Université Paris-Dauphine
Ceremade

— o —

Introduction aux méthodes particulaires

— o —

François Bolley

I - Les équations d'Euler incompressibles :

modèle macroscopique, particules déterministes

II - L'équation de Vlasov-Fokker-Planck :

modèle cinétique, particules stochastiques

I - Les équations d'Euler incompressibles

1 - Présentation des équations

Modèle mathématique décrivant le mouvement macroscopique d'un fluide idéal incompressible.

Phénomènes macroscopiques : fluide = continuum d'éléments de fluide

Etat du fluide décrit par les propriétés des "éléments de fluides", les champs macroscopiques $u(t,x)$ (vitesse), $\rho = \rho(t,x)$ (densité), ...

$\longrightarrow$ Moyennes de quantités microscopiques :

$$u(t,x) = \frac{1}{N(x)} \sum_{i=1}^{N(x)} u_i$$

Obtention des équations :

$\longrightarrow$ Fluide : ensemble D de $\mathbb{R}^2$ ou $\mathbb{R}^3$

$\longrightarrow$ Flot : application Φ_t de D dans D : position initiale $\mapsto$ position à l'instant t

$\longrightarrow$ Mouvement incompressible : volume (V_t) = volume (V_0) si $V_t = \Phi_t(V_0)$

Champ de densité de fluide : $\rho = \rho(t,x)$ où $\rho(t,x)\,dx$ est la masse de fluide au temps t dans l'élement de fluide dx en x

Conservation de la masse : $\displaystyle\int_{V_t} \rho(y,t)\,dy = \int_{V_0} \rho(x,0)\,dx$

Or, avec $y = \Phi_t(x)$, $\displaystyle\int_{V_t} \rho(y,t)\,dy = \int_{V_0} \rho(\Phi_t(x),t)\left|\frac{d\Phi_t(x)}{dx}\right| dx = \int_{V_0} \rho(\Phi_t(x),t)\,dx.$

Comme V est arbitraire, $\rho(\Phi_t(x),t) = \rho(x,0)$: densité constante sur chaque trajectoire. On supposera qu'elle est uniforme, égale à 1.

$\longrightarrow$ Vitesse d'une particule : $\dfrac{d\Phi_t(x)}{dt}$

Champ de vitesse : $u(t, y) = \dfrac{d\Phi_t(x)}{dt}$ si $y = \Phi_t(x)$.

Connaître le champ de vitesse $u(t)$ en tout temps revient à connaître le flot Φ_t en tout temps
Description eulérienne / lagrangienne du fluide

Mouvement du fluide déterminé par l'interaction entre éléments du fluide produite par l'incompressibilité

Force : il existe une fonction $p = p(t, x)$ réelle telle que $\dfrac{d^2\Phi_t}{dt^2}(x) = -\nabla p(t, \Phi_t(x))$.
Or

$$\begin{aligned}\frac{d^2\Phi_t}{dt^2}(x) = \frac{d}{dt}u(t, \Phi_t(x)) &= \frac{\partial u}{\partial t}(t, \Phi_t(x)) + \frac{d\Phi_t}{dt}(x) \cdot \nabla u(t, \Phi_t(x)) \\ &= \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla\, u\right)(t, \Phi_t(x))\end{aligned}$$

De là :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, y) + u \cdot \nabla\, u(t, y) = -\nabla p(t, y)$$

Incompressibilité : $0 = div\, u = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial u_i}{\partial x_i}$

Condition au bord : u tangent au bord si D est borné
valeur asymptotique de u si D n'est pas borné

Cas simple où $D = \mathbb{R}^2$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla\, u = -\nabla p, \qquad t > 0,\ x \in \mathbb{R}^2$$

$$div\, u = 0, \qquad t > 0,\ x \in \mathbb{R}^2$$
$$u(t,x) \to 0, \qquad |x| \to +\infty$$

On écrit ces équations en fonction seulement du champ réel de vorticité

$$\omega(t,x) = rot\, u(t,x) = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} - \frac{\partial u_1}{\partial x_2}$$

La condition $div\, u = 0$ implique $u = \nabla^{\perp}\psi = \left(\dfrac{\partial\psi}{\partial x_2}, -\dfrac{\partial\psi}{\partial x_1}\right)$
où de manière générale $y^{\perp} = (y_2, -y_1)$ si $y = (y_1, y_2)$.

De là $\Delta\psi = -\omega$: équation de Poisson

La solution Ψ nulle à l'infini est

$$\Psi(x) = \int_{\mathbb{R}^2} G(x-y)\,\omega(y)\,dy$$

où

$$G(x) = -\frac{1}{2\pi}\ln|x|$$

c'est-à-dire

$$u(x) = \int_{\mathbb{R}^2} K(x-y)\,\omega(y)\,dy$$

où

$$K(x) = -\frac{1}{2\pi}\frac{x^{\perp}}{|x|^2}.$$

$\rightarrow K(x-y)$ champ de vitesse créé en x par un tourbillon d'intensité $\omega(y) = 1$ en y.

Connaître le champ de vitesse $u_t = u(t,.)$ en tout temps revient à connaître le champ de vorticité $\omega_t = \omega(t,.)$ en tout temps.

La vorticité vérifie

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + (u \cdot \nabla)\,\omega = 0, \qquad t > 0,\ x \in \mathbb{R}^2$$

soit

$$\frac{d}{dt}\omega(t, \Phi_t(x)) = 0$$

soit encore

$$\omega(t, \Phi(t)) = \omega(0, x).$$

La vorticité est conservée le long des trajectoires.

2 - Approximation particulaire : la méthode des tourbillons

Elle consiste à approcher la solution $\omega_t(x)$ par un profil de vorticité

$$\hat{\omega}_t^I(x) = \sum_{i \in I} a_i \, \delta(x - x_i(t)).$$

On part d'une donnée initiale $\hat{\omega}_0^I(x) = \sum_{i \in I} a_i \, \delta(x - x_i(0))$ qui approche la donnée initiale $\omega_0(x)$.

Questions : 1. choix des a_i et $x_i(0)$, 2. évolution des $x_i(t)$, 3. évaluation de l'erreur commise.

1. Construction de la donnée initiale : choix des a_i et $x_i(0)$

Si par exemple le support de ω_0 est compact on le découpe en carrés de côté h : pour $i = (i_1, i_2) \in \mathbb{Z}^2$ on pose par exemple $x_i(0) = h\, i = (h\, i_1, h\, i_2)$ et $a_i = h^2 \, \omega_0(x_i)$. Ainsi $I = \{i \in \mathbb{Z}^2, x_i \in support(\omega_0)\}$.

On peut également tirer les x_i aléatoirement : voir partie II.

2. Evolution des $x_i(t)$

Le profil de vorticité $\hat{\omega}_t^I(x) = \sum_{j\in I} a_j\,\delta(x - x_j(t))$ induit le champ de vitesse

$$\hat{u}_t^I(x) = \int_{\mathbb{R}^2} K(x-y)\,\hat{\omega}_t^I(y)\,dy = \sum_{j\in I} a_j\,K(x - x_j(t)).$$

En particulier

$$\hat{u}_t^I(x_i(t)) = \sum_{j\in I} a_j\,K(x_i(t) - x_j(t))$$

donc $x_i(t)$ doit évoluer selon

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = \sum_{j\in I} a_j\,K(x_i(t) - x_j(t)) = -\sum_{j\in I} a_j \frac{1}{2\pi}\frac{(x_i(t) - x_j(t))^\perp}{|x_i(t) - x_j(t)|^2}.$$

Pour $j = i$ cela pose un problème, on considère alors

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = -\sum_{j\neq i} a_j \frac{1}{2\pi}\frac{(x_i(t) - x_j(t))^\perp}{|x_i(t) - x_j(t)|^2}.$$

$\rightarrow$ Ceci revient à dire que l'influence d'un tourbillon sur lui-même est nulle : dans $\mathbb{R}^2$, un tourbillon seul est fixe, ce qui n'est pas le cas en présence d'un bord.

Le problème $x_j(t) = x_i(t)$: effondrement en temps fini pour des a_i de signe différent ; grandes vitesses pour $x_j(t)$ proche de $x_i(t)$.

Régularisation du noyau K en un noyau $K_\alpha = \chi_\alpha * K$

Evolution des $x_i(t)$:

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = \sum_{j\neq i} a_j K_\alpha(x_i(t) - x_j(t)) = K_\alpha * \hat{\omega}_t^I(x_i(t))$$

Remarque : Si $\hat{\omega}_t^{I,\alpha}(x) = \sum_{j\in I} a_j \chi_\alpha(x_j(t)) = \chi_\alpha * \hat{\omega}_t^I(x)$, alors

$$K_\alpha * \hat{\omega}_t^I = (K * \chi_\alpha) * \hat{\omega}_t^I = K * (\chi_\alpha * \hat{\omega}_t^I) = K * \hat{\omega}_t^{I,\alpha}.$$

$\longrightarrow$ Ainsi les $x_i(t)$ évoluent dans le champ de vitesse $K_\alpha * \hat{\omega}_t^I$, qui est donc égal au champ de vitesse créé par les tourbillons $a_j\chi_\alpha(x - x_j(t))$, centrés en $x_j(t)$ et de taille (α) donnée par la fonction χ_α.

3. Evaluation de l'erreur commise :

au niveau des champs de vorticité : on a remplacé la solution $\omega_t(x)$ obtenue à partir de $\omega_0(x)$ par la vorticité $\hat{\omega}_t^I(x)$ construite à partir des points $x_i(t)$;

au niveau des champs de vitesse : on a remplacé le champ de vitesse $u_t(x) = K * \omega_t(x)$ correspondant à $\omega_t(x)$ par le champ de vitesse $\hat{u}_t^I(x) = K_\alpha * \hat{\omega}_t^I$;

au niveau des trajectoires : on a remplacé les trajectoires $\Phi_t(x_i(0))$ construites à partir du champ de vitesse u_t par les trajectoires $x_i(t)$.

Par exemple : pour tout $s > 0$ et $T \geq 0$ il existe une constante C telle que

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^2} |u_t(x) - \hat{u}_t^I(x)| + \max_{i \in I} |\Phi_t(x_i(0)) - x_i(t)| \leq \frac{C}{\alpha^s}\Big(\alpha + \frac{h^2}{\alpha}\Big), \quad 0 \leq t \leq T.$$

Preuve fondée sur des estimations de $\big|\Phi_t(x_i(0)) - x_i(t)\big|$, comme on le retrouvera dans la partie II.

4. Etape suivante : discrétisation en temps

$$\frac{x_i^{n+1} - x_i^{n-1}}{2\tau} = \sum_j a_j K_\alpha(x_i^n - x_j^n), \quad n \geq 1, i \in J$$

II - L'équation de Vlasov-Fokker-Planck

1 - Présentation de l'équation

Modèle cinétique de l'évolution de la distribution d'un gaz : position et vitesse

En un point de l'espace, les particules peuvent avoir différentes vitesses.

Un élément de fluide est repéré par sa position et sa vitesse

Densité dans l'espace des positions et vitesses : $f_t(x, v)$ où $f_t(x, v)\, dx\, dv$ est la masse de fluide à l'instant t dans l'élément $dx\, dv$ en (x, v).

Solution d'une équation de transport et diffusion :

$$\frac{\partial f_t}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f_t - \nabla_x U *_x \rho_t \cdot \nabla_v f_t = \Delta_v f_t + \lambda \nabla_v \cdot (v f_t), \qquad t > 0,\ x, v \in \mathbb{R}^3$$

où $\rho_t(x) = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} f_t(x, v)\, dv$ est la densité dans l'espace des positions.

Interprétation : un élément de fluide initialement en $(x(0), v(0))$ sera à l'instant t en $(x(t), v(t))$ où

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{dx(t)}{dt} & = & v(t) \\ \dfrac{dv(t)}{dt} & = & \sqrt{2}\,\dfrac{dB(t)}{dt} - \lambda\, v(t) - \nabla_x U *_x \rho_t(x(t)). \end{array} \right.$$

$B = B(t)$ est un processus de Wiener (ou mouvement brownien) sur $\mathbb{R}^3$.

De manière abstraite on pose $y(t) = (x(t), v(t)) \in \mathbb{R}^6$: $y(t)$ est alors solution de

$$\frac{dy(t)}{dt} = \sigma\,\frac{dB(t)}{dt} + b(y(t)) + c * f_t(y(t)).$$

A chaque instant t, $y(t)$ est une variable aléatoire dans $\mathbb{R}^6$. La probabilité qu'elle soit dans l'ensemble A est $\displaystyle\int_{\mathbb{R}^6} f_t(z)\,dz$ où $z = (x, v)$: la distribution du gaz f_t est la distribution de présence de la variable $y(t)$.

$y(t)$ évolue dans un champ de force généré par sa distribution f_t.

2 - Approximation particulaire

Elle consiste à approcher la solution $f_t(x)$ par un profil

$$\hat{f}_t^N(x) = \sum_{i=1}^{N} a_i \, \delta(x - x_i(t)).$$

On part d'une donnée initiale $\hat{f}_0^N(x) = \sum_{i=1}^{N} a_i \, \delta(x - x_i(0))$ qui approche la donnée initiale $f_0(x)$.

Questions : 1. choix des a_i et $x_i(0)$, 2. évolution des $x_i(t)$, 3. évaluation de l'erreur commise.

1. Construction de la donnée initiale : choix des a_i et $x_i(0)$
On prend $a_i = 1/N$, et $x_i(0)$ N variables aléatoires indépendantes de distribution f_0. Pour N grand, au niveau des observables

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{N} \varphi(x_i(0)) \sim \int_{\mathbb{R}^6} \varphi(z) \, f_0(z) \, dz$$

2. Evolution des $x_i(t)$

Le point $y(t)$ du fluide évolue selon

$$\frac{dy(t)}{dt} = \sigma \frac{dB(t)}{dt} + b(y(t)) + c * f_t(y(t)),$$

dans le champ de force créé par la distribution du fluide f_t dans $\mathbb{R}^6$.

Dans le cadre discret où le fluide est remplacé par seulement les N points $x_i(t)$, l'analogue de la distribution f_t est la mesure empirique

$$\hat{f}_t^N(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \delta(x - x_i(t)).$$

En effet $\int_A \hat{f}_t^N(x)\, dx$ est bien la proportion de points $x_i(t)$ dans l'ensemble A.

On fait donc évoluer les points $x_i(t)$ dans le champ de force créé par cette mesure, soit selon

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = \sigma \frac{dB(t)}{dt} + b(x_i(t)) + c * \hat{f}_t^N(x_i(t)), \qquad i = 1, \ldots, N.$$

Prenant différents processus de Wiener ceci s'écrit

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = \sigma \frac{dB_i(t)}{dt} + b(x_i(t)) + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} c(x_i(t) - x_j(t)), \qquad i = 1, \ldots, N.$$

D'après H. McKean, A.-S. Sznitman, H. Tanaka, ..., à t fixé

$$\mathbb{E}\left|\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\varphi(x_i(t)) - \int_{\mathbb{R}^6}\varphi(x)\,f_t(x)\,dx\right| \longrightarrow 0 \quad \text{quand} \quad N \longrightarrow +\infty$$

Etant donnée une erreur ε, peut-on estimer

$$\mathbb{P}\Big[\Big|\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\varphi(x_i(t)) - \int_{\mathbb{R}^6}\varphi(x)\,f_t(x)\,dx\Big| > \varepsilon\Big]$$

en fonction du nombre N de particules (optique numérique) ?

Par exemple, sous une hypothèse de moment exponentiel carré sur la donnée initiale f_0 (F. B., A. Guillin, C. Villani)

$$\mathbb{P}\Big[\sup_{0\le t\le 1}\ \sup_{[\varphi]_{lip}\le 1}\Big|\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\varphi(x_i(t)) - \int_{\mathbb{R}^6}\varphi(x)\,f_t(x)\,dx\Big| > \varepsilon\Big] \le e^{-K\,N\,\varepsilon^2}$$

pour $\varepsilon > 0,\ N \ge N_0(\varepsilon)$ explicite. Autrement dit

$$\mathbb{P}\Big[\sup_{0\le t\le 1} d\Big(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta(x_i(t)), f_t\Big) > \varepsilon\Big] \le e^{-K\,N\,\varepsilon^2}$$

pour $\varepsilon > 0,\ N \ge N_0(\varepsilon)$, où

$$d(\mu,\nu) = \sup_{[\varphi]_{lip}\le 1}\Big|\int_{\mathbb{R}^6}\varphi\,d\mu - \int_{\mathbb{R}^6}\varphi\,d\nu\Big| = \inf_{X\sim\mu, Y\sim\nu}\mathbb{E}\,|X-Y|$$

est une distance mesurant la convergence faible des mesures de probabilité.

Application : approximation de la densité de f_t sur $\mathbb{R}^6$

On régularise $\hat{f}_t^N(x)$ en $\hat{f}_t^{N,\alpha}(x)\,dx$ où

$$\hat{f}_t^{N,\alpha}(x) = (\chi_\alpha * \hat{f}_t^N)(x) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \chi_\alpha(x - x_i(t))$$

avec

$$\chi_\alpha(x) = \frac{1}{\alpha^6}\,\chi\Big(\frac{x}{\alpha}\Big)\cdot$$

Alors

$$\mathbb{P}\left[\sup_{y\in\mathbb{R}^6} |\hat{f}_t^{N,\alpha}(y) - f_t(y)| > \varepsilon\right] \leq e^{-K\,N\,\varepsilon^{2d+4}}$$

pour tout $\varepsilon > 0$, $N \geq N_0(\varepsilon)$ et pour $\alpha = L\,\varepsilon$ (ou pour $\alpha = \alpha(N)$).

Approximation du profil limite f_∞ quand t tend vers $+\infty$

Idée de preuve :

1. Les points $x_i(t)$ évoluent selon

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = \sigma \frac{dB_i(t)}{dt} + b(x_i(t)) + c * \hat{f}_t^N(x_i(t)), \qquad i = 1, \ldots, N.$$

Propagation du chaos : quand N devient grand les $x_i(t)$ tendent à se comporter comme des processus indépendants : plus précisément comme les processus $y_i(t)$ tels que $y_i(0) = x_i(0)$ et évoluant selon

$$\frac{dy_i(t)}{dt} = \sigma \frac{dB_i(t)}{dt} + b(y_i(t)) + c * f_t(y_i(t)), \qquad i = 1, \ldots, N.$$

On quantifie ce comportement en évaluant les quantités $|x_i(t) - y_i(t)|$: on obtient

$$\sup_{0 \le t \le 1} d\Big(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \delta(x_i(t)), f_t \Big) \le C \sup_{0 \le t \le 1} d\Big(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \delta(y_i(t)), f_t \Big).$$

2. Les variables $y_i(t)$ sont indépendantes et de loi commune f_t : on est donc amené à comparer la mesure empirique de N variables indépendantes avec leur loi commune. Pour cela on dispose de résultats généraux. Par exemple

$$\mathbb{P}\Big[\Big|\int \varphi\, df_t - \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \varphi(y_i(t))\Big| > \varepsilon\Big] \leq e^{-KN\varepsilon^2}, \qquad \varepsilon > 0, N \geq 1$$

si $\displaystyle\int_{\mathbb{R}^6} e^{a|x|^2}\, f_t(x)\, dx < +\infty$ pour un $a > 0$

Djellout-Guillin-Wu, B.-Villani, Gozlan

Uniformément sur les observables φ :

$$\mathbb{P}\Big[d(f_t, \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \delta(y_i(t))) > \varepsilon\Big] = \mathbb{P}\Big[\sup_{[\varphi]\leq 1}\Big|\int \varphi\, df_t - \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \varphi(y_i(t))\Big| > \varepsilon\Big] \leq e^{-KN\varepsilon^2}$$

pour $\varepsilon > 0, N \geq N_0(\varepsilon)$, sous la même hypothèse

3. On en déduit

$$\mathbb{P}\Big[\sup_{0\le t\le T} d(f_t, \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta(y_i(t))) > \varepsilon\Big] \le e^{-KN\varepsilon^2}$$

pour $\varepsilon > 0, N \ge N_0(\varepsilon)$, puis

$$\mathbb{P}\Big[\sup_{0\le t\le T} d(f_t, \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta(x_i(t))) > \varepsilon\Big] \le \mathbb{P}\Big[\sup_{0\le t\le T} d(f_t, \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta(y_i(t))) > \varepsilon/C\Big] \le e^{-K'N\varepsilon^2}$$

pour $\varepsilon > 0, N \ge N_0(\varepsilon)$.

On peut également étudier les propriétés des trajectoires $(y(t))_{0\le t\le T}$ et $(x_i(t))_{0\le t\le T}$ sur un intervalle de temps $[0,T]$ donné.