les ions sont immobiles du point de vue des électrons, et sont considérés comme un fond neutralisant. On obtient alors le système de Vlasov-Poisson pour les électrons (qui est celui approché numériquement en 1d1v dans le chapitre 1)

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t f_e + v \cdot \nabla_x f_e + \frac{q_e}{m_e} \mathbf{E} \cdot \nabla_v f_e = 0, \\ \text{div} \mathbf{E} = -\frac{q_e}{\varepsilon_0} \left( n_i(x) - \int_{\mathbb{R}^3} f_e(t, x, v) dv \right), \end{array} \right. \quad (3.3)$$

que l'on complète généralement avec une hypothèse de neutralité globale.

- ▷ **L'approximation de masse nulle sur les électrons.** On se place là à l'échelle de temps d'évolution des ions, et on considère qu'à cette échelle les électrons atteignent immédiatement leur équilibre thermodynamique. En multipliant l'équation de Vlasov pour les ions du système (3.3) par  $v$ , en intégrant, et en supposant la température des électrons constante, on obtient la relation de conservation de la quantité de mouvement des électrons

$$\partial_t(n_e \mathbf{u}_e) + \operatorname{div}(n_e \mathbf{u}_e \otimes \mathbf{u}_e) + \frac{k_B T_e}{m_e} \nabla_x(n_e) - \frac{q_e}{m_e} n_e \mathbf{E} = 0.$$

La limite formelle  $m_e \rightarrow 0$  conduit alors à écrire  $\mathbf{E} = \frac{k_B T_e}{q_e} \nabla_x \ln(n_e)$ . En injectant cette expression dans la loi de Gauss, on obtient l'équation de Poisson non linéaire sur la densité en électron

$$-\lambda^2 \Delta \ln(n_e) = \int_{\mathbb{R}^3} f_i(v) dv - n_e, \quad (3.4)$$

avec  $\lambda^2 = \frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{q_e^2}$ , que l'on couple avec l'équation de Vlasov pour les ions.

### 3.1 Un modèle de Vlasov-Poisson avec champ magnétique

Dans [C12], en collaboration avec B. Despres, B. Perthame et R. Sentis, nous proposons un modèle simplifié intermédiaire entre les systèmes de Vlasov-Maxwell et Vlasov-Poisson pour les ions. Ce modèle permet de conserver l'effet Hall provenant de l'équation de Faraday.

#### 3.1.1 Modélisation

On note ici pour simplifier  $f = f(t, x, v)$  la densité en ions (notée dans l'introduction  $f_i$ ), et

$$n_I(t, x) = \int_{\mathbb{R}} f(t, x, v) dv, \quad n_I(t, x) \mathbf{u}_I(t, x, v) = \int_{\mathbb{R}} f(t, x, v) v dv.$$

On suppose l'évolution de la densité en électrons  $n_e$  donnée par l'équation de Vlasov-Poisson non linéaire (3.4), et on note  $\mathbf{u}_e$  la vitesse macroscopique des électrons. L'équation de conservation de la quantité de mouvement pour les électrons obtenue à partir de (3.1) et une hypothèse de température constante permet d'obtenir, en effectuant formellement la limite  $m_e \rightarrow 0$ , la loi d'Ohm

$$k_B T_e \nabla n_e = q_e n_e \mathbf{E} + q_e n_e \mathbf{u}_e \wedge \mathbf{B}. \quad (3.5)$$

On obtient par ailleurs une approximation de la vitesse macroscopique des électrons  $\mathbf{u}_e$  en effectuant formellement la limite  $c \rightarrow \infty$  dans l'équation d'Ampère du système (3.1),

$$\mathbf{u}_e \approx \frac{1}{n_e} \left[ n_I \mathbf{u}_I + \frac{\operatorname{rot} \mathbf{B}}{\mu_0 q_e} \right]. \quad (3.6)$$

On déduit de (3.5) et de (3.6) un champ électrique, noté  $\mathbf{E}_0$

$$\mathbf{E}_0 = \frac{k_B T_e}{q_e} \nabla_x(\ln(n_e)) + \frac{1}{n_e} \left[ -\frac{\operatorname{rot} \mathbf{B}}{\mu_0 q_e} - n_I \mathbf{u}_I \right] \wedge \mathbf{B}. \quad (3.7)$$

On utilise aussi une loi d'Ohm généralisée [44, 89, 128] dans laquelle est ajouté un terme qui modélise une dissipation d'énergie par effet Joules (ici  $\eta$  correspond à une résistivité).

$$k_B T_e \nabla n_e + n_e q_e \eta \operatorname{rot} \mathbf{B} = q_e n_e \mathbf{E} + q_e n_e \mathbf{u}_e \wedge \mathbf{B}. \quad (3.8)$$

Celle-ci conduit à introduire un autre champ électrique  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \eta \operatorname{rot} \mathbf{B}$ , que l'on injecte dans l'équation de Faraday  $\partial_t \mathbf{B} + \operatorname{rot} \mathbf{E} = 0$  pour obtenir une EDP régissant l'évolution du champ  $\mathbf{B}$ . On prend cependant comme force électromagnétique intervenant dans l'équation de Vlasov sur les ions

$$\mathbf{F}(t, x, v) = \mathbf{E}_0(t, x) + v \wedge \mathbf{B}(t, x). \quad (3.9)$$

On aboutit finalement au système suivant, dans lequel on a remplacé  $q_e$  par  $-1$  et les autres constantes par 1.

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f + \nabla_v \cdot \left[ \left( -\nabla \ln n_e + \frac{\operatorname{rot} \mathbf{B} - n_I \mathbf{u}_I}{n_e} \wedge \mathbf{B} + v \wedge \mathbf{B} \right) f \right] = 0, \\ -\lambda^2 \Delta \ln n_e = n_I - n_e, \\ \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} - \operatorname{rot} \left( \frac{n_I \mathbf{u}_I}{n_e} \wedge \mathbf{B} \right) + \operatorname{rot} \left( \frac{\operatorname{rot} \mathbf{B}}{n_e} \wedge \mathbf{B} \right) + \operatorname{rot} (\eta \operatorname{rot} \mathbf{B}) = 0 \\ \operatorname{div} \mathbf{B} = 0. \end{cases} \quad (3.10)$$

Dans (3.10), le terme  $\operatorname{rot} \left( \frac{\operatorname{rot} \mathbf{B}}{n_e} \wedge \mathbf{B} \right)$  modélise l'effet Hall, et le terme  $\operatorname{rot} (\eta \operatorname{rot} \mathbf{B})$  l'effet Joules. On se place dans un domaine d'espace  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  régulier et borné, de normale  $\mathbf{n}_x$ , et on munit le système des conditions aux limites suivantes

$$\begin{cases} \mathbf{n}_x \cdot \nabla_x n_e(t, x) = 0 \\ \mathbf{n}_x \wedge \mathbf{B}(t, x) = 0 \\ f(t, x, v - 2(v \cdot \mathbf{n}_x) \mathbf{n}_x) = f(t, x, v) \end{cases} \quad \text{pour } x \in \partial\Omega \quad (3.11)$$

et des conditions initiales  $f(0, \cdot, \cdot) = f^{\text{ini}}$ ,  $\mathbf{B}(0, \cdot) = \mathbf{B}^{\text{ini}}$ .

On note que la première condition de (3.11) permet de garantir la neutralité globale du plasma, c'est-à-dire la relation  $\int_{\Omega} n_I dx = \int_{\Omega} n_e dx$ . La condition de réflexion spéculaire sur  $\partial\Omega$  pour  $f$  implique une condition de non glissement sur  $\mathbf{u}_I : \mathbf{u}_I \cdot \mathbf{n}_x = 0$ .

En introduisant les énergies cinétique et électrique

$$\mathcal{E}_I(t) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, v) |v|^2 dv dx, \quad \mathcal{E}_m(t) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\mathbf{B}(t, x)|^2 dx,$$

on peut montrer que (formellement) les solutions du système (3.10) vérifient la relation dissipation d'énergie suivante :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left[ \overbrace{\mathcal{E}_I + \mathcal{E}_m + \frac{\lambda^2}{2} \int_{\Omega} |\nabla_x (\ln n_e)|^2 dx + \int_{\Omega} (n_e \ln n_e - n_e + 1) dx}^{\mathcal{E}_{\text{tot}}(t)} \right] \\ = - \int_{\Omega} \eta |\operatorname{rot} \mathbf{B}|^2 dx. \end{aligned} \quad (3.12)$$

## 3.1.2 Analyse de la stabilité faible du modèle

Nous prouvons le Théorème de stabilité non-linéaire du modèle suivant

**Théorème 3.1.** *On suppose que*

$$0 < \eta_{\min} \leq \eta \in L^\infty(\Omega) \quad (3.13)$$

et on considère  $f^{in,\varepsilon}, \mathbf{B}^{in,\varepsilon}$  des conditions initiales vérifiant

$$f^\varepsilon(0, x, v) = f^{in,\varepsilon}(x, v) \geq 0, \quad f^{in,\varepsilon} \text{ bornée dans } L^1 \cap L^\infty(\Omega \times \mathbb{R}^3) \quad (3.14)$$

$$\mathbf{B}^\varepsilon(0, x) = \mathbf{B}^{in,\varepsilon}(x), \quad \operatorname{div}_x \mathbf{B}^{in,\varepsilon} = 0. \quad (3.15)$$

et

$$\sup_{0 < \varepsilon \leq 1} [\mathcal{E}_I^\varepsilon(0) + \mathcal{E}_m^\varepsilon(0)] < +\infty \quad (3.16)$$

Alors de toute famille de solutions  $f^\varepsilon, \mathbf{B}^\varepsilon, n_e^\varepsilon$  du modèle (3.10) -(3.11) on peut extraire une sous-suite convergeant faiblement vers une solution faible d'énergie finie. De plus, pour tout  $T > 0$ ,

$$\mathbf{B}^\varepsilon \rightarrow \mathbf{B} \in L^\infty(0, T; L^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; L^q(\Omega)) \quad \text{fortement pour } q < 6,$$

$$f^\varepsilon \rightarrow f \in L^\infty(0, T; L^1 \cap L^\infty(\Omega \times \mathbb{R}^3)) \quad \text{faiblement},$$

$$\mathbf{J}^\varepsilon = \operatorname{rot} \mathbf{B}^\varepsilon \rightarrow \mathbf{J} = \operatorname{rot} \mathbf{B} \quad \text{in } L^2((0, T) \times \Omega) \quad \text{faiblement},$$

$$n_e^\varepsilon \rightarrow n_e \quad \text{in } L^q((0, T) \times \Omega) \quad \text{fortement}$$

$$n_I^\varepsilon \mathbf{u}_I^\varepsilon \rightarrow n_I \mathbf{u}_I \in (L^q(0, T \times \Omega))^3 \quad \text{fortement},$$

pour tout  $q$  tel que  $1 \leq q < 5/4$ .

Je décris ici les étapes principales de la preuve.

**Contrôle de l'énergie** Pour utiliser la relation de décroissance de l'énergie totale (3.12), il nous faut obtenir une borne supérieure et inférieure pour  $n_e$ . On montre alors le Lemme suivant, dont la preuve repose sur une inégalité de Hölder, un argument de régularité Elliptique, et l'inégalité de Morrey [85].

**Lemme 3.1.** *Si  $n_e$  est une solution forte de*

$$\begin{cases} -\lambda^2 \Delta \ln n_e + n_e = n_I, & x \in \Omega, \\ \mathbf{n}_x \cdot \nabla n_e = 0, & x \in \partial\Omega, \end{cases}$$

avec  $n_I \geq 0$ ,  $n_I \in L^\infty(0, T, L^{5/3}(\Omega))$ , alors on a le contrôle par dessus et dessous de  $n_e$

$$0 < K_- (\|n_I\|_{L^{5/3}}) \leq n_e \leq K_+ (\|n_I\|_{L^{5/3}}),$$

pour des fonctions  $K_\pm(\cdot)$  continues et positives, avec  $K_+ > 1$  croissante et  $K_-$  décroissante.

Par inégalité d'interpolation [115], on peut borner le moment d'ordre 0 (et aussi celui d'ordre 1) de  $f$ , c'est-à-dire  $n_I$ , par celui d'ordre 2. De plus, en remarquant que  $\nabla_v F = 0$ , si  $f$  est une solution forte de l'équation de Vlasov ses normes  $L^p$  sont conservés :

$$\|f(t, \cdot, \cdot)\|_{L^p} = \|f^{\text{ini}}(\cdot, \cdot)\|_{L^p} \quad \forall t \geq 0, \forall p \in [1, \infty]. \quad (3.17)$$

On obtient alors (pour  $p = \infty$  dans (3.17)) un contrôle de  $\|n_I(t)\|_{L^{5/3}}$

$$\|n_I(t)\|_{L^{5/3}} \leq C \|f^{\text{ini}}\|_{L^\infty}^{2/5} \left( \int_{\Omega} \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, v) |v|^2 dv dx \right)^{3/5}.$$

Cel va nous permettre d'en déduire que si les énergies cinétique et magnétique initiales  $\mathcal{E}_I(0)$  et  $\mathcal{E}_m(0)$  sont bornées, alors l'énergie totale  $\mathcal{E}_{\text{tot}}(0)$  également. Ainsi grâce à (3.12) on a une estimation uniforme en  $\varepsilon$

$$\sup_{0 < \varepsilon \leq 1} \sup_{t \geq 0} \mathcal{E}_{\text{tot}}^\varepsilon(t) < +\infty.$$

**Contrôle des champs  $\mathbf{B}$  et  $\mathbf{E}$**  Le contrôle de l'énergie et la borne inférieure sur  $\eta$  nous montrent déjà, grâce (3.12), que

$$\sup_{0 < \varepsilon \leq 1} \int_0^T \int_{\Omega} |\text{rot} \mathbf{B}^\varepsilon|^2 dx dt \leq C,$$

On voit ici l'intérêt de l'ajout de l'effet Joules dans le modèle! De plus, si  $\Omega$  est de classe  $\mathcal{C}^{1,1}$ , alors

$$X_N(\Omega) := \{\mathbf{b} \in \mathbf{H}_{\text{curl}}(\Omega) \cap \mathbf{H}_{\text{div}}(\Omega) / \mathbf{b} \wedge \mathbf{n} = 0 \text{ on } \partial\Omega\}$$

s'injecte continuellement dans  $\mathbf{H}^1(\Omega)^3$  [61]. Une injection de Sobolev nous permet d'obtenir ensuite un contrôle de la famille  $B^\varepsilon$

$$\sup_{0 < \varepsilon \leq 1} \|\mathbf{B}^\varepsilon\|_{L^2(0, \infty; L^6(\Omega)^3)} \leq C.$$

Pour le champ électrique, une estimation de tous les termes par des inégalités de Hölder nous permet d'obtenir (uniformément en  $\varepsilon$ )

$$\mathbf{E}^\varepsilon = \underbrace{-\nabla \ln n_e^\varepsilon}_{\in L_t^\infty(L_x^2)} - \underbrace{\frac{n_I^\varepsilon \mathbf{u}_I^\varepsilon}{n_e^\varepsilon} \wedge \mathbf{B}^\varepsilon}_{\in L_t^2(L_x^{30/29})} + \underbrace{\frac{\text{rot} \mathbf{B}^\varepsilon \wedge \mathbf{B}^\varepsilon}{n_e^\varepsilon}}_{\in L_t^{20/11}(L_x^{30/29})} + \underbrace{\eta \text{rot} \mathbf{B}^\varepsilon}_{\in L_t^2(L_x^2)} \in L_{t,x}^{30/29}.$$

**Passage à la limite** Les estimations précédentes ainsi que le Théorème de Rellich permettent d'obtenir que la famille  $\{\mathbf{B}^\varepsilon(t, \cdot)\}$  est relativement compacte dans  $L^q(\Omega)^3$ , pour  $1 \leq q < 6$ . Pour tout  $t$ , on peut donc extraire de  $\{\mathbf{B}^\varepsilon(t, \cdot)\}$  une sous-suite convergeant (fortement) dans  $L^q(\Omega)$ , pour  $1 \leq q \leq 6$ . Afin d'obtenir la compacité temps-espace, on utilise ensuite le Théorème de Simon-Aubin-Lions [129].

Pour prouver la compacité sur les moments de  $f$ , et donc la convergence forte des sous-suites que l'on peut extraire de  $n_I^\varepsilon$  et  $n_I^\varepsilon \mathbf{u}^\varepsilon$ , on utilise un Lemme de moyenne (ici celui de Perthame et Souganidis [116]). Les Lemmes de moyenne, introduits par Golse, Perthame et Sentis [94] sont des outils importants et spécifiques à la théorie

cinétique, qui traduisent l'effet régularisant de la moyenne en vitesse. Alors qu'une solution  $f$  d'une équation cinétique n'a pas de raison d'être plus régulière que son second membre ou sa donnée initiale, on peut gagner de la régularité sur la quantité moyennée en vitesse  $\rho_\psi := \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, v)\psi(v)dv$ , où  $\psi$  est régulière, à support compact. Ce lemme de moyenne est utilisé encore pour le passage à la limite  $\varepsilon \rightarrow 0$  dans l'équation cinétique.

### 3.1.3 Perspectives

Une suite naturelle de ce travail serait de montrer l'existence de solutions faibles locales ou globales à ce système. Pour cela, les techniques de régularisation par convolution [4, 81, 7] semblent délicates car nous avons travaillé dans un domaine borné et non dans tout l'espace. Une possibilité pourrait être de considérer la stratégie de "splitting" et "freezing" que nous avons décrite dans [C12], qui conserve la décroissance de l'énergie, et de montrer la convergence de cette stratégie, comme dans [79].

Afin de s'attaquer tout d'abord à un problème plus simple, je co-encadre avec B. Després la thèse d'A. Régé, qui s'intéresse en ce moment à la propagation des moments et de la régularité pour une équation de Vlasov-Poisson avec champ magnétique donné. Des résultats dans le cas d'un champ  $\mathbf{B}$  constant semblent acquis, et il va maintenant s'intéresser au cas d'un champ  $\mathbf{B}(x)$ .

Par ailleurs, l'utilisation de la stratégie de "splitting" et "freezing" pourrait être intéressante aussi à des fins de simulation numérique (et comparaison à d'autres modèles). Le couplage d'une méthode particulière pour la résolution de l'équation de Vlasov et d'une méthode de volumes finis pour l'équation d'évolution du champ  $B$  (rendu linéaire par la stratégie de freezing) pourrait être une piste possible.

## 3.2 Réactions de fusion dans un plasma

La compréhension des plasmas de fusion magnétique est un défi actuel dans le contexte du réacteur expérimental de fusion par confinement magnétique ITER, dont l'un des objectifs est d'obtenir des réactions de fusion entre ions Deuterium et Tritium. Les particules  $\alpha$  produites, très énergétiques, ont un rôle important puisqu'elles participent au chauffage du plasma, contribuent à l'évolution du champ électromagnétique et peuvent ainsi conduire à des instabilités. Pour ces raisons, l'étude de leurs trajectoires et de leurs interactions avec les autres espèces est un point important pour la compréhension de l'évolution d'un plasma de fusion. Ces phénomènes sont pourtant, à notre connaissance, peu étudiés dans la communauté mathématique. Dans [71], S. Dellacherie et R. Sentis introduisent deux modèles cinétiques multi-espèces décrivant les réactions de fusion entre des ions Deuterium et Tritium au sein d'un plasma, réactions qui produisent une particule  $\alpha$  et un neutron. Dans [C9], en collaboration avec S. Dellacherie, ainsi que C. Copol et J-M Mounsamy lors d'un projet au CEMRACS 2011, nous avons étudié d'un point de vue numérique ces modèles. On note ici  $f_D$ ,  $f_T$ ,  $f_\alpha$ , et  $f_n$  respectivement les densités de chaque espèce, et  $m_D$ ,  $m_T$ ,  $m_\alpha$ , et  $m_n$  leurs masses. Le modèle homogène en espace

s'écrit

$$\begin{cases} \frac{\partial f_i}{\partial t} = -P_i(f_D, f_T), & i \in \{D, T\}, \\ \frac{\partial f_j}{\partial t} = G_j(f_D, f_T), & j \in \{\alpha, n\}. \end{cases} \quad (3.18)$$

Les opérateurs sont ici, contrairement à des opérateurs de collisions habituels, des opérateurs de perte (pour les espèces D et T) ou de gain (pour les espèces  $\alpha$  et  $n$ ). Le mécanisme collisionnel est basé sur une conservation du moment cinétique lors d'une "collision", et sur l'hypothèse de la transformation de l'énergie provenant du défaut de masse  $Q = \Delta M c^2$  en énergie cinétique pour les particules  $\alpha$  et les neutrons. Les termes de gain diffèrent alors de ceux d'un modèle de mélange gazeux classique, avec la présence du jacobien de la transformation des vitesses au niveau microscopique (comme dans les gaz polyatomiques avec énergie interne [26]) et de vitesses "post-collisionnelles" faisant intervenir l'énergie du défaut de masse  $Q$ . Le noyau des opérateurs est basé sur une section de collision nucléaire issu de [83, 100], de la forme

$$\sigma(|v_D - v_T|) = |v_D - v_T| \sigma(r), \quad \sigma(r) = \frac{p_5 + \frac{p_2}{(p_4 - \frac{p_3}{2} m_D r^2)^2 + 1}}{\frac{1}{2} m_D r^2 (\exp(p_1) \exp(-\sqrt{\frac{1}{2} m_D r^2}) - 1)}$$

où  $p_i \in \mathbb{R}^+$  sont des coefficients dont les valeurs sont données dans [100].

### 3.2.1 Méthode numérique et simulations

Nous avons discrétisé le système (3.18) par une méthode particulière (avec des reconstructions par  $B3$ -splines pour l'approximation des densités) avec simulation Monte-Carlo des opérateurs de fusion, inspiré des méthodes DSMC [19] pour mélanges gazeux, et un schéma d'Euler explicite pour la discrétisation en temps. Nous justifions d'un point de vue formel la discrétisation. Afin de pouvoir utiliser une méthode symétrique pour la sélection des paires de collision (de type "Bird" plutôt que de type "Nambu"), on choisit de prendre le même poids pour les particules et toutes les espèces, ce qui n'est pas une grosse contrainte si les ordres de grandeurs des densités des espèces  $D$  et  $T$  sont les mêmes (ce qui physiquement est le cas). Le schéma numérique introduit préserve la masse et la quantité de mouvement. Nous avons construit un code 3d3v à partir de cette méthode, et validé celui-ci en remplaçant la section de fusion par une section Maxwellienne (ce qui permet d'obtenir des expressions explicites des densités intégrées en vitesse). La figure 3.1 présente l'évolution temporelle de la première marginale de la densité approchée des ions D et des particules  $\alpha$ , ainsi que l'évolution de la densité de l'énergie (où l'énergie est  $E_i(v) = \frac{1}{2} m_i |v|^2$ , pour  $i \in \{\alpha, n\}$ ). On observe que ces dernières sont centrées autour des valeurs  $E_\alpha^* = 3.5$  MeV et  $E_n^* = 14.1$  MeV, qui correspondent à des valeurs physiquement bien connues [106].

### 3.2.2 Un modèle asymptotique

Nous nous sommes ensuite étudié un modèle asymptotique proposé dans [71], obtenu en faisant tendre vers 0 un petit paramètre du modèle. Les opérateurs de gains  $G_\alpha(f_D, f_T)$  et  $G_n(f_D, f_T)$  sont remplacés par les termes  $\frac{1}{4\pi} \tau(f_D, f_T) \delta_\alpha$  et

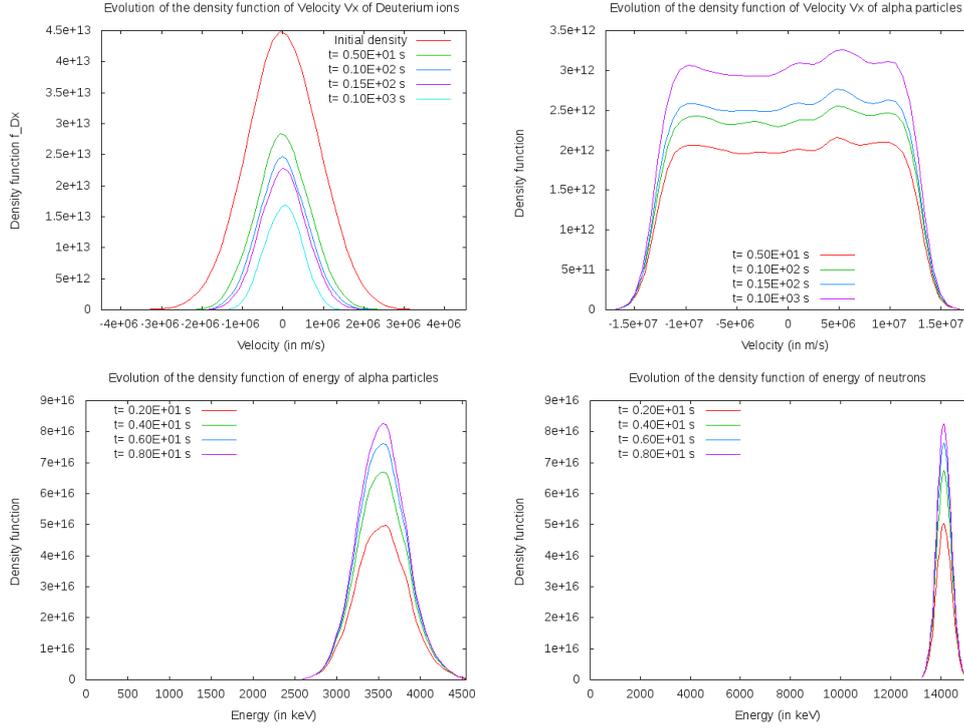


FIGURE 3.1 – Reconstructions de la densité de la première composante en vitesse des ions  $D$  et des particules  $\alpha$ , et de l'énergie des particules  $\alpha$  et des neutrons. Ici les densités initiales  $f_D^0$  et  $f_T^0$  sont des Maxwelliennes centrées, et  $f_\alpha^0 = f_n^0 = 0$ .

$\frac{1}{4\pi} \tau(f_D, f_T) \delta_n$ , où  $\delta_i$  est un Dirac surfacique en vitesse sur la sphère de rayon  $\bar{V}^i = \frac{2E_i^*}{m_i}$ , et  $\tau(f_D, f_T)$  le taux de fusion, défini par

$$\tau(f_D, f_T)(t) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{S}^2} f_D(t, v_D) f_T(t, v_T) q(|v_D - v_T|, \Omega) d\Omega dv_T dv_D.$$

Cet opérateur asymptotique est utilisé aussi dans [114] (postérieur à notre travail). Nous avons par ailleurs vérifié numériquement que ce taux de fusion (qui correspond au nombre de réactions à l'instant  $t$ ) peut raisonnablement être approché en utilisant une expression explicite que nous avons obtenue en remplaçant la section de fusion par une section de collision Maxwellienne. Cela permet d'obtenir un modèle approché pour la simulation des particules  $\alpha$  et neutron peu coûteux, sans passer par la résolution des opérateurs de perte et de gain.

### 3.2.3 Perspectives

Une perspective à ce travail pourrait être d'intégrer l'effet d'un champ magnétique fort dans la modélisation des réactions de fusion. Dans le contexte d'un plasma soumis à un fort champ magnétique externe, l'approximation gyrocinétique de l'équation de Vlasov-Poisson [90, 91, 92] est un modèle largement utilisé, notamment dans le code de calcul GYSELA développé par le CEA, et étudié d'un point de vue théorique [95]. Celle-ci est basée sur le fait qu'une particule soumise à un champ

magnétique extérieur constant et uniforme se déplace suivant une hélice dont l'axe est parallèle aux lignes de champ. Dans [24, 25] M. Bostan et C. Caldini ont introduit des opérateurs "gyro-moyennés" de Boltzmann linéaire et de Fokker-Plank. Les opérateurs obtenus, qui ne sont plus locaux en espace, possèdent les propriétés usuelles de conservation (masse, quantité de mouvement et énergie) et d'entropie. On pourrait alors étendre ces modèles et s'intéresser à la gyro-moyennisation des opérateurs de fusion considérés dans [C9], dont la structure est similaire à des termes de gains ou de perte des opérateurs de Boltzmann, bien que plusieurs points (modèle multi-espèces, section de collision spécifique, relation de conservation de énergie cinétique faisant intervenir l'énergie du défaut de masse) pourraient rendre ici la dérivation plus ardue.

## Chapitre 4

# Une méthode d'approximation par polynômes positifs

Ce chapitre présente le contenu de l'article [C5], en collaboration avec B. Després et M. Campos-Pinto.

### Sommaire

---

4.1	Introduction . . . . .	56
4.2	Formulation du problème . . . . .	57
4.3	Définition du point de départ $X^0$ . . . . .	59
4.4	Convergence de la méthode . . . . .	61
4.5	Illustrations numériques . . . . .	62
4.6	Perspectives . . . . .	64

---

## 4.1 Introduction

On s'intéresse dans ce chapitre à la question suivante : étant donnée une fonction  $f$  positive, comment l'approcher sur un intervalle borné par un polynôme de degré arbitraire, lui-même positif? Cette question est une première étape vers la question plus générale : étant donnée une fonction  $f$  bornée, comment l'approcher sur un intervalle borné par un polynôme de degré arbitraire compris entre les mêmes bornes ?

Cette problématique, parfois motivée par des raisons physiques (lorsque par exemple la fonction  $f$  représente une grandeur positive telle qu'une densité, comme c'est le cas dans les applications considérées dans les chapitres précédents), intervient aussi dans de nombreux contextes en calcul scientifique. La principale application nous intéressant est l'approximation numérique d'EDP (plus particulièrement de transport) où le besoin de pouvoir contrôler les oscillations et bornes de la solution approchée est cruciale. Depuis le théorème barrière de Godunov montrant qu'aucun schéma linéaire pour l'approximation des systèmes de lois de conservation d'ordre strictement supérieur à 1 ne peut préserver les bornes (et donc la positivité), de multiples stratégies de préservation des bornes pour les schémas d'ordre élevés ont été développées. Outre le développement des schémas ENO (Essentially Non Oscillating), WENO (Weighted Essentially Non Oscillating) [124], PWENO [39], une technique classique pour préserver la positivité ou le caractère borné d'une solution numérique est l'utilisation de limiteurs [93, 123]. Cependant, la conservation des bornes n'est obtenue qu'en un nombre fini de points de la cellule, et non en tous les points comme il serait théoriquement possible de le faire avec des polynômes positifs.

La théorie des polynômes positifs sur  $\mathbb{R}^n$  s'écrivant comme somme de carrés a été largement développée dans la littérature, voir par exemple l'article de survey [120] ou le livre de Lasserre [105]. En dimension 1, une propriété fondamentale est que tout polynôme positif peut s'écrire comme somme de carrés [105] :

$$p(x) \geq 0 \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad \Leftrightarrow \quad p(x) = \sum_{i=1}^k h_i(x)^2 \quad \forall x \in \mathbb{R},$$

pour un nombre fini de polynômes  $h_i$ ,  $1 \leq i \leq k$ . En dimension supérieure ou égale à 2 cependant, il est possible de trouver des polynômes positifs qui ne sont pas somme de carrés (par exemple le polynôme de Motzkin  $p(x, y) = x^4y^2 + x^2y^4 - 3x^2y^2 + 1$ ). Une caractérisation très utilisée des polynômes possédant une décomposition en somme de carrés (appelés polynômes *s.o.s*) est la suivante : un polynôme  $p \in \mathbb{R}_{2n}[X_1, \dots, X_d]$  est *s.o.s* si et seulement si il existe une matrice réelle semi-définie positive  $Q \in \mathcal{M}_{s(n)}(\mathbb{R})$ , où  $s(n) = \binom{n+d}{n}$ ; telle que  $p(x) = v_n(x)^t Q v_n(x)$ , pour tout  $x \in \mathbb{R}^d$ , avec  $v_n(x) = (x^\alpha)_{|\alpha| \leq n}$  est le vecteur des monômes de degré inférieur ou égal à  $n$ . On peut aussi considérer la caractérisation des polynômes positifs sur un ensemble semi-algébrique, c'est-à-dire de la forme

$$K = \{x \in \mathbb{R}^d \mid g_j(x) \geq 0, \quad g_j \in \mathbb{R}[X_1, \dots, X_d], \quad 1 \leq j \leq j_*\}. \quad (4.1)$$

Notons que la plupart des maillages intervenant en calcul scientifique (intervalles en 1D, carrés et triangles en 2D...) peuvent s'écrire sous cette forme. Il existe de nombreuses caractérisation des polynômes positifs sur un ensemble semi-algébrique (voir

[105] pour un état de l'art de la question), comme par exemple le *Positivstellensatz* de Putinar [122], qui utilise la représentation *s.o.s* sur  $K$  de la forme

$$p = \sum_{j=1}^{j_*} g_j \left( \sum_{i=1}^{i_*} q_{i,j}^2 \right), \quad (4.2)$$

avec  $q_{i,j} \in \mathbb{R}[X_1, \dots, X_d]$ .

Ainsi, dans la communauté de l'optimisation numérique, des algorithmes de programmation semi-définie sont largement utilisés. Cependant, ces méthodes sont basées sur des propriétés algébriques et, mis à part dans [109], leur application au calcul scientifique semble peu ou pas développée.

L'idée de départ de la méthode de construction d'un polynôme positif interpolant  $f$  sur  $[0, 1]$  présentée dans [C5] est l'utilisation d'une représentation des polynômes positifs sur  $[0, 1]$  de la forme (4.2). On note ici  $\mathcal{P}_n$  l'ensemble des polynômes de degré inférieur ou égal à  $n$  et  $\mathcal{P}_n^+$  le sous-ensemble de  $\mathcal{P}_n$  constitué des polynômes positifs sur  $[0, 1]$ . Le Théorème de Lukács donne alors une caractérisation de  $\mathcal{P}_n^+$  en terme de *s.o.s*, avec  $g_1(x) = 1$ ,  $g_2(x) = x$ ,  $g_3(x) = 1 - x$ ,  $g_4(x) = x(1 - x)$ .

**Théorème 4.1** (Lukács). *Soit  $n \in \mathbb{N}^*$*

- ▷ *Si  $n$  est pair ( $n = 2p$ ), alors  $p_n \in \mathcal{P}_n^+$  si et seulement si  $p_n$  peut être exprimé sous la forme  $p_n(x) = a_p(x)^2 + x(1-x)b_{p-1}(x)^2$  avec  $a_p \in \mathcal{P}_p$  et  $b_{p-1} \in \mathcal{P}_{p-1}$ .*
- ▷ *Si  $n$  est impair ( $n = 2p + 1$ ), alors  $p_n \in \mathcal{P}_n^+$  si et seulement si  $p_n$  peut être exprimé sous la forme  $p_n(x) = x a_p(x)^2 + (1-x)b_p(x)^2$  avec  $a_p, b_p \in \mathcal{P}_p$ .*

Une preuve simple du Théorème 4.1 peut être trouvée dans [74]. Ici nous n'utilisons en fait que la condition suffisante pour avoir  $p_n \in \mathcal{P}_n^+$ , qui est évidente. L'algorithme introduit, peu coûteux et robuste, construit une suite de points glissants de  $[0, 1]$  permettant d'obtenir à la limite des points d'interpolation à partir desquels construire les polynômes  $a_p$  et  $b_{p-1}$  ou  $b_p$ .

Postérieurement à [C5], Després et Herda [75] ont aussi proposé une méthode de construction de polynômes *s.o.s* sur un ensemble semi-algébrique de  $\mathbb{R}^n$  permettant d'obtenir, sous certaines conditions et étant donné un polynôme  $p \in \mathbb{R}_n[X_1, \dots, X_d]$  positif sur  $K$  et  $(x_r)_{1 \leq r \leq i_*}$  un ensemble de points de  $\mathbb{R}^d$  avec  $i_* = \dim(\mathbb{R}_n[X_1, \dots, X_d])$ , des polynômes  $(q_{i,j})_{1 \leq i \leq i_*, 1 \leq j \leq j_*}$  tels que la représentation (4.2) soit vérifiée. Ces polynômes  $(q_{i,j})_{1 \leq i \leq i_*, 1 \leq j \leq j_*}$  sont obtenus comme limite d'un algorithme de minimisation d'une fonctionnelle coercive sur un convexe.

Enfin, notons que d'autres approches ont aussi été développées, par exemple dans [31] où les auteurs utilisent une caractérisation des polynômes cubiques positifs à partir de leurs coefficients (introduite dans [127]) pour générer des polynômes d'interpolation de Hermite cubiques par morceaux et de classe  $\mathcal{C}^1$ .

## 4.2 Formulation du problème

Le problème que nous avons considéré dans [C5] est le suivant : étant donné une fonction  $f$  positive sur  $[0, 1]$  et  $n$  un entier naturel, peut-on trouver  $n + 1$  points d'interpolation distincts dans  $[0, 1]$  tels que le polynôme d'interpolation de Lagrange de  $f$  en ces points soit positif ou nul sur l'intervalle  $[0, 1]$ ? Je présente

ici les résultats correspondant au cas de  $n$  impair, l'adaptation au cas  $n$  pair est détaillée dans [C5].

En cherchant ce polynôme sous la forme

$$p_n(x) = x a_p(x)^2 + (1 - x) b_p(x)^2$$

on remarque que si  $\alpha \in ]0, 1[$  est une racine du polynôme  $b_p$  et que  $a_p(\alpha)^2 = \frac{f(\alpha)}{\alpha^2}$ , alors  $p_n$  interpole la fonction  $f$  en  $\alpha$ . On peut alors en déduire une condition suffisante pour obtenir un polynôme d'interpolation de  $f$  dans  $\mathcal{P}_n^+$ , avec  $n = 2p + 1$ ,  $p \in \mathbb{N}$  :

**Proposition 4.1.** *On suppose qu'il existe deux polynômes  $a_p, b_p$  de  $\mathcal{P}_p$ , et  $2p$  points de  $]0, 1[$   $\alpha_0 < \dots < \alpha_{p-1}$  et  $\beta_1 < \dots < \beta_p$  vérifiant*

$$b_p(\alpha_i) = a_p(\beta_{i+1}) = 0, \quad \text{pour } 0 \leq i \leq p - 1, \quad (4.3)$$

et, en posant  $\beta_0 = 0$  et  $\alpha_p = 1$ ,

$$a_p(\alpha_i) = (-1)^{i+p} \sqrt{\frac{f(\alpha_i)}{\alpha_i}}, \quad b_p(\beta_i) = (-1)^{i+p} \sqrt{\frac{f(\beta_i)}{1 - \beta_i}} \quad \text{pour } 0 \leq i \leq p. \quad (4.4)$$

Alors ces  $n + 1$  points sont distincts et entrelacés :

$$0 = \beta_0 < \alpha_0 < \beta_1 < \dots < \alpha_{p-1} < \beta_p < \alpha_p = 1, \quad (4.5)$$

et le polynôme  $p_n(x) = x a_p(x)^2 + (1 - x) b_p(x)^2 \in \mathcal{P}_n^+$  interpole  $f$  aux points  $\alpha_0, \dots, \alpha_{p-1}, \beta_1, \dots, \beta_p$ .

L'examen du cas  $n = 2$ , où l'on cherche  $p_2$  s'écrivant sous la forme  $p_2(x) = a_1(x)^2 + x(1 - x)b_0^2$ , avec  $a_1 \in \mathcal{P}_1$ ,  $b_0 \in \mathbb{R}$ , permet de se convaincre de la nécessité de choisir  $a_1(0)$  et  $a_1(1)$  de signes différents, afin que le polynôme  $a_1$  possède une racine  $\beta \in ]0, 1[$ . Les valeurs  $(a_p(\alpha_i))_{0 \leq i \leq p}$  (respectivement  $(b_p(\beta_i))_{0 \leq i \leq p}$ ) dans (4.4) sont donc choisis avec alternance des signes. La figure 4.1 illustre la propriété d'entrelacement des points (4.5) qui en résulte.

On se ramène donc à déterminer un vecteur  $X = (\alpha_0, \dots, \alpha_{p-1}, \beta_1, \dots, \beta_p)$  tel que les polynômes  $a_p$  et  $b_p$  construit par interpolation à partir des relations (4.4) aient pour racines  $\beta_1 < \dots < \beta_p$  et  $\alpha_0 < \dots < \alpha_{p-1}$  respectivement. L'idée est alors d'obtenir ce vecteur  $X$  comme la solution d'un système non linéaire.

Soit  $0 < h \leq 1$ ; on considère en fait le problème de l'interpolation de la fonction  $f$  sur l'intervalle  $[0, h]$  en introduisant  $f_h(x) = f(hx)$ . Ce paramètre  $h$  apparaît naturellement lié dans les problèmes issus de la discrétisation d'EDP à la taille d'une maille,  $h = r\Delta x$ . On définit

$$I_p = \{(x_1, \dots, x_p) \in ]0, 1[^p: 0 < x_1 < \dots < x_p < 1\}. \quad (4.6)$$

et pour  $(\alpha, \beta) = (\alpha_0, \dots, \alpha_{p-1}; \beta_1, \dots, \beta_p) \in I_p^2$ ,  $\alpha_p = 1$  et  $\beta_0 = 0$ , on note  $a_{p,h}[\alpha]$  et  $b_{p,h}[\beta]$  les polynômes d'interpolation construits à partir des relations (4.4) (en remplaçant  $f$  par  $f_h$ ), c'est à dire

$$a_{p,h}[\alpha](x) = \sum_{0 \leq i \leq p} (-1)^{i+p} \sqrt{\frac{f_h(\alpha_i)}{\alpha_i}} \prod_{0 \leq j \neq i \leq p} \frac{x - \alpha_j}{\alpha_i - \alpha_j} \quad (4.7)$$

$$b_{p,h}[\beta](x) = \sum_{0 \leq i \leq p} (-1)^{i+p} \sqrt{\frac{f_h(\beta_i)}{1 - \beta_i}} \prod_{0 \leq j \neq i \leq p} \frac{x - \beta_j}{\beta_i - \beta_j} \quad (4.8)$$

On définit alors  $\Theta_{p,h} : I_p^2 \rightarrow \mathbb{R}^{2p}$  par

$$\Theta_{p,h}(\alpha, \beta) = (b_{p,h}[\beta](\alpha_0), \dots, b_{p,h}[\beta](\alpha_{p-1}), a_{p,h}[\alpha](\beta_1), \dots, a_{p,h}[\alpha](\beta_p)). \quad (4.9)$$

Ainsi la relation (4.3) pour  $f_h$  est vérifiée si et seulement si  $(\alpha, \beta) \in I_p^2$  vérifie

$$\Theta_{p,h}(\alpha, \beta) = 0. \quad (4.10)$$

Nous introduisons alors une méthode de Newton-Raphson simplifiée pour résoudre l'équation non-linéaire (4.10), dans laquelle la matrice Jacobienne utilisée n'est pas modifiée à chaque itération.

**Algorithme 4.1.** *Partant d'un vecteur initial  $X^0 \in I_p^2$ , on calcule*

$$X^{m+1} := G_h(X^m) \quad \text{with} \quad G_h(X) = X - J_p(X^0)^{-1} \Theta_{p,h}(X) \quad (4.11)$$

pour  $m = 0, 1, \dots$ , avec  $J_p(X^0) = \nabla \Theta_{p,0}(X^0) \in \mathbb{R}^{2p \times 2p}$  la matrice Jacobienne de  $\Theta_{p,h}$  évaluée en  $h = 0$  et en  $X^0$ .

### 4.3 Définition du point de départ $X^0$

Le choix de ce vecteur initial  $X^0$  est guidé par l'envie que l'algorithme 4.1 soit exact pour les fonctions constantes. On cherche donc deux polynômes  $\underline{a}_p$  et  $\underline{b}_p \in P_p$  tels que  $x\underline{a}_p(x)^2 + (1-x)\underline{b}_p(x)^2 = 1$ . En introduisant les polynômes de Tchebychev de première et second espèce  $(T_p, U_{p-1}) \in \mathcal{P}_p \times \mathcal{P}_{p-1}$  définis par

$$T_p(\cos(\theta)) = \cos(p\theta), \quad U_{p-1}(\cos(\theta)) = \frac{\sin(p\theta)}{\sin(\theta)} \quad (4.12)$$

on peut alors montrer le Lemme suivant

**Lemme 4.1.** *Soit  $p \in \mathbb{N}$  et  $\underline{a}_p$  et  $\underline{b}_p \in P_p$  définis par*

$$\begin{aligned} \underline{a}_p(x) &= T_p(2x-1) - 2(1-x)U_{p-1}(2x-1) \\ \underline{b}_p(x) &= T_p(2x-1) + 2xU_{p-1}(2x-1). \end{aligned} \quad (4.13)$$

Alors

▷  $\underline{a}_p$  et  $\underline{b}_p$  ont  $p$  racines simples dans  $]0, 1[$ , notées respectivement  $\underline{\beta} = (\underline{\beta}_1, \dots, \underline{\beta}_p)$  et  $\underline{\alpha} = (\underline{\alpha}_0, \dots, \underline{\alpha}_{p-1})$ , avec

$$\underline{\alpha}_i := \frac{1}{2} \left[ 1 - \cos \left( \frac{(2i+1)\pi}{2p+1} \right) \right] \quad \text{et} \quad \underline{\beta}_i := \frac{1}{2} \left[ 1 - \cos \left( \frac{2i\pi}{2p+1} \right) \right] \quad (4.14)$$

▷ La propriété (4.4) est vérifiée :

$$\underline{a}_p(\underline{\alpha}_i) = (-1)^{i+p} \sqrt{\frac{1}{\underline{\alpha}_i}}, \quad \underline{b}_p(\underline{\beta}_i) = (-1)^{i+p} \sqrt{\frac{1}{1 - \underline{\beta}_i}} \quad \text{pour } 0 \leq i \leq p.$$

▷ Pour tout  $x$  on a

$$x\underline{a}_p(x)^2 + (1-x)\underline{b}_p(x)^2 = 1. \quad (4.15)$$

On définit alors

$$X^0 := (\underline{\alpha}, \underline{\beta}) = (\underline{\alpha}_0, \dots, \underline{\alpha}_{p-1}; \underline{\beta}_1, \dots, \underline{\beta}_p) \in I_p^2. \quad (4.16)$$

comme point de départ de notre algorithme. Remarquons que comme  $f_0 = f(0)$  est constante,  $\Theta_{p,0}(X^0) = 0$ , d'où  $G_0(X^0) = X^0$ . De plus,  $\nabla G_0(X^0) = 0 : X^0$  est donc un point fixe super attractif de  $G_0$ .

On peut de plus montrer que la matrice Jacobienne  $J_p(X^0)$  est diagonale et inversible.

**Lemme 4.2.** *On suppose que  $f$  vérifie*

$$f \in W^{1,\infty}(0, 1), \quad \inf_{x \in [0,1]} f(x) > 0. \quad (4.17)$$

et que  $X^0$  est donné par (4.16). Alors la matrice  $J_p(X^0) = \nabla \Theta_{p,0}(X^0)$  intervenant dans (4.11) a la forme

$$J_p(X^0) = \sqrt{f(0)} \begin{pmatrix} D_\alpha & 0 \\ 0 & D_\beta \end{pmatrix}$$

avec  $D_\alpha = \text{diag}(\underline{b}'_p(\underline{\alpha}_i) : i = 0, \dots, p-1)$ ,  $D_\beta = \text{diag}(\underline{a}'_p(\underline{\beta}_i) : i = 1, \dots, p)$  deux matrices diagonales, et  $\underline{b}'_p(\underline{\alpha}_i) \neq 0$ , pour  $0 \leq i \leq p-1$  et  $\underline{a}'_p(\underline{\beta}_i) \neq 0$  pour  $1 \leq i \leq p$ .

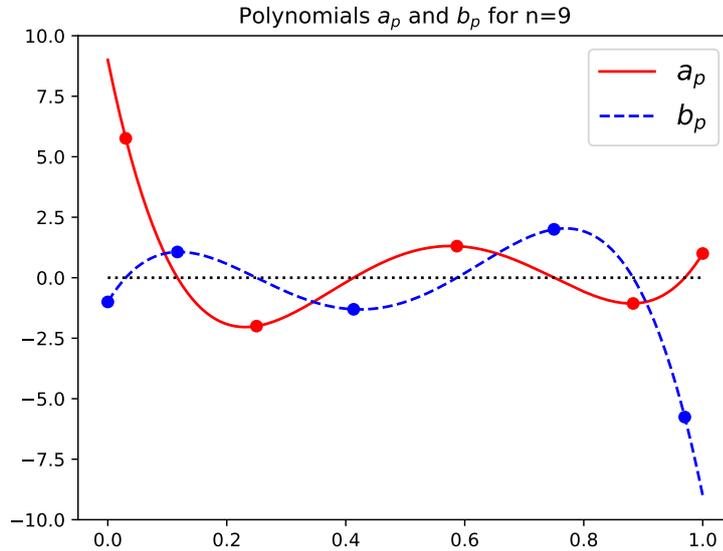


FIGURE 4.1 – Polynômes  $\underline{a}_p$  et  $\underline{b}_p$  introduits dans le Lemme 4.1, pour  $n = 9$ , et qui correspondent aux polynômes  $a_p$  et  $b_p$  des propriétés (4.3) et (4.4) pour  $f = 1$ . Les ronds bleus correspondent aux  $(\underline{\beta}_i)_{0 \leq i \leq p}$  (qui, mis à part  $\underline{\beta}_0$ , sont racines de  $\underline{a}_p$ ) et les ronds rouges aux  $(\underline{\alpha}_i)_{0 \leq i \leq p}$  (qui, mis à part  $\underline{\alpha}_p$ , sont racines de  $\underline{b}_p$ ).

## 4.4 Convergence de la méthode

La preuve de convergence s'appuie sur le théorème de point fixe de Picard. Il s'agit donc de trouver un fermé de  $I_p^2$  stable par l'opérateur  $G_h$  sur lequel celui-ci est contractant. On introduit alors le domaine

$$I_{p,\varepsilon} = \{(x_1, \dots, x_p) \in [\varepsilon, 1 - \varepsilon]^p : \varepsilon \leq x_i - x_{i-1} \text{ pour } 1 \leq i \leq p\}, \quad (4.18)$$

pour  $0 < \varepsilon \leq 1/(2p + 2)$  (afin que  $I_{p,\varepsilon}$  soit non vide). Remarquons que  $I_{p,2\varepsilon} \subset I_{p,\varepsilon}$  et que ces ensembles sont convexes. On peut alors montrer le lemme suivant

**Lemme 4.3.** *Soit  $f$  vérifiant (4.17),  $h \in [0, 1]$ , et  $0 < \varepsilon \leq 1/(2p + 2)$ . Alors il existe une constante  $C_{p,\varepsilon}^*$  indépendante de  $h$  telle que*

(i) *la matrice Jacobienne  $\nabla G_h$  vérifie*

$$\forall X \in (I_{p,\varepsilon})^2 \quad \|\nabla G_h(X)\| \leq C_{p,\varepsilon}^*(h + \|X - X^0\|), \quad (4.19)$$

(ii) *la dérivée de  $G_h$  par rapport à  $h$  vérifie*

$$\forall X \in (I_{p,\varepsilon})^2 \quad \|\partial_h G_h(X)\| \leq C_{p,\varepsilon}^*. \quad (4.20)$$

On choisit alors  $\varepsilon$  suffisamment petit pour que  $B(X^0, \varepsilon) \subset (I_{p,2\varepsilon})^2$ , (où  $B$  est la boule fermée pour la norme  $\|\cdot\|_{\ell^\infty}$ ), ce qui est assuré en prenant  $0 < \varepsilon \leq \min(1/(2p + 2), d^0/3)$ , où  $d^0$  est la distance minimale entre les composantes de  $X^0$ , et on pose  $h_0 = (2C_{p,\varepsilon}^*)^{-1} \min(\varepsilon, (1 + 2C_{p,\varepsilon}^*)^{-1})$ . On peut alors montrer que pour  $0 \leq h \leq h_0$  on a  $B(X^0, 2C_{p,\varepsilon}^*h) \subset B(X^0, \varepsilon)$ , que la boule fermée  $B(X^0, 2C_{p,\varepsilon}^*h)$  est stable par  $G_h$  et que  $\|\nabla G_h(X)\| \leq \frac{h}{2h_0}$  pour  $X \in B(X^0, 2C_{p,\varepsilon}^*h)$ .

Nous obtenons donc le résultat suivant, qui montre la convergence de l'algorithme lorsque  $m \rightarrow +\infty$  pour  $h$  fixé suffisamment petit, et à  $m \in \mathbb{N}$  fixé la convergence lorsque  $h \rightarrow 0$ .

**Théorème 4.2.** *Soit  $f$  vérifiant les hypothèses (4.17). Alors il existe  $h_0 > 0$  tel que pour tout  $0 \leq h \leq h_0$  on a les propriétés suivantes*

i) *La suite  $(X^m)_{m \geq 0}$  définie par l'algorithme 4.1 avec le point de départ  $X^0$  donné par (4.16) converge vers un point fixe  $X_h^\infty = (\alpha_0^\infty, \dots, \alpha_{p-1}^\infty; \beta_1^\infty, \dots, \beta_p^\infty)$  de  $G_h$ , dont les composantes sont distinctes et entrelacées.*

iii) *On a l'estimation d'erreur suivante*

$$\forall m \geq 0, \quad \|X_h^\infty - X^m\|_{\ell^\infty} \leq 2 \left( \frac{h}{2h_0} \right)^{m+1}. \quad (4.21)$$

Le Théorème 4.2 fournit alors comme corollaires immédiats

▷ l'existence d'un polynôme  $p_n^\infty \in \mathcal{P}_n^+$  interpolant  $f_h$  aux  $n - 1$  points de  $X_h^\infty$  ainsi qu'en 0 et en 1 :

$$p_n^\infty(hx) = xa_{p,h}^\infty(x)^2 + (1 - x)b_{p,h}^\infty(x)^2,$$

où  $a_{p,h}^\infty$  et  $b_{p,h}^\infty$  sont construits à partir des relations (4.7), (4.8) en utilisant  $(\alpha^\infty, \beta^\infty) = X_h^\infty$ ,

- ▷ un test de positivité pour  $p_n \in \mathcal{P}_n$  :  $p_n$  est positif sur  $[0, 1]$  si et seulement si  $p_n = p_n^\infty$ .
- ▷ une version locale du Théorème 4.1.

Finalement, afin d'estimer  $\|p_n^m - f_h\|_{L^\infty}$ , on introduit  $\tilde{p}_n^m \in \mathcal{P}_n$  le polynôme d'interpolation de  $f_h$  en  $0, \alpha_0^m, \beta_1^m, \dots, \alpha_{p-1}^m, \beta_p^m, 1$ . Le terme  $\|\tilde{p}_n^m - f_h\|_{L^\infty}$  peut être majoré à l'aide d'une estimation d'erreur d'interpolation standard (pour  $f$  suffisamment régulière), tandis que le terme  $\|p_n^m - \tilde{p}_n^m\|_{L^\infty}$  en utilisant l'équivalence dans  $\mathcal{P}_p$  des normes  $\|\cdot\|_{L^\infty}$  et  $\|p\| := \max_{0 \leq i \leq p-1} |p(\alpha_i^m)| + \max_{1 \leq i \leq p} |p(\beta_i^m)|$ . On obtient finalement le résultat suivant.

**Théorème 4.3.** *Soit  $f$  vérifiant les hypothèses (4.17), avec de plus  $f \in W^{q,\infty}([0, 1])$ , avec  $1 \leq q \leq n + 1$ , et soit  $h_0 > 0$  donné par le théorème 4.2. Alors pour tout  $0 \leq h \leq h_0$  et tout  $m \geq 0$ , le polynôme*

$$p_n^m(x) := x a_p^m(x)^2 + (1 - x) b_p^m(x)^2$$

vérifie

$$\|p_n^m - f_h\|_{L^\infty} \leq Ch^{\min(q, 2(m+1))} \tag{4.22}$$

où  $C$  est une constante dépendant de  $f$  et de  $n$ .

Remarquons que pour  $f$  suffisamment régulière, l'estimation de convergence (4.22) fournit un taux de convergence optimal, qui est  $h^{n+1}$ , pour un nombre d'itérations  $m = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$ .

## 4.5 Illustrations numériques

### Adaptations de l'algorithme

En théorie, l'application de l'algorithme (4.1) devraient se restreindre aux fonctions  $f$  vérifiant (4.17) (ce qui exclut les fonctions pouvant s'annuler sur  $[0, 1]$ ) et pour des valeurs de  $h$  suffisamment petites. En pratique, l'algorithme se révèle robuste et présente de bon résultats même pour  $h = 1$  et lorsque  $f$  est moins régulière (mais cependant bornée) ou non strictement positive, moyennant quelques adaptations :

- ▷ une troncature de  $f$  pour permettre d'utiliser l'algorithme avec des fonctions s'annulant et même prenant des valeurs négatives. On remplace pour cela  $f_h$  par  $\max(f_h, \varepsilon)$  pour un  $\varepsilon > 0$  dans les expressions (4.7) et (4.8).
- ▷ un rescaling du Jacobien, en remplaçant

$$J_p(X^0) = \sqrt{f(0)} \begin{pmatrix} D_\alpha & 0 \\ 0 & D_\beta \end{pmatrix} \quad \text{par} \quad J_{p,\varepsilon}(X^0) := \sqrt{\max(\max_{[0,1]} f, \varepsilon)} \begin{pmatrix} D_\alpha & 0 \\ 0 & D_\beta \end{pmatrix}$$

dans la définition de l'algorithme 4.1. Ce rescaling permet d'étendre l'algorithme pour des valeurs de  $h$  non nécessairement petites, et même pour  $h = 1$ .

- ▷ un opérateur de séparation des points  $S_{p,\varepsilon} : (\mathbb{R}^p)^2 \mapsto (I_{p,\varepsilon})^2$  (où  $I_{p,\varepsilon}$  est défini par (4.18), qui agit en projetant dans  $[0, 1]$ , réordonnant et écartant les composantes d'un vecteur. Cet opérateur est construit de façon à être inactif

sur les vecteurs de  $(I_{p,2\varepsilon})^2 : X \in (I_{p,2\varepsilon})^2 \Rightarrow S_{p,\varepsilon}X = X$ , et on choisit  $\varepsilon$  comme dans la preuve du Théorème 4.2, c'est-à-dire  $0 < \varepsilon \leq \min(1/(2p+2), d^0/3)$ . On remplace alors la relation (4.11) de l'algorithme 4.1 par

$$X^{m+1} = S_{p,\varepsilon}G_h(X^m). \quad (4.23)$$

Quelques exemples de l'utilisation de l'algorithme 4.1 et de ses adaptations sont présentés ci-dessous. On trouvera d'autres cas ainsi que des études de convergence dans [C5].

### Comparaison à un polynôme d'interpolation de Lagrange

La figure 4.5 présente une première illustration de l'algorithme sur la fonction  $f(x) = \frac{1}{1+25(2x-1)^2} - \frac{1}{27}$ , pour  $h = 1$  et avec un rescaling du Jacobien (mais ni troncature ni séparation), pour différentes valeurs de  $n$ . La comparaison avec un polynôme d'interpolation de Lagrange  $q_n$  avec points d'interpolation de Tchebychev (donnés par  $\xi_i = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{(2i+1)\pi}{2(n+1)}\right)$ , pour  $i = 0, \dots, n$ ) montre que l'erreur entre  $f$  et le polynôme  $q_n$  est plus faible que celle obtenue avec notre algorithme (pour  $n = 20$ ,  $\|f - q_n\| \simeq 1 \cdot 10^{-2}$  et après 5 itérations  $\|f - p_n^5\| \simeq 4 \cdot 10^{-2}$ , erreur qui diminue assez peu pour plus d'itérations), mais visuellement le polynôme positif obtenu par notre algorithme présente moins d'oscillations que le polynôme d'interpolation de Tchebychev (et on voit par ailleurs que ce dernier prend des valeurs négatives pour  $n = 14$ ).

Une façon "naïve" d'obtenir un polynôme d'interpolation de  $\mathcal{P}_n^+$  d'une fonction  $f$  positive ou nulle pourrait être de considérer un polynôme d'interpolation de  $\sqrt{f}$  et de poser ensuite

$$\hat{p}_n = (I_p(\sqrt{f}))^2, \quad p = \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor.$$

La figure 4.3 montre la comparaison entre  $\hat{p}_n$  et  $p_n^m$  fournit par l'Algorithme 4.11, pour  $f(x) = \frac{1}{1+25(2x-1)^2}$  et  $n = 10$ . Sans surprise, l'approximation par  $p_n^m$  (utilisant 11 points) est plus précise que celle donnée par  $\hat{p}_n$  qui n'utilise que 6 points d'interpolation. Cependant, elle semble légèrement moins précise que celle donnée par  $\hat{p}_{2n}$  qui utilise 11 points d'interpolation (mais qui est de degré 20).

### Application à un polynôme

On considère ici le polynôme  $q_\lambda \in \mathcal{P}_6$  donné par

$$q_\lambda(x) = 10(x - 1/2)^6 + \lambda \quad (4.24)$$

pour  $n = 6$ . Pour  $\lambda = 10^{-2}$ , on observe une convergence de la suite  $(p_n^m)_{m \geq 0}$  vers  $q_\lambda$  ( $\|p_n^m - q_\lambda\| \sim 3 \cdot 10^{-2}$  pour  $m = 0$ ,  $\|p_n^m - q_\lambda\| \sim 1 \cdot 10^{-3}$  pour  $m = 3$ , et  $\|p_n^m - q_\lambda\| \sim 1 \cdot 10^{-15}$  pour  $m = 40$ ), ce qui illustre la propriété de certificat de positivité de l'algorithme. Pour  $\lambda = 0$ , l'algorithme (sans troncature) produit également une bonne approximation de  $f$ , même si la convergence est plus lente vers  $q_\lambda$  ( $\|p_n^m - q_\lambda\| \sim 1 \cdot 10^{-2}$  pour  $m = 3$ ,  $\|p_n^m - q_\lambda\| \sim 7 \cdot 10^{-4}$  pour  $m = 40$ , et  $\|p_n^m - q_\lambda\| \sim 3 \cdot 10^{-6}$  pour  $m = 1000$ ). Pour  $\lambda = -10^{-2}$ , il faut cette fois utiliser l'algorithme avec troncature (avec ici  $\varepsilon = 10^{-5}$ ), qui fournit une bonne approximation de  $\max(q_\lambda, \varepsilon)$  :  $\|p_n^m - \max(\varepsilon, q_\lambda)\| \sim 1.2 \cdot 10^{-2}$  pour  $m = 3$ ,  $\|p_n^m - \max(\varepsilon, q_\lambda)\| \sim 5 \cdot 10^{-3}$  pour  $m = 5$ . La figure 4.4 illustre ces trois cas test.

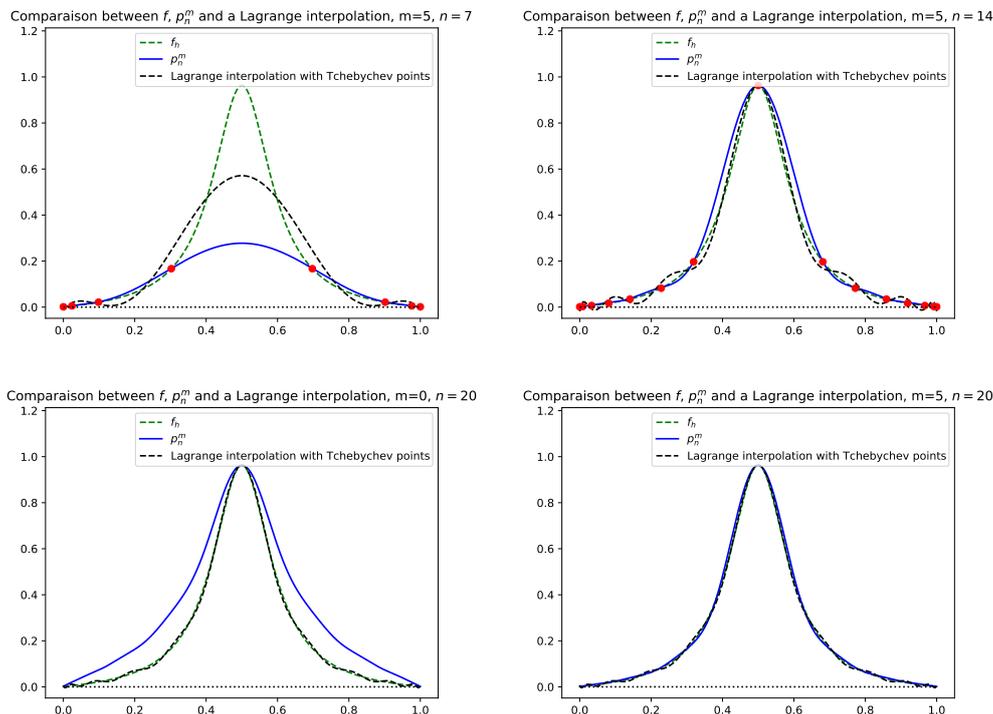


FIGURE 4.2 – Comparaison entre la fonction  $f(x) = \frac{1}{1+25(2x-1)^2} - \frac{1}{27}$ , le polynôme  $p_n^m$  et le polynôme d'interpolation de Lagrange avec points de Tchebychev de même degré. En haut pour 5 itérations, avec  $n = 7$  (gauche) et  $n = 14$  (droite). Les points rouges correspondent aux valeurs  $(\alpha_i, f(\alpha_i))$  et  $(\beta_i, f(\beta_i))$ , pour  $0 \leq i \leq p$ . En bas : pour  $n = 20$ , avec 0 itérations (à gauche) et  $m = 5$  itérations (à droite).

## 4.6 Perspectives

Le travail initié dans [C5] a été poursuivi durant le post-doc de Maxime Herda au LJLL. Dans [C6] (que je détaille pas dans ce manuscrit), un algorithme de projection est développé permettant, partant de deux polynômes positifs approchant  $f$  et  $1-f$  (obtenus en pratique par l'algorithme introduit dans [C5]), d'obtenir un polynôme borné entre 0 et 1 approchant une fonction  $f$ . Notre objectif est maintenant d'utiliser les algorithmes introduits dans [C5], [C6], ou celui de [75] (qui a l'avantage de produire un polynôme d'approximation positif à partir de points fixes, mais qui est peut-être plus coûteux) afin d'améliorer la stabilité des schémas numériques pour les EDP.

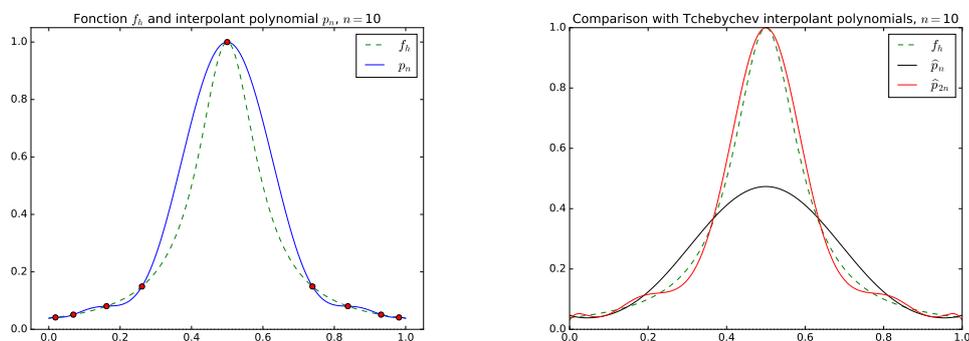


FIGURE 4.3 – Approximation de  $f(x) = \frac{1}{1+25(2x-1)^2}$  par deux polynômes positifs de degré 10. A gauche : le polynôme obtenu par itérations de l’algorithme 4.1. A droite :  $\hat{p}_n$  et  $\hat{p}_{2n}$  obtenus en prenant la racine d’un polynôme d’interpolation avec points de Tchebychev, avec 6 et 11 points respectivement.

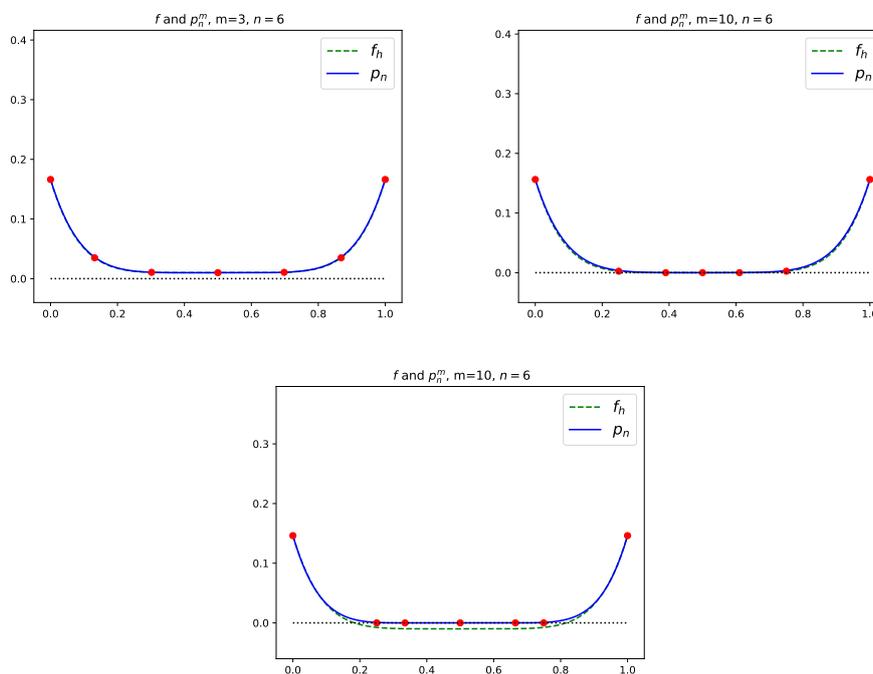


FIGURE 4.4 – Application de l’algorithme 4.1 pour  $n = 6$  à un polynôme de degré 6, à gauche pour  $q(x) = 10(x - 1/2)^6 + 0.01$ , au centre pour  $q(x) = 10(x - 1/2)^6$ , et à droite pour  $q(x) = 10(x - 1/2)^6 - 0.01$  (algorithme avec troncature).



# Summary

This summary is a brief description of my research, which is mostly in the field of partial differential equations of kinetic type arising in plasma and rarefied gases physics.

The kinetic theory, introduced by Maxwell and Boltzmann, allows to describe at a mesoscopic scale (intermediate between microscopic and macroscopic) the evolution of molecules constituting a gas or a plasma (or more generally of particles of a certain species : ions, electrons, dust ...) by a density function  $f := f(t, x, v) \geq 0$ . For  $(\Omega_x, \Omega_v) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ , the quantity  $\int_{\Omega_x} \int_{\Omega_v} f(t, x, v) dx dv$  corresponds to the number of molecules whose position at time  $t$  is in  $\Omega_x$  and the velocity in  $\Omega_v$ . This kinetic description is more adequate than a fluid description when the density is far from a Maxwellian, which corresponds to the thermodynamic equilibrium of the gas. We will be interested here in Vlasov equations

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \mathcal{F} \cdot \nabla_v f = 0, \quad (4.25)$$

in which  $\mathcal{F} = \mathcal{F}(t, x, v)$  corresponds to a force (which may also depend on  $f$ , as in the case of Vlasov-Poisson or Vlasov-Maxwell systems) or Boltzmann-type equations for one or more species

$$\partial_t f_i + v \cdot \nabla_x f_i = \sum_j \mathcal{Q}_{i,j}(f_i, f_j), \quad \text{for } i = 1, 2, \dots \quad (4.26)$$

where  $\mathcal{Q}_{i,j}(f_i, f_j)$  are operators modeling interactions between elements, called collisions.

## Chapter 1. Lagrangian and semi-Lagrangian numerical methods for transport equations

In the first chapter, we place ourselves in the somewhat more general framework of transport equations and analyse Lagrangian and semi-Lagrangian numerical methods. The common feature of these methods is to follow the characteristic flow of the equation : the forward flow of a conservation equation in the case of standard particle methods, and the backward flow with mesh reconstruction of an advection equation in the case of backward semi-Lagrangian methods. These methods have been widely developed in plasma physics, in particular for the simulation of the Vlasov-Poisson equation. I analysed the convergence of some of these methods, especially for the Vlasov-Poisson equation 1d-1v.

The first one is the semi-Lagrangian method, for which I have shown with B. Després and M. Mehrenberger an improved error estimate for some interpolation schemes. The idea developed in [C11] is to use a Lagrange interpolation on

regular meshes and to re-interpret the semi-Lagrangian scheme as a finite-difference scheme, and estimate the stability and troncation errors instead of the interpolation error. For the linear 1-d advection equation

$$\partial_t \rho + a \partial_x \rho = 0, \quad \rho(0, x) = \rho_{\text{ini}}(x)$$

with  $a > 0$ , we introduce a Cartesian regular discretization  $(x_i)_{i \in \mathbb{Z}} = (i\Delta x)_{i \in \mathbb{Z}}$  and a time step  $\Delta t$ , and we considere the semi-Lagrangian scheme defined by

$$\rho_i^{n+1} = \tilde{\rho}^n(x_i - a\Delta t), \quad (4.27)$$

where  $\tilde{\rho}^n$  is a continuous function obtained by piecewise interpolation of  $p + 1$  points of the values  $\rho^n = (\rho_i^n)_{i \in \mathbb{Z}}$ . We introduce  $r = \lfloor -a\frac{\Delta t}{\Delta x} \rfloor \leq -1$  such that  $x_i - a\Delta t \in [x_{i+r}, x_{i+r+1}[$  and  $k \in \mathbb{Z}$  the stencil offset such that the expression of  $\tilde{\rho}^n$  on  $[x_{i+r+1+k-p}, x_{i+r+1+k}]$  is obtained by Lagrange interpolation of the values  $\rho_{i+r+1+k-p}^n, \dots, \rho_{i+r+1+k}^n$ . Assuming that  $p \in \{2k, 2k + 1, 2k + 2\}$ , we prove the following error estimate

$$\max_{0 \leq n \leq T/\Delta t} \|e^n\|_{\ell^2} \leq D_{k,p} T \|\rho_{\text{ini}}^{(p+1)}\|_{L^2(\mathbb{R})} \left(1 - \frac{a\Delta s}{\Delta x}\right) \frac{a\Delta s}{\Delta t} \Delta x^p. \quad (4.28)$$

where  $\Delta s := (r + 1)\frac{\Delta x}{a} + \Delta t \leq \min(\Delta t, \frac{\Delta x}{a})$ . We then apply this result to the 1d-1v Vlasov-Poisson equation.

**Théorème 4.4.** *Consider the Vlasov-Poisson equation*

$$\frac{\partial f}{\partial v} + v \frac{\partial f}{\partial x} + E(t, x) \frac{\partial f}{\partial v} = 0, \quad (4.29)$$

with  $f(0, \cdot, \cdot) = f_{\text{ini}}$  compactly supported in  $v$ , and periodic in  $x$ , and

$$\frac{\partial E}{\partial x}(t, x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t, x, v) dv - 1, \quad (4.30)$$

where  $f(t, x, v)$  is the distribution function of charged particles (ions or electrons) and  $E(t, x)$  the self-consistent electric field. We consider periodic boundary conditions on the variable  $x \in [0, 1]$ , that is

$$f(t, 0, v) = f(t, L, v), \quad v \in \mathbb{R}, \quad t \geq 0, \quad E(t, 0) = E(t, L). \quad (4.31)$$

Assume the exact solution is sufficiently smooth and has compact support. Consider a semi-lagrangian scheme of order  $p$  direction by direction for the discretization of (4.29)–(4.31) with Strang's splitting in time. Assume the grid is such that  $\Delta v = \alpha \Delta x$  is proportional to  $\Delta x$ ,  $\alpha$  kept constant. Assume  $n\Delta t \leq T$ .

It follows that there exists a constant  $C > 0$  which depends on  $T$ , on the regularity of the solution and of the parameters of the problem such that the numerical error  $e^n = f^n - f(t_n)$  is bounded in the  $L^2$  norm by

$$\|e^n\|_{L^2} \leq C \left( \min\left(\frac{\Delta x}{\Delta t}, 1\right) \Delta x^p + \Delta t^2 \right). \quad (4.32)$$

The error estimate (4.32) is an improvement of the one obtained in [18], which is in  $O\left(\Delta t^2 + \Delta x^{p+1} + \frac{\Delta x^{p+1}}{\Delta t}\right)$ .

A well-known drawback of the semi-Lagrangian method is that it is quite costly in terms of CPU time because of the interpolations at each time step, and for large phase space simulations, particle methods are often preferred. These methods are simple to implement, robust and preserve important physical quantities. However, their strong convergence is only possible under a rather restrictive condition, which results in practice in non physical oscillations in the reconstructed solution. In collaboration with M. Campos-Pinto, I have analyzed the convergence of an improved particle method that he developed, the Linearly Transformed Particle (LTP) method, on the Vlasov-Poisson 1d1v equation in [C3]. The principle of this method is based on a local deformation of the shape functions of the particles. At each time step  $t^n$ , a local linearization of the exact flow  $F^{t^n, t^{n+1}}$  between  $t^n$  and  $t^{n+1}$  around the positions of the particles in the phase space  $(z_k^n = (x_k^n, v_k^n))_{k \in \mathbb{Z}^2}$  is introduced

$$F_{h,k}^{n,n+1} : z \rightarrow z_k^n + J_k^{n,n+1}(z - z_k^n),$$

where  $J_k^{n,n+1}$  is an approximation of the Jacobien matrix of the flow between  $t^n$  and  $t^{n+1}$ . We begin with an approximation of the initial density on the form

$$f_h^0(z) = \sum_k \omega_k \varphi_{h,k}(z), \quad \varphi_{h,k}(z) = \varphi_h(z - z_k^0),$$

where  $z = (x, v)$  is the variable of the phase space,  $\varphi_h$  a smooth and compactly supported approximation of a Dirac mass. An approximation at time  $t^{n+1}$  is given by

$$f_h^{n+1}(z) = \sum_k \omega_k \varphi_{h,k}^{n+1}(z),$$

where the shape function  $\varphi_{h,k}^{n+1}$  is obtained by the transport of  $\varphi_{h,k}^n$  by the linearized flow :

$$\varphi_{h,k}^{n+1}(z) = \varphi_{h,k}^n \left( (F_{h,k}^{n,n+1})^{-1}(z) \right).$$

We use also a Strang's splitting in time. We obtain the following Theorem for the discretization of problem (4.29)–(4.31) with the LTP method.

**Théorème 4.5.** *Provided  $\Delta t \lesssim \sqrt{h}$ , the particle centers  $z_k^n$  approximate the exact trajectories according to the estimate*

$$\sup_{0 \leq n \leq T/\Delta t} \sup_k \|z_k^n - F^{0,t^n}(z_k^0)\| \leq C_T (h^2 + \Delta t^2),$$

and the LTP approximation of the phase space density satisfies

$$\|f_h^n - f_{\text{ex}}^n\|_{L^\infty(\mathbb{R}^2)} \leq C_T \left( h + \frac{\Delta t^2}{h} \right).$$

We here obtain a strong convergence for the approximated density, and gain one order of convergence for the particle trajectories (and also for the electric field) compared to a standard smooth particle method [50].

Then, in collaboration with J.A Carrillo and Y-P Choi, we applied and analyzed the above LTP method for the aggregation equation

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\mathbf{u}\rho) = 0, & \rho(0, \cdot) = \rho^0, & x \in \mathbb{R}^d, t \in \mathbb{R}^+ \\ \mathbf{u}(t, x) = -(\nabla_x W \star \rho(t))(x) \end{cases} \quad (4.33)$$

where  $W : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  is an interaction potential, either smooth ( $\nabla W \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d)$ ) or singular ( $\nabla W \in W_{\text{loc}}^{1,q}(\mathbb{R}^d)$ ). With an additional assumption in the case of the singular potential and appropriate assumptions on the initial density  $\rho^0$ , one can obtain a Lipschitz velocity field. The equation (4.33) is under a conservative form; then the transported shape functions at time  $t^{n+1}$  are now the push-forward of the ones at time  $t^n$  by the linearized flow around  $x_k^n$

$$\varphi_{h,k}^{n+1}(z) = \det((J_k^{n,n+1})^{-1}) \varphi_{h,k}^n((F_{h,k}^{n,n+1})^{-1}(z))$$

We obtain the following results.

**Théorème 4.6.** *Assume  $\Delta t = O(h)$ . If  $\rho^0 \in W^{1,1}(\mathbb{R}^d)$ ,  $\rho^0 \geq 0$  and  $\nabla W \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d)$  then*

$$\max_{0 \leq n \leq N} \|\rho(t_n) - \rho_h^n\|_{L^1} \leq C \left( \|\rho^0 - \rho_h^0\|_{L^1} + h + \frac{\Delta t}{h} \right)$$

with a constant  $C$  depending only on  $d, T, \|\nabla W\|_{W^{1,\infty}}$  and  $\|\rho^0\|_{W^{1,1}}$ . Moreover if  $\rho^0 \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$  we also have convergence in  $L^\infty$  norm :

$$\max_{0 \leq n \leq N} \|\rho(t_n) - \rho_h^n\|_{L^\infty} \leq C \left( \|\rho^0 - \rho_h^0\|_{L^\infty} + \|\rho^0 - \rho_h^0\|_{L^1} + h + \frac{\Delta t}{h} \right).$$

**Théorème 4.7.** *Assume that  $W \in W_{\text{loc}}^{1,q}(\mathbb{R}^d)$  and satisfy the following assumptions*

$$|\nabla W(x)| \leq \frac{C}{|x|^\alpha}, \quad |D^2 W(x)| \leq \frac{C}{|x|^{\alpha+1}}.$$

Assume in addition that  $\Delta t \lesssim h^2 \leq 1$ . If  $\rho^0 \in W^{2,p}(\mathbb{R}^d)$ , with  $1/p + 1/q = 1$ , and  $\rho$  a solution of (4.33) well defined on  $[0, T]$  and such that  $\rho \in L^\infty(0, T; (W^{1,1} \cap W^{1,p} \cap L^\infty)(\mathbb{R}^d))$ , then

$$\sup_{0 < h \leq h_*} \sup_{0 \leq n \leq N} \|\rho_h^n - \rho^n\| \leq Ch.$$

hold for  $h \leq h_*$  and a constant  $C$  independant of  $h$  and  $\Delta t$ .

Notice the constraint between  $h$  and  $\Delta t$  in the Theorems 4.6 and 4.7 to obtain convergence. However, the use of a higher order time scheme for the discretization of particle trajectories should perhaps be able to weaken this constraint.

Finally, still with M. Campos-Pinto, we propose and analyze in [C4] another method, hybrid between a semi-Lagrangian backward method and a particle method. Since the deformation of shape functions in the LTP method could lead to a loss of locality on the reconstruction, we introduce a global approximation of the backward flow, using the local linearizations around the particles and a partition of unity. We can also introduce higher order approximations of the backward flow by using higher orders asymptotic development around the particles. We study this method on an advectiv equation for a passiv flow, and we prove a gain of an order of convergence in space compared to the LTP method.

**Théorème 4.8.** *Assume that  $\rho^0 \in W^{1,\infty}$  and that the exact forward and backward flows  $F^{0,t_n}$  et  $F^{t_n,0}$  belong to  $W^{2,\infty}(\mathbb{R}^d)$ . Then there exists  $h^*$  such that the following estimate for the order 1 FBL approximation*

$$\|\rho_{h,\text{FBL}}^n - \rho_{\text{ex}}^n\|_{L^\infty} \leq C_{1,n} h^2, \quad (4.34)$$

*holds for  $h \leq h^*$ , where  $C_{1,n}$  is a constant depending only on  $|\rho^0|_{W^{1,\infty}}$ , and  $|F^{0,t_n}|_{W^{1,\infty}}$  and  $|F^{t_n,0}|_{W^{2,\infty}}$ . Moreover, if  $F^{0,t_n}$  and  $F^{t_n,0}$  belong to  $W^{3,\infty}(\mathbb{R}^d)$ , then the second order approximation satisfy*

$$\|\rho_{h,\text{FBL}}^n - \rho_{\text{ex}}^n\|_{L^\infty} \leq C_{2,n} h^3, \quad (4.35)$$

*where  $C_{2,n}$  is a constant depending only on the dimension  $d$ ,  $|\rho^0|_{W^{1,\infty}}$ ,  $|F^{0,t_n}|_{W^{2,\infty}}$  and  $|F^{t_n,0}|_{W^{3,\infty}}$ .*

Notice the gain of order one in the convergence estimates compared to the LTP method. Indeed, the error estimate now involve the Lipschitz norm of the initial density, whereas the error estimate in LTP method involve the Lipschitz norm of the shape function  $\varphi_h$ , which leads to a loss of  $h$ . Moreover, the gain in order of convergence does not require a higher regularity of the solution (and thus of the initial condition) as is the case for semi-Lagrangian methods. Moreover, we show that the regularity of the approximated solution is preserved.

**Théorème 4.9.** *Under the same hypotheses as Theorem 1.7, the FBL reconstruction at order  $r \in \{1, 2\}$  satisfies*

$$\|\rho_{h,\text{FBL}}^n\|_{W^{q,\infty}} \leq C \|\rho^0\|_{W^{q,\infty}}, \quad \text{for } 1 \leq q \leq r + 1$$

*where  $C$  is a constant depending on the regularity of the forward and backward flow, but not on  $h$ .*

In practice, the FBL method brings a gain of precision, and for long time simulations less remappings than for the LTP method are needed.

## Chapter 2. Kinetic models of gas-particle flows

Chapter 2 deals with a subject I have been interested in since my PhD, the purely kinetic modeling of gas-particle flows. Many spray models for gas-particle mixtures exist, but most of the time the gas is described by fluid equations, i.e. for the macroscopic quantities of the fluid. However, these models do not accurately describe gases that are not at thermodynamic equilibrium, as it can be the case for rarefied gases.

The first model I worked on, in collaboration with S. Dellacherie, L. Desvillettes and J. Segré, is a coupling of two Boltzmann-type equations for the densities  $F$  and  $f$  of particles and molecules respectively, with collision operators describing interactions between gas and particles.

One possibility is to consider elastic collision operators similar to those arising in gas mixtures [42, 118]; for these operators the mass, the momentum as well as the total kinetic energy are preserved, and an entropy plays the role of a Lyapounov function of the model. Thanks to these properties and following the approach of

[40], we prove in [C8] an existence result for the space-homogeneous system , when the operators have hard sphere collision sections.

The other collisional approach that we developed in [C8, C10] is based on the hypothesis of diffuse reflection (at a fixed temperature  $T_p$ ) of the molecules on the surface of the particles, which is more adapted to take into account the macroscopic character of the particles compared to the gas molecules. Collisions are inelastic, but we assume that the total momentum is conserved. We also assume that the collisional cross-section is a hard sphere cross-section, that we denote

$$\zeta(v - w, n) := [n \cdot (v - w)] \mathbb{1}_{\{n \cdot (v-w) \geq 0\}}. \quad (4.36)$$

Under these hypotheses, we have established in [C8] the expressions of the collision operators denoted  $\mathcal{D}(F, f)$  and  $\mathcal{R}(F, f)$ .

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(F, f)(v) = \sigma_{gp} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{S}} \left[ F(v') f(w') e^{\frac{\tilde{\beta}^2 |v' - w'|^2}{2T_p}} - F(v) f(w) e^{\frac{\tilde{\beta}^2 |v - w|^2}{2T_p}} \right] \\ \times e^{-\frac{\tilde{\beta}^2 |v - w|^2}{2T_p}} \zeta(v - w, n) h_n(z) dn dz dw \end{aligned} \quad (4.37)$$

and

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(F, f)(w) = \sigma_{gp} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{S}} \left[ F(v') f(w') e^{\frac{\tilde{\beta}^2 |v' - w'|^2}{2T_p}} - F(v) f(w) e^{\frac{\tilde{\beta}^2 |v - w|^2}{2T_p}} \right] \\ \times e^{-\frac{\tilde{\beta}^2 |v - w|^2}{2T_p}} \zeta(v - w, n) h_n(z) dn dz dv \end{aligned} \quad (4.38)$$

with  $(v', w')$  given by

$$\begin{cases} v' = \frac{v + \varepsilon w}{1 + \varepsilon} - \frac{\varepsilon}{1 + \varepsilon} z, \\ w' = \frac{v + \varepsilon w}{1 + \varepsilon} + \frac{1}{1 + \varepsilon} z, \end{cases} \quad (4.39)$$

where  $\varepsilon$  is the mass ratio between a gas molecule and a particle. The function  $h_n$ , given by

$$h_n(z) := \frac{1}{2\pi} \frac{\tilde{\beta}^4}{T_p^2} (n \cdot z) e^{-\frac{\tilde{\beta}^2 |z|^2}{2T_p}} \mathbb{1}_{\{n \cdot v \geq 0\}}, \quad \tilde{\beta} := \sqrt{\frac{m_g}{k_B}}. \quad (4.40)$$

can be seen as the probability density of of the post-collisional relative velocity. We can also establish a weak form of these operators, and a non-positive entropy dissipation function. We then derived an asymptotic model by letting the mass ratio between a gas molecule and a particle go to 0. In this asymptotic model, the evolution of the density of particles is described by the Vlasov equation

$$\frac{\partial F}{\partial t} + v \cdot \nabla_x F + \nabla_v (a(f)F) = 0 \quad (4.41)$$

where

$$a(f)(t, x, v) = \pi \sigma_{gp} \int_{\mathbb{R}^3} \left( |w - v| + \frac{\sqrt{2\pi T_p}}{3\tilde{\beta}} \right) (w - v) f(t, x, w) dw \quad (4.42)$$

can be interpreted as a drag force exerted by the gas on the particles. This term has some similarities with existing models of drag force, such as Otterman and Levinet's formula [113] (for a two-phase fluid model) ; but unlike the models of [113] or [59], no

term or constant is empiric here. This asymptotic model is particularly interesting for numerical simulation purposes, the discretization of the operator  $\mathcal{D}(F, f)$  being very costly [C8].

In [C15], I have considered with F. Salvarani the study of such flows from a rather different point of view. The interaction between the gas and the particles (in finite number) is modeled by considering a moving domain, free transport equation (including the boundary with the particles and the boundary of the domain). The boundary condition on the particle surface, describing the influence of the particles on the gas, is again a diffuse reflection. This leads to the study of an initial-boundary value problem in a moving domain, for which we prove the existence of solutions. We also performed some numerical simulations 2d-2v, for spherical or elliptical particles with a translation and a rotation velocity. The code is based on a particle method, but we do not use a DSMC method. The diffuse reflection condition is computed in a probabilistic way, but we determine the molecules interacting with the particles and of the positions of the interactions with a deterministic implementation.

### Chapter 3. Models from plasma physics

Among the many models arising in the physics of magnetized plasmas, the complete Vlasov-Maxwell model is a very costly model from a numerical point of view, because it takes into account all the details and scales of magneto-hydrodynamics; whereas the Vlasov-Poisson model does not take into account the evolution of the induced magnetic field. In collaboration with B. Després, B. Perthame and R. Sentis, we propose in [C12] a simplified model that allows to take into account the Hall effect from the Maxwell equations. It consists in keeping the accuracy of the kinetic description for ions and in describing the evolution of the number density of electrons by a non-linear Poisson equation, resulting from a low mass approximation between an electron and an ion. The evolution of the electromagnetic field is described by an equation integrating the Joules effect as well as the Hall effect. The model finally writes

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f + \nabla_v \cdot \left[ \left( -\nabla \ln n_e + \frac{\text{rot} \mathbf{B} - n_I \mathbf{u}_I}{n_e} \wedge \mathbf{B} + v \wedge \mathbf{B} \right) f \right] = 0, \\ -\lambda^2 \Delta \ln n_e = n_I - n_e, \\ \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} - \text{rot} \left( \frac{n_I \mathbf{u}_I}{n_e} \wedge \mathbf{B} \right) + \text{rot} \left( \frac{\text{rot} \mathbf{B}}{n_e} \wedge \mathbf{B} \right) + \text{rot} (\eta \text{rot} \mathbf{B}) = 0 \\ \text{div} \mathbf{B} = 0. \end{array} \right. \quad (4.43)$$

for  $t \in \mathbb{R}^+$ ,  $v \in \mathbb{R}^3$  and  $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$ , a bounded and regular domain of  $\mathbb{R}^3$ , with the following boundary conditions

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{n}_x \cdot \nabla_x n_e(t, x) = 0 \\ \mathbf{n}_x \wedge \mathbf{B}(t, x) = 0 \\ f(t, x, v - 2(v \cdot \mathbf{n}_x) \mathbf{n}_x) = f(t, x, v) \end{array} \right. \quad \text{for } x \in \partial\Omega \quad (4.44)$$

and initial conditions  $f(0, \cdot, \cdot) = f^{\text{ini}}$ ,  $\mathbf{B}(0, \cdot) = \mathbf{B}^{\text{ini}}$ . An energy balance and a priori estimates on the densities  $n_I$  and  $n_e$  allow us to show, thanks to an averaging

Lemma [116] and arguments of space-time compactness, the weak stability of this model.

I was also interested in [C9] in a coupling of two Boltzmann-type equations in the context of fusion plasmas, in which integral operators describe fusion reactions between Deuterium and Tritium ions. In collaboration with S. Dellacherie, we have proposed and implemented a particle numerical method for the numerical simulation of this model, with Monte-Carlo simulation of the fusion operators. We also introduce an approximated model, which is numerically less costly for the simulation of the  $\alpha$  particle production.

## Chapter 4. A method of approximation by positive polynomials

Finally, the last chapter discuss a theme on which I began working more recently, in collaboration with B. Després and M. Campos-Pinto. It concerns the computation of a positive polynomial approximating a given function, and is consistent with the rest of this summary since the main motivation for this work is its application to scientific computation and numerical analysis of PDEs. The algorithm we propose in [C5] is based on the search for a positive polynomial  $p_n$  of degree less than or equal to  $n$  over the interval  $[0,1]$ , written as

$$p_n(x) = \omega_1(x)a(x)^2 + \omega_2(x)b(x)^2,$$

with  $(\omega_1(x), \omega_2(x) = (x, 1-x)$  or  $(\omega_1(x), \omega_2(x) = (1, x(1-x))$ , following the parity of  $n$ , and which interpolates in  $n+1$  points a given function  $f$ . The starting idea is to notice that if  $\alpha \in (0,1)$  is a root of the polynomial  $b$  and  $a(\alpha)^2 = \frac{f(\alpha)}{\omega_1(\alpha)}$ , then  $p_n$  interpolates the function  $f$  at  $\alpha$ . This brings us back to the search for a vector of  $]0, 1[^{n-1}$ , solution of a certain non-linear system, which will constitute (with the points 0 and 1) a vector of interpolation points of  $f$ . We propose a modified Newton-Raphson point-type algorithm to construct a sequence of sliding and interlaced interpolation points, from which we obtain a sequence of positive polynomials  $(p_n^m)_{m \geq 0}$ . To study the convergence of this method, we introduce a localization parameter  $0 < h \leq 1$  and consider the problem of interpolating  $f$  on subintervals of size  $h$ . We establish the convergence of the algorithm together with an a priori convergence estimate, under the assumption that  $h$  is small enough. We also provide a convergence estimate for the resulting positive polynomial approximation.

**Théorème 4.10.** *Let  $f \in W^{q,\infty}(]0,1[)$ , with  $1 \leq q \leq n+1$ , and assume  $\inf_{x \in [0,1]} f(x) > 0$ . Then there exists  $h_0 > 0$  such that for all  $0 \leq h \leq h_0$  and all  $m \geq 0$ , the polynomial  $p_n^m$  satisfy*

$$\|p_n^m - f_h\|_\infty \leq Ch^{\min(q, 2(m+1))} \quad (4.45)$$

where  $f_h(x) = f(hx)$  and  $C$  is a constant depending of  $f$  and  $n$ .

Note that for smooth functions the convergence estimate (4.45) yields an optimal rate, namely,  $h^{n+1}$ , for a number of iterations  $m = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$ .

# Bibliographie

- [1] R. ALEXANDRE et C. VILLANI : On the Boltzmann equation for long-range interactions and the Landau approximation in plasma physics. *Comm. Pure Appl. Math.*, 55(1):30–70, 2002.
- [2] G. ALLAIRE, X. BLANC, B. DESPRES et F. GOLSE : *Transport et diffusion*. Editions de l'Ecole de polytechnique, 2018.
- [3] L. ARKERYD et A. NOURI : Boltzmann asymptotics with diffuse reflection boundary conditions. *Monatshefte für Mathematik*, 123(4):285–298, 1997.
- [4] A. A. ARSENEV : Existence in the large of a weak solution to the Vlasov system of equations. *ZVMMF*, 15:136–147, 1975.
- [5] K. ASANO et S. UKAI : On the Vlasov-Poisson limit of the Vlasov-Maxwell equation. *In Studies in Mathematics and Its Applications*, vol. 18, p. 369–383. Elsevier, 1986.
- [6] M. BADSI et M. HERDA : Modelling and simulating a multispecies plasma. *ESAIM : Proceedings and Surveys*, 53:22–37, 2016.
- [7] C. BARDOS et P. DEGOND : Global existence for the Vlasov-Poisson equation in 3 space variables with small initial data. *In Annales de l'Institut Henri Poincaré (C) Non Linear Analysis*, vol. 2, p. 101–118. Elsevier, 1985.
- [8] A. BARRAT, E. TRIZAC et M. H. ERNST : Granular gases : dynamics and collective effects. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 17(24):S2429, 2005.
- [9] J. T. BEALE : On the accuracy of vortex methods at large times. *In Computational Fluid Dynamics and Reacting Gas Flows*, p. 19–32. Springer, 1988.
- [10] D. BENEDETTO, E. CAGLIOTI et M. PULVIRENTI : A kinetic equation for granular media. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 31(5):615–641, 1997.
- [11] M. BERGDORF, G.-H. COTTET et P. KOUMOUTSAKOS : Multilevel adaptive particle methods for convection-diffusion equations. *Multiscale Modeling & Simulation*, 4(1):328–357, 2005.
- [12] M. BERGDORF et P. KOUMOUTSAKOS : A Lagrangian particle-wavelet method. *Multiscale Modeling & Simulation*, 5(3):980–995, 2006.
- [13] E. BERNARD, L. DESVILLETES, F. GOLSE et V. RICCI : A derivation of the Vlasov-Navier-Stokes model for aerosol flows from kinetic theory. *Communications in Mathematical Sciences*, 15(5):1703–1741, 2017.
- [14] E. BERNARD, L. DESVILLETES, F. GOLSE et V. RICCI : A derivation of the Vlasov-Stokes system for aerosol flows from the kinetic theory of binary gas mixtures. *Kinetic and Related Models*, 11(1):43–69, 2018.

- 
- [15] A. L. BERTOZZI, J. A. CARRILLO et T. LAURENT : Blow-up in multidimensional aggregation equations with mildly singular interaction kernels. *Nonlinearity*, 22(3):683, 2009.
- [16] A. L. BERTOZZI, T. LAURENT et J. ROSADO :  $L^p$  theory for the multidimensional aggregation equation. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 64(1):45–83, 2011.
- [17] N. BESSE : Convergence of a semi-Lagrangian scheme for the one-dimensional Vlasov-Poisson system. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 42(1):350–382, 2004.
- [18] N. BESSE et M. MEHRENBERGER : Convergence of classes of high-order semi-Lagrangian schemes for the Vlasov-Poisson system. *Mathematics of computation*, 77(261):93–123, 2008.
- [19] G. A. BIRD et J. BRADY : *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*, vol. 5. Clarendon press Oxford, 1994.
- [20] C. K. BIRDSALL et A. B. LANGDON : *Plasma physics via computer simulation*. CRC press, 2004.
- [21] M. BISI, M. GROPPi et G. SPIGA : Kinetic problems in rarefied gas mixtures. *In AIP Conference Proceedings*, vol. 1084, p. 87–92. American Institute of Physics, 2008.
- [22] M. BISI et G. SPIGA : On kinetic models for polyatomic gases and their hydrodynamic limits. *Ricerche di Matematica*, 66(1):113–124, 2017.
- [23] A. V. BOBYLEV, M. BISI, M. GROPPi, G. SPIGA et I. F. POTAPENKO : A general consistent BGK model for gas mixtures. *Kinetic & Related Models*, 11(6):1377, 2018.
- [24] M. BOSTAN et C. CALDINI-QUEIROS : Finite Larmor radius approximation for collisional magnetic confinement. Part I : The linear Boltzmann equation. *Quart. Appl. Math*, 72(2):323–345, 2014.
- [25] M. BOSTAN et C. CALDINI-QUEIROS : Finite Larmor radius approximation for collisional magnetic confinement. Part II : the Fokker-Planck-Landau equation. *Quart. Appl. Math*, 72(3):513–548, 2014.
- [26] J.-F. BOURGAT, L. DESVILLETES, P. LE TALLEC et B. PERTHAME : Micro-reversible collisions for polyatomic gases and Boltzmann’s theorem. *European J. Mech. B Fluids*, 13(3):237–254, 1994.
- [27] T. BOYD, T. BOYD et J. SANDERSON : *The physics of plasmas*. Cambridge University Press, 2003.
- [28] F. BOYER : Aspects théoriques et numériques de l’équation de transport. *Polycopié de cours*.
- [29] J. U. BRACKBILL : On energy and momentum conservation in particle-in-cell plasma simulation. *Journal of Computational Physics*, 317:405–427, 2016.
- [30] M. BRIANT : Stability of global equilibrium for the multi-species Boltzmann equation in  $L^\infty$  settings. *Discrete and Continuous Dynamical Systems-A*, 36: 6669–6688, 2016.
- [31] S. BUTT et K. BRODLIE : Preserving positivity using piecewise cubic interpolation. *Computers & Graphics*, 17(1):55 – 64, 1993.

- [32] M. CAMPOS-PINTO : Towards smooth particle methods without smoothing. *Journal of Scientific Computing*, 65(1):54–82, 2015.
- [33] J. A. CANIZO, J. A. CARRILLO et J. ROSADO : A well-posedness theory in measures for some kinetic models of collective motion. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 21(03):515–539, 2011.
- [34] J. A. CARRILLO, Y.-P. CHOI et M. HAURAY : The derivation of swarming models : mean-field limit and Wasserstein distances. *In Collective dynamics from bacteria to crowds*, p. 1–46. Springer, 2014.
- [35] J. A. CARRILLO, K. CRAIG et F. S. PATAACCHINI : A blob method for diffusion. *Calculus of Variations and Partial Differential Equations*, 58(2):1–53, 2019.
- [36] J. A. CARRILLO, J. HU, Z. MA et T. REY : Recent development in kinetic theory of granular materials : analysis and numerical methods. *arXiv preprint arXiv :2001.11206*, 2020.
- [37] J. A. CARRILLO, Y. HUANG, F. S. PATAACCHINI et G. WOLANSKY : Numerical study of a particle method for gradient flows. *Kinetic and Related Models*, 10, 2017.
- [38] J. A. CARRILLO, J. ROSADO et F. SALVARANI : 1D nonlinear Fokker-Planck equations for fermions and bosons. *Applied Mathematics Letters*, 21(2):148–154, 2008.
- [39] J. A. CARRILLO et F. VECIL : Nonoscillatory interpolation methods applied to Vlasov-based models. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 29(3):1179–1206, 2007.
- [40] C. CERCIGNANI : *The Boltzmann Equation and its Applications*, vol. 67. Springer New York, 1987.
- [41] C. CERCIGNANI : Recent developments in the mechanics of granular materials. *Fisica matematica e ingegneria delle strutture*, p. 119–132, 1995.
- [42] C. CERCIGNANI : *Multicomponent flow modeling*. Birkhauser, 1999.
- [43] C. CERCIGNANI : *Rarefied gas dynamics : from basic concepts to actual calculations*, vol. 21. Cambridge University Press, 2000.
- [44] F. F. CHEN *et al.* : *Introduction to plasma physics and controlled fusion*, vol. 1. Springer, 1984.
- [45] C.-Z. CHENG et G. KNORR : The integration of the Vlasov equation in configuration space. *Journal of Computational Physics*, 22(3):330–351, 1976.
- [46] I. CHOQUET, P. DEGOND et B. LUCQUIN-DESREUX : A hierarchy of diffusion models for partially ionized plasmas. *Discrete & Continuous Dynamical Systems-B*, 8(4):735, 2007.
- [47] A. COHEN et B. PERTHAME : Optimal approximations of transport equations by particle and pseudoparticle methods. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 32(3):616–636, 2000.
- [48] S. COLOMBI et C. ALARD : A 'metric' semi-Lagrangian Vlasov-Poisson solver. *Journal of Plasma Physics*, 83(3), 2017.
- [49] C. COTTER, J. FRANK et S. REICH : The remapped particle-mesh semi-Lagrangian advection scheme. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological*

- Society : A journal of the atmospheric sciences, applied meteorology and physical oceanography*, 133(622):251–260, 2007.
- [50] G. COTTET et P.-A. RAVIART : On particle-in-cell methods for the Vlasov-Poisson equations. *Transport Theory and Statistical Physics*, 15(1-2):1–31, 1986.
- [51] G.-H. COTTET : Artificial viscosity models for vortex and particle methods. *Journal of Computational Physics*, 127(2):299–308, 1996.
- [52] G.-H. COTTET, J.-M. ETANCELIN, F. PÉRIGNON et C. PICARD : High order semi-Lagrangian particle methods for transport equations : numerical analysis and implementation issues. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 48(4):1029–1060, 2014.
- [53] G.-H. COTTET, P. D. KOUMOUTSAKOS *et al.* : *Vortex methods : theory and practice*, vol. 8. Cambridge university press Cambridge, 2000.
- [54] G.-H. COTTET et L. WEYNANS : Particle methods revisited : a class of high order finite-difference methods. *Comptes Rendus Mathématique*, 343(1):51–56, 2006.
- [55] K. CRAIG et A. BERTOZZI : A blob method for the aggregation equation. *Mathematics of computation*, 85(300):1681–1717, 2016.
- [56] M. CRANDALL et A. MAJDA : The method of fractional steps for conservation laws. *Numerische Mathematik*, 34(3):285–314, 1980.
- [57] N. CROUSEILLES, M. MEHRENBARGER et E. SONNENDRÜCKER : Conservative semi-Lagrangian schemes for Vlasov equations. *Journal of Computational Physics*, 229(6):1927–1953, 2010.
- [58] N. CROUSEILLES, T. RESPAUD et E. SONNENDRÜCKER : A forward semi-Lagrangian method for the numerical solution of the Vlasov equation. *Computer Physics Communications*, 180(10):1730–1745, 2009.
- [59] E. CUNNINGHAM : On the velocity of steady fall of spherical particles through fluid medium. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 83(563):357–365, 1910.
- [60] J. DARROZES et J. GUIRAUD : Généralisation formelle du théorème H en présence de parois. Applications. *Comptes-rendus hebdomadaires des séances de l'académie des sciences Série A*, 262(24):1368, 1966.
- [61] R. DAUTRAY et J. LIONS : *Mathematical analysis and numerical methods for science and technology*. Springer, New York, 1990.
- [62] M. I. G. de SORIA, P. MAYNAR, S. MISCHLER, C. MOUHOT, T. REY et E. TRIZAC : Towards an H-theorem for granular gases. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2015(11):P11009, 2015.
- [63] P. DEGOND : Local existence of solutions of the Vlasov-Maxwell equations and convergence to the Vlasov-Poisson equations for infinite light velocity. *Mathematical methods in the applied sciences*, 8(1):533–558, 1986.
- [64] P. DEGOND et B. LUCQUIN-DESREUX : The Fokker-Planck asymptotics of the Boltzmann collision operator in the Coulomb case. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 2(02):167–182, 1992.

- [65] P. DEGOND et B. LUCQUIN-DESREUX : The asymptotics of collision operators for two species of particles of disparate masses. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 6(03):405–436, 1996.
- [66] P. DEGOND et B. LUCQUIN-DESREUX : Transport coefficients of plasmas and disparate mass binary gases. *Transport Theory and Statistical Physics*, 25(6):595–633, 1996.
- [67] P. DEGOND et F.-J. MUSTIELES : A deterministic approximation of diffusion equations using particles. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 11(2):293–310, 1990.
- [68] W. DEHNEN et H. ALY : Improving convergence in smoothed particle hydrodynamics simulations without pairing instability. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 425(2):1068–1082, 2012.
- [69] D. del CASTILLO-NEGRETE, K. SCHNEIDER, M. FARGE, G. CHEN *et al.* : Wavelet-based density estimation for noise reduction in plasma simulations using particles. *Journal of Computational Physics*, 229(8):2821–2839, 2010.
- [70] J.-L. DELCROIX et A. BERS : *Physique des plasmas*, vol. 2. Les Ulis (Essonne) : EDP sciences, 1966.
- [71] S. DELLACHERIE et R. SENTIS : Nuclear collisions models with Boltzmann operators. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 10(04):479–505, 2000.
- [72] J. DENAVIT : Numerical simulation of plasmas with periodic smoothing in phase space. *Journal of Computational Physics*, 9(1):75–98, 1972.
- [73] B. DESPRÉS : Uniform asymptotic stability of Strang’s explicit compact schemes for linear advection. *SIAM journal on numerical analysis*, 47(5):3956–3976, 2009.
- [74] B. DESPRÉS : Polynomials with bounds and numerical approximation. *Numerical Algorithms*, 76(3):829–859, 2017.
- [75] B. DESPRÉS et M. HERDA : Computation of sum of squares polynomials from data points. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 58(3):1719–1743, 2020.
- [76] L. DESVILLETES : On asymptotics of the Boltzmann equation when the collisions become grazing. *Transport Theory and Statistical Physics*, 21(3):259–276, 1992.
- [77] L. DESVILLETES : Some aspects of the modeling at different scales of multi-phase flows. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 199(21–22):1265–1267, 2010.
- [78] L. DESVILLETES, F. GOLSE et V. RICCI : A Formal Passage From a System of Boltzmann Equations for Mixtures Towards a Vlasov-Euler System of Compressible Fluids. *Acta Mathematicae Applicatae Sinica, English Series*, 35:158–173, 2019.
- [79] L. DESVILLETES et S. MISCHLER : About the splitting algorithm for Boltzmann and BGK equations. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 6(8):1079–1102, 1996.
- [80] L. DESVILLETES, R. MONACO et F. SALVARANI : A kinetic model allowing to obtain the energy law of polytropic gases in the presence of chemical reactions. *European Journal of Mechanics-B/Fluids*, 24(2):219–236, 2005.

- [81] R. J. DiPERNA et P.-L. LIONS : Global weak solutions of Vlasov-Maxwell systems. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 42(6):729–757, 1989.
- [82] R. L. DOBRUSHIN : Vlasov equations. *Functional Analysis and Its Applications*, 13(2):115–123, 1979.
- [83] B. DUANE : Fusion cross-section theory. Rap. tech., 1972.
- [84] L. EINKEMMER et A. OSTERMANN : Convergence analysis of Strang splitting for Vlasov-type equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 52(1):140–155, 2014.
- [85] L. C. EVANS : *Partial differential equations*. Num. 19. American Mathematical Soc., 1998.
- [86] M. FALCONE et R. FERRETTI : Convergence analysis for a class of high-order semi-Lagrangian advection schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 35(3):909–940, 1998.
- [87] E. FERRARI et L. PARESCHI : Modelling and numerical methods for the dynamics of impurities in a gas. *International journal for numerical methods in fluids*, 57(6):693–713, 2008.
- [88] T. FRANZ et H. WENDLAND : Convergence of the smoothed particle hydrodynamics method for a specific barotropic fluid flow : constructive kernel theory. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 50(5):4752–4784, 2018.
- [89] J. P. FREIDBERG : *Plasma physics and fusion energy*. Cambridge university press, 2008.
- [90] E. FRÉNOT, P. RAVIART et E. SONNENDRÜCKER : Asymptotic expansion of the Vlasov equation in a large external magnetic field. *J. Math. Pures et Appl*, 80(8):815–843, 2001.
- [91] E. FRÉNOT et E. SONNENDRÜCKER : Homogenization of the Vlasov equation and of the Vlasov-Poisson system with a strong external magnetic field. *Asymptotic Analysis*, 18(3-4):193–213, 1998.
- [92] E. FRÉNOT et E. SONNENDRÜCKER : The finite Larmor radius approximation. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 32(6):1227–1247, 2001.
- [93] E. GODLEWSKI et P.-A. RAVIART : *Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws*, vol. 118. Springer Science & Business Media, 2013.
- [94] F. GOLSE, P.-L. LIONS, B. PERTHAME et R. SENTIS : Regularity of the moments of the solution of a transport equation. *Journal of functional analysis*, 76(1):110–125, 1988.
- [95] F. GOLSE et L. SAINT-RAYMOND : The Vlasov-Poisson system with strong magnetic field in quasineutral regime. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 13(05):661–714, 2003.
- [96] H. GRAD : Asymptotic theory of the Boltzmann equation. *The physics of Fluids*, 6(2):147–181, 1963.
- [97] O. H. HALD : Convergence of vortex methods for Euler’s equations. II. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 16(5):726–755, 1979.

- [98] R. W. HOCKNEY et J. W. EASTWOOD : *Computer simulation using particles*. crc Press, 1988.
- [99] T. Y. HOU : Convergence of a variable blob vortex method for the Euler and Navier-Stokes equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 27(6):1387–1404, 1990.
- [100] J. D. HUBA : *NRL plasma formulary*, vol. 6790. Naval Research Laboratory, 1998.
- [101] G. JACOBS et J. S. HESTHAVEN : High-order nodal discontinuous galerkin particle-in-cell method on unstructured grids. *Journal of Computational Physics*, 214(1):96–121, 2006.
- [102] F. JAMES et N. VAUCHELET : Chemotaxis : from kinetic equations to aggregate dynamics. *Nonlinear Differential Equations and Applications NoDEA*, 20(1):101–127, 2013.
- [103] P. KOUMOUTSAKOS : Inviscid axisymmetrization of an elliptical vortex. *Journal of Computational Physics*, 138(2):821–857, 1997.
- [104] G. M. KREMER, F. OLIVEIRA et A. J. SOARES : H-Theorem and trend to equilibrium of Chemically Reacting Mixture of Gases. *Kinetic and Related Models*, 2:333–343, 2009.
- [105] J.-B. LASSERRE : *Moments, positive polynomials and their applications*, vol. 1. World Scientific, 2010.
- [106] Y. M. LI, S. M. MAHAJAN et D. W. ROSS : Destabilization of global Alfvén eigenmodes and kinetic Alfvén waves by alpha particles in a tokamak plasma. *The Physics of fluids*, 30(5):1466–1484, 1987.
- [107] P.-L. LIONS et S. MAS-GALLIC : Une méthode particulière déterministe pour des équations diffusives non linéaires. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences-Series I-Mathematics*, 332(4):369–376, 2001.
- [108] X. LU : Conservation of energy, entropy identity, and local stability for the spatially homogeneous Boltzmann equation. *Journal of statistical physics*, 96(3-4):765–796, 1999.
- [109] S. MARX, T. WEISSER, D. HENRION et J.-B. LASSERRE : A moment approach for entropy solutions to nonlinear hyperbolic PDEs. *Mathematical Control & Related Fields*, 10(113), 2020.
- [110] S. MISCHLER et B. WENNERBERG : On the spatially homogeneous Boltzmann equation. In *Annales de l'Institut Henri Poincaré (C) Non Linear Analysis*, vol. 16, p. 467–501. Elsevier, 1999.
- [111] R. D. NAIR, J. S. SCROGGS et F. H. SEMAZZI : A forward-trajectory global semi-Lagrangian transport scheme. *Journal of Computational Physics*, 190(1): 275–294, 2003.
- [112] S. O/STMO, A. FREZZOTTI et T. YTREHUS : Kinetic theory study of steady evaporation from a spherical condensed phase containing inert solid particles. *Physics of fluids*, 9(1):211–225, 1997.
- [113] B. OTTERMAN et A. S. LEVINE : Analysis of gas-solid particle flows in shock tubes. *AIAA Journal*, 12(5):579–580, 1974.

- [114] B. E. PEIGNEY, O. LARROCHE et V. TIKHONCHUK : Fokker-Planck kinetic modeling of suprathermal  $\alpha$ -particles in a fusion plasma. *Journal of Computational Physics*, 278:416–444, 2014.
- [115] B. PERTHAME *et al.* : Mathematical tools for kinetic equations. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 41(2):205–244, 2004.
- [116] B. PERTHAME et P. E. SOUGANIDIS : A limiting case for velocity averaging. In *Annales scientifiques de l’Ecole normale supérieure*, vol. 31, p. 591–598, 1998.
- [117] M. C. PINTO, E. SONNENDRÜCKER, A. FRIEDMAN, D. P. GROTE et S. M. LUND : Noiseless Vlasov-Poisson simulations with linearly transformed particles. *Journal of Computational Physics*, 275:236–256, 2014.
- [118] M. PIRNER : *Kinetic modelling of gas mixtures*. BoD–Books on Demand, 2018.
- [119] A. Y. POVZNER : On the Boltzmann equation in the kinetic theory of gases. *Matematicheskii Sbornik*, 100(1):65–86, 1962.
- [120] V. POWERS : Positive polynomials and sums of squares : Theory and practice. *Real Algebraic Geometry*, 1:78–149, 2011.
- [121] A. PULVIRENTI et B. WENBERG : A Maxwellian lower bound for solutions to the Boltzmann equation. *Communications in mathematical physics*, 183(1):145–160, 1997.
- [122] M. PUTINAR : Positive Polynomials on Compact Semi-Algebraic Sets. *Indiana Univ. Math. J.*
- [123] J.-M. QIU et C.-W. SHU : Conservative high order semi-Lagrangian finite difference WENO methods for advection in incompressible flow. *Journal of Computational Physics*, 230(4):863–889, 2011.
- [124] J.-M. QIU et C.-W. SHU : Conservative semi-Lagrangian finite difference WENO formulations with applications to the Vlasov equation. *Communications in Computational Physics*, 10(4):979, 2011.
- [125] P.-A. RAVIART : An analysis of particle methods. In *Numerical methods in fluid dynamics*, p. 243–324. Springer, 1985.
- [126] J. SCHAEFFER : Global existence of smooth solutions to the Vlasov-Poisson system in three dimensions. *Communications in partial differential equations*, 16(8-9):1313–1335, 1991.
- [127] J. W. SCHMIDT et W. HESS : Positivity of cubic polynomials on intervals and positive spline interpolation. *BIT Numerical Mathematics*, 28(2):340–352, 1988.
- [128] R. SENTIS : *Mathematical Models and Methods for Plasma Physics, Volume 1*. Springer, 2016.
- [129] J. SIMON : Compact sets in the space  $l^p(0, t; b)$ . *Annali di Matematica pura ed applicata*, 146(1):65–96, 1986.
- [130] Y. SONE : *Molecular gas dynamics : theory, techniques, and applications*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [131] E. SONNENDRÜCKER, J. ROCHE, P. BERTRAND et A. GHIZZO : The semi-Lagrangian method for the numerical resolution of the Vlasov equation. *Journal of computational physics*, 149(2):201–220, 1999.

- 
- [132] G. STRANG : Trigonometric polynomials and difference methods of maximum accuracy. *Journal of Mathematics and Physics*, 41(1-4):147–154, 1962.
- [133] T. UMEDA : A conservative and non-oscillatory scheme for vlasov code simulations. *Earth, planets and space*, 60(7):773–779, 2008.
- [134] C. VILLANI : A review of mathematical topics in collisional kinetic theory. *Handbook of mathematical fluid dynamics*, 1(71-305):3–8, 2002.
- [135] C. VILLANI : Mathematics of granular materials. *Journal of statistical physics*, 124(2-4):781–822, 2006.
- [136] B. WANG, G. H. MILLER et P. COLELLA : A particle-in-cell method with adaptive phase-space remapping for kinetic plasmas. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 33(6):3509–3537, 2011.