



UFR M.I.G.
École Doctorale IAE + M
Université Paul Sabatier - Toulouse III
D.F.D. Mathématiques

Mémoire présenté par

Francis FILBET

en vue d'obtenir le diplôme

d'HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

Spécialité : Mathématiques Appliquées.

CONTRIBUTIONS À L'ANALYSE MATHÉMATIQUE ET À LA SIMULATION NUMÉRIQUE DE
QUELQUES ÉQUATIONS CINÉTIQUES

soutenue le 06 décembre 2005 devant le jury composé de

- R. ABGRALL, Professeur, Université de Bordeaux I, IUF *Rapporteur*
N. BEN ABDALLAH, Professeur, Université de Toulouse III, *Examineur*
Y. BRENIER, Directeur de Recherche, Université de Nice, *Rapporteur*
P. DEGOND, Directeur de Recherche, Université de Toulouse III, *Coordinateur*
L. DESVILLETES, Professeur, ENS Cachan, *Rapporteur*
PH. LAURENÇOT, Chargé de Recherche, Université de Toulouse III, *Examineur*
E. SONNENDRÜCKER, Professeur, Université de Strasbourg I, *Examineur*
B. WENNBERG, Professeur, Université de Chalmers, *Examineur*

Mathématiques pour l'Industrie et la Physique – Toulouse

Remerciements

Tout d'abord, mon travail de recherche n'aurait pas été possible sans le soutien du CNRS, bénéficiant ainsi d'une grande liberté dans mes choix de recherches, de mouvements et m'accordant une précieuse indépendance.

Je tiens en premier lieu à exprimer toute ma gratitude envers Rémi Abgrall, Yann Brenier et Laurent Desvillettes pour l'intérêt qu'ils ont bien voulu accorder à mon travail, leurs suggestions et conseils avisés constituent pour moi de formidables encouragements.

Je remercie particulièrement Pierre Degond pour son soutien et l'inspiration qu'il a insufflés à mes travaux. Je suis très honoré qu'il ait accepté de présenter mon habilitation à diriger des recherches comme *coordinateur*.

Éric Sonnendrücker a accompagné mes premiers pas dans la recherche, certainement les plus importants. Il m'a toujours accordé une grande liberté de parole et nos nombreux échanges ont toujours été profitables. Qu'il trouve ici toute ma reconnaissance. Je n'oublie pas Saïd Benachour, et le remercie pour tout ce qu'il m'a appris sur la théorie des équations aux dérivées partielles.

Je tiens aussi à remercier chaleureusement Philippe Laurençot. Les multiples discussions scientifiques (bien sûr!?) débutant dans la salle café et se prolongeant au tableau sont des souvenirs inoubliables. D'abord, parce que c'est là que j'ai commencé à m'intoxiquer au café, puis parce que ces échanges ont éveillé ma curiosité et m'ont apporté la confiance nécessaire pour entreprendre la lecture d'articles et des travaux en théorie cinétique. Nos nombreuses collaborations ont été pour moi des plus fructueuses et des plus enrichissantes.

J'adresse tous mes remerciements à Naoufel Ben Abdallah et Bernt Wennberg pour avoir accepté de participer à ce jury.

Toute ma gratitude va également à mes collaborateurs avec qui j'ai beaucoup appris. En particulier, je tiens à remercier Lorenzo Pareschi et Giovanni Russo qui m'ont apporté leur *savoir faire* de numéricien et m'ont accueilli à Ferrare et Catane. J'ai pu également apprécier la simplicité, l'intelligence et l'*humour oriental* de Chi-Wang Shu ; grâce à lui, j'ai découvert Providence, Pékin et Hong-Kong. Un grand merci à Clément Mouhot pour sa gentillesse, sa patience et ses efforts pour me transmettre quelques outils sur la théorie de l'équation de Boltzmann et beaucoup d'autres choses encore... J'exprime toute ma reconnaissance envers Benoît Perthame pour m'avoir contaminé aux mathématiques pour la biologie, pour sa gentillesse et la confiance qu'il m'a accordée. Enfin, tous mes remerciements aux gersois Jean-Pierre Bourgade et Nicolas Crouseilles pour leurs encouragements et suggestions. Nos divagations passées me manquent terriblement ! À Claudia, Laeti, Véro et Marjo pour leur aide dans l'organisation du pot (merci les mecs!)

C'est également l'occasion de remercier toutes les personnes que j'ai rencontrées

dans les différents laboratoires où j'ai séjourné : l'IECN de Nancy, l'IRMA de Strasbourg, le MAPMO d'Orléans et le MIP de Toulouse, ainsi que les universités de Brown (Providence), de Ferrare et de Catane. Aussi, j'adresse mes remerciements aux animateurs du réseau européen HyKE (Norbert Mauser), du GdR GRIP (Thierry Goudon), du GdR CHANT (François Castella).

Pour terminer, je tiens à rendre hommage au soutien de ma famille : à ma mère, à mes beaux-parents, qui me supportent tant bien que mal, à Marjorie, Max, Mylène, Sylvie et Yves. Un petit coucou aux petits derniers Chloé, Jim, Lolo et Yoyo qui par leur sourire et leur énergie me font de temps en temps penser à autre chose que les Maths. Enfin et surtout, Céline partage ma vie depuis maintenant onze années, sans elle je n'aurais sûrement jamais entrepris une carrière de chercheur. Par ses encouragements, sa patience et ses exigences, elle m'apporte un équilibre indispensable.

Table des matières

1	Simulations numériques de systèmes de particules chargées	11
1.1	La méthode de conservation du flot [59, 62]	12
1.2	Le modèle paraxial [60, 67, 73]	15
1.2.1	La distribution de Kapchinsky-Vladimirsky	17
1.2.2	La focalisation d'un faisceau quelconque	18
1.2.3	Focalisation alternée	20
1.3	Le système de Vlasov-Maxwell avec conditions aux limites [72]	23
1.3.1	Le modèle mathématique	23
1.3.2	Résultat principal : existence et unicité d'une solution BV	24
1.3.3	Simulations numériques	26
1.4	Conclusion et perspectives	26
2	Méthodes spectrales pour l'équation de Boltzmann	29
2.1	Les méthodes spectrales [63, 65]	31
2.1.1	Cadre général	31
2.1.2	La méthode spectrale classique	34
2.1.3	Méthodes spectrales rapides (MSP) [74]	35
2.2	Résultats numériques dans la cas non homogène	36
2.2.1	Problème de Riemann : solution dépendant du temps	36
2.2.2	Convergence vers l'équilibre pour l'équation de Boltzmann spatialement non homogène	37
2.3	Conclusion et perspectives	40
3	Analyse de schémas volumes finis pour les équations d'évolution	43
3.1	Les schémas volumes finis pour les équations d'évolution	43
3.2	Discrétisation du système de Lifshitz-Slyozov [64]	45
3.2.1	Comportement en temps long de la solution	46
3.2.2	Le schéma numérique et principaux résultats	47
3.3	Simulations de l'équation de Smoluchowski [66, 68]	49
3.3.1	Troncation du domaine	50
3.3.2	Le schéma numérique	51
3.3.3	Le phénomène de gélification	52
3.4	Conclusion et perspectives	54
4	Modélisation mathématique du chimiotactisme	57
4.1	Le cadre cinétique	59
4.2	Le cadre hyperbolique [70]	60
4.2.1	La limite hydrodynamique	60
4.2.2	Modèles paraboliques et hyperboliques	61

4.2.3	Discrétisation des systèmes hyperboliques [71]	61
4.3	Simulations numériques	65
4.4	Conclusion et perspectives	65

Introduction

1. Domaine de Recherche

Les travaux présentés dans ce mémoire ont été regroupés en quatre chapitres traitant successivement de la modélisation en physique des plasmas et des faisceaux, des méthodes de type Fourier-Galerkin pour les opérateurs de collisions (équation de Boltzmann), de l'analyse des méthodes de type volumes finis pour des équations cinétiques (modèles de coagulation-fragmentation) et enfin des différents modèles intervenant dans la description mathématique du chimiotactisme.

Les résultats donnés dans le premier chapitre mettent en avant l'utilisation de schémas eulériens pour la simulation numérique de l'équation de Vlasov. Nous présentons ainsi deux exemples provenant de la physique des faisceaux et des lasers. D'une part, nous étudions le modèle paraxial couramment utilisé pour l'étude d'une coupe transverse d'un faisceau de particules. L'objectif de ce travail est de faire le point sur la modélisation paraxiale et de justifier mathématiquement les travaux des physiciens, c'est-à-dire l'obtention du modèle, le sens mathématique de la solution KV (solution particulière du modèle paraxial), et enfin le concept de faisceaux équivalents rms pour le confinement de particules. Finalement, des simulations numériques viennent valider la méthode de focalisation lorsque l'analyse mathématique devient trop difficile. D'autre part, un autre travail concerne l'étude du système de Vlasov-Maxwell avec la prise en compte de conditions aux limites entrantes. Ici, nous utilisons les techniques mises au point par Yan Guo (le suivi des trajectoires et la technique de régularisation) pour le système de Vlasov-Maxwell conduisant ainsi à l'existence et l'unicité d'une solution BV . Enfin, des simulations numériques mettent en évidence la formation et la propagation de discontinuités à l'intérieur du domaine en espace.

Dans le deuxième chapitre, nous nous intéressons à la simulation numérique de gaz raréfiés (modèles collisionnels cinétiques). Les simulations numériques de l'équation de Boltzmann sont souvent réalisées à partir de méthodes Monte-Carlo. L'objectif de cette partie est de proposer une alternative fondée sur les schémas spectraux (méthode de type Fourier-Galerkin). Nous donnons un cadre général permettant d'appliquer la méthode spectrale à une large classe d'opérateurs de type Boltzmann. Cette approche permet d'obtenir une grande précision dans l'approximation de la solution de l'équation de Boltzmann mais reste coûteuse en temps de calcul. Nous introduisons alors des algorithmes rapides rivalisant avec les méthodes de type Monte-Carlo en terme d'efficacité (précision/temps de calcul). Nous proposons enfin plusieurs exemples d'applications des méthodes spectrales. Par exemple, suite aux travaux de Laurent Desvillettes et Cédric Villani sur la convergence vers l'équilibre de la solution spatialement non homogène de l'équation de Boltzmann, nous nous sommes intéressés d'un point de vue numérique au comportement de l'entropie relative à l'équilibre (local et global). Nous observons différents régimes : d'abord une convergence rapide de la solution vers un équilibre local, puis des oscillations

de l'entropie relative à cet équilibre. Notons que l'entropie peut être vue comme une distance de la solution de l'équation de Boltzmann avec la position d'équilibre, ces oscillations indiquent une "hésitation" de la solution à se relaxer vers l'équilibre global. Ces résultats sont replacés dans le contexte de l'étude du spectre de l'opérateur de Boltzmann linéarisé (Ellis & Pinsky). Enfin, nous décrivons brièvement les travaux portant sur les milieux granulaires.

La troisième partie est consacrée à l'analyse de schémas volumes finis pour les équations cinétiques. Ce travail a été effectué principalement en collaboration avec Philippe Laurençot qui s'est plus particulièrement intéressé à l'étude théorique des modèles de croissances de grains (système de Lifshitz-Slyozov, opérateur de Smoluchowski). D'une part, nous proposons des méthodes originales pour traiter des équations de coagulation et fragmentation. Par exemple, pour l'étude du comportement auto-similaire de la solution, nous effectuons un changement d'échelle adapté en temps et en espace, afin de suivre les variations de la solution sur une grande échelle de temps. Nous reformulons également l'opérateur de coagulation sous la forme d'un opérateur divergentiel avec pour objectif la mise au point de schémas volumes finis qui vont satisfaire des propriétés identiques à celles de l'équation continue. Cette approche permet de réaliser des simulations numériques d'une grande précision et ainsi d'indiquer des directions de recherches sur l'étude du comportement en temps grand de la solution exacte (existence de solutions auto-similaires, phénomène de perte de masse, etc.). D'autre part, nous utilisons des techniques d'EDP non linéaires pour montrer la convergence de l'approximation numérique vers la solution de l'équation continue. La principale difficulté consiste à adapter ou à trouver de nouvelles estimations *a priori* qui restent valides pour la solution numérique du schéma volumes finis. Cette étude nous a permis de donner des estimations originales qui peuvent aussi améliorer les résultats connus d'existence de solutions sur le problème continu.

Enfin dans le dernier chapitre, nous étudions des modèles cinétiques pour décrire le mouvement de cellules ou de bactéries. À partir de développements asymptotiques nous obtenons plusieurs modèles macroscopiques du type parabolique classique (Patlak-Keller-Segel ou PKS) et hyperbolique (ces modèles ont été récemment proposés dans la littérature). Nous développons alors des méthodes numériques d'ordre élevé conservant certaines propriétés importantes du modèle continu (positivité de la densité, état stationnaire, entropie). En collaboration avec Chi-Wang Shu, nous reprenons les méthodes WENO habituellement utilisées pour la simulation numérique de lois de conservation et de systèmes hyperboliques et développons des schémas de conservation de l'équilibre pour traiter convenablement les termes sources souvent discontinus. L'originalité de ce travail repose sur la préservation de l'ordre élevé de la méthode. En effet, la plupart des schémas de conservation de l'équilibre proposés dans la littérature sont au mieux d'ordre deux alors que notre approche se généralise à n'importe quel ordre et permet de traiter les discontinuités du terme source. Nous proposons également des simulations numériques justifiant l'utilisation de schémas d'ordre élevé (quatrième ordre en temps et espace) pour le mouvement de cellules. Dans un travail en cours, nous étudions la discrétisation du modèle parabolique de PKS. L'objectif est ici de simuler l'explosion de la solution en une mesure de Dirac pour des masses initiales suffisamment grandes. D'une part, nous proposons une preuve de convergence de la solution numérique vers la solution régulière de PKS et introduisons pour cela de nouvelles inégalités fonctionnelles discrètes. Par contre, l'étude théorique de l'explosion semble très difficile dans le cas général, nous réalisons alors des simulations numériques délivrant quelques pistes de recherche.

Ces différents chapitres ne sont pas aussi indépendants qu'il n'y paraît : les méthodes utilisées aux chapitres un et deux peuvent être couplées pour traiter des problèmes non ho-

mogènes (dépendant des variables de temps, espace et vitesse) non linéaires. Les méthodes étudiées dans le troisième chapitre sont également utilisées dans la dernière partie sur le chimiotactisme pour la réalisation de simulations numériques.

2. Publications

2.1 Simulations numériques de systèmes de particules chargées

Publications référées (parues ou acceptées) :

- A01** Conservative numerical schemes for the Vlasov equation, *J. Comp. Phys.* **172** 166-187 (2001), avec E. Sonnendrücker et P. Bertrand.
- A02** Comparison of eulerian Vlasov solvers, *Comput. Phys. Communications* **150** 247-266 (2003), avec E. Sonnendrücker.
- A03** A numerical method for the accurate solution of the Fokker-Planck-Landau equation in the nonhomogeneous case, *J. Comp. Phys.* **179** 1-26 (2002), avec L. Pareschi.
- A04** Global existence for the Vlasov-Darwin system in \mathbb{R}^3 for small initial data, *Mathematical Methods in the Applied Sciences* **26** 297-319 (2003), avec S. Benachour, Ph. Laurençot et E. Sonnendrücker.
- A05** Vlasov simulations of beams by a moving grid, *Comput. Phys. Communications* **164** 390-395 (2004), avec E. Sonnendrücker, E. Oudet, J.-L. Vay et A. Friedman.
- A06** Numerical approximation of collisional plasmas by high order methods, *J. Comp. Phys.* **201** 546-572 (2004), avec N. Crouseilles.
- A07** Analysis of the relativistic Vlasov-Maxwell model in an interval, *Quarterly Applied Math.* **63** (2005), avec Y. Guo et C.-W. Shu.
- A08** Modeling and numerical simulation of space charge dominated beams in the paraxial approximation, à paraître dans *Math. Models and Meth. in Applied Sciences*, avec E. Sonnendrücker.

Publications référées dans des proceedings, ou des chapitres de livre :

- P01** Comparison of numerical schemes for Fokker-Planck-Landau equation, *ESAIM Proceedings* **11** 161-181 (2001), avec C. Buet et S. Cordier.
- P02** An adaptive numerical method for the Vlasov equation based on a multiresolution analysis, *Brezzi, Franco (ed.) et al., Numerical mathematics and advanced applications. Proceedings of ENUMATH 2001, the 4th European conference, Ischia, July 2001. Berlin : Springer* 437-446 (2003), avec N. Besse, M. Gutnic, I. Paun et E. Sonnendrücker.
- P03** Numerical methods for the Vlasov equation, *Brezzi, Franco (ed.) et al., Numerical mathematics and advanced applications. Proceedings of ENUMATH 2001, the 4th European conference, Ischia, July 2001. Berlin : Springer* 459-468 (2003), avec E. Sonnendrücker.
- P04** Numerical solution of the nonhomogeneous Fokker-Planck-Landau equation, *Progress in industrial mathematics at ECMI 2000 (Palermo), Math. Ind., 1, Springer, Berlin* 325-331 (2002), avec L. Pareschi.
- P05** Direct Axisymmetric Vlasov Simulations of space charged dominated beams, *Sloot, Peter M. A. (ed.) et al., Computational science - ICCS 2002. 2nd international conference, Amsterdam, the Netherlands, April 21-24, (2002). Proceedings. Part 3. Berlin : Springer. Lect. Notes Comput. Sci.* **2331** 305-314 (2002), avec E. Sonnendrücker et J.-L. Lemaire.
- P06** Numerical solution of the Fokker-Planck-Landau equation by spectral methods, *Commun. Math. Sci.* **1** 1 206-207 (2003), avec L. Pareschi.

P07 A conservative and entropic method for the Vlasov-Fokker-Planck-Landau equation, *Numerical Methods for Hyperbolic and Kinetic Problems, IRMA Lectures in Mathematics and Theoretical Physics*, avec N. Crouseilles.

2.2 Méthodes spectrales pour l'équation de Boltzmann

Publications référées (parues ou acceptées) :

A09 High order numerical methods for the space nonhomogeneous Boltzmann equation, *J. Comput. Phys.* **186** 457-480 (2003), avec G. Russo.

A10 Accurate numerical methods for the Boltzmann equation, *Modeling and computational methods for kinetic equations, Model. Simul. Sci. Eng. Technol. Birkäuser, Eds. P. Degond, L. Pareschi et G. Russo* (2004), avec G. Russo.

A11 Accurate numerical methods for the collisional motion of (heated) granular flows, *J. Comp. Phys.* **202** 216-235 (2005), avec L. Pareschi et G. Toscani.

A12 Solving the Boltzmann equation in $N \log(N)$ with deterministic methods, submitted to *SIAM J. Scientific Comput.*, avec C. Mouhot et L. Pareschi.

Publications référées dans des proceedings, ou des chapitres de livre :

P08 A rescaling velocity method for kinetic equations : I. homogeneous case, *Proceedings Modelling and Numerics of Kinetic Dissipative Systems, Lipari, Italy, 2004, Nova-Science*, avec G. Russo.

2.3 Analyse de schémas volumes finis pour les équations d'évolutions

Publications référées (parues ou acceptées) :

A13 Convergence of a finite volume scheme for the one dimensional Vlasov-Poisson system, *SIAM J. Num. Anal.* **39** 1146-1169 (2001).

A14 Numerical approximation of the Lifschitz Slyozov equation (in self-similar variable), *SIAM J. Num. Anal.* **42** 563-588 (2003), avec Ph. Laurençot.

A15 Numerical simulation of the Smoluchowski coagulation equation, *SIAM J. Scientific Comput.* **26** 2004-2028 (2004), avec Ph. Laurençot.

A16 Mass-conserving solutions and non-conservative approximation to the Smoluchowski coagulation equation, *Archiv der Mathematik* **83** 558-567 (2004), avec Ph. Laurençot.

Publications référées dans des proceedings, ou des chapitres de livre :

P09 Convergence d'un schéma de type volumes finis pour le système de Vlasov-Poisson, *CRAS Paris t 330, série I Mathématique* 979-984 (2000).

2.4 Modélisation mathématique du chimiotactisme

Publications référées (parues ou acceptées) :

A17 Derivation of hyperbolic models for chemosensitive movement, *Journal of Mathematical Biology* **50** 189-207 (2005), avec Ph. Laurençot et B. Perthame.

A18 Approximation of hyperbolic models for chemosensitive movement, *SIAM J. Scientific Comput.* **27** 850-872 (2005), avec C.-W. Shu.

A19 A Finite Volume Scheme for the Patlak-Keller-Segel Chemotaxis Model, soumis à *Numerische Mathematik*.

Chapitre 1

Simulations numériques de systèmes de particules chargées

L'équation de Vlasov décrit l'évolution d'un système de particules sous l'effet du champ électromagnétique auto-consistant. L'inconnue $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{p})$, qui dépend du temps t , de la position $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$, et de l'impulsion $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3)$, représente la *fonction de distribution* de particules (électrons, ions,...) dans l'espace des phases (\mathbf{x}, \mathbf{p}) . Ce modèle peut être utilisé pour l'étude de la propagation de faisceaux ou l'évolution d'un plasma non-collisionnel et s'écrit sous la forme

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + q (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = 0, \quad (1.1)$$

où q est la charge tandis que la vitesse relativiste des particules $\mathbf{v}(\mathbf{p})$ est donnée par

$$\mathbf{v}(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}/m}{\sqrt{1 + |\mathbf{p}|^2/m^2 c^2}},$$

où m est la masse d'une particule et c est la vitesse de la lumière dans le vide. À partir de la fonction de distribution f , nous pouvons calculer les densités de charge et de courant

$$\rho(t, \mathbf{x}) = q \int_{\mathbb{R}^3} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) d\mathbf{p}, \quad \mathbf{j}(t, \mathbf{x}) = q \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{v}(\mathbf{p}) f(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) d\mathbf{p}.$$

Enfin, le champ électromagnétique est donné soit par l'équation de Poisson

$$-\Delta\phi = \frac{\rho}{\varepsilon_0}, \quad \mathbf{E} = -\nabla\phi, \quad \mathbf{B} = 0,$$

soit par le système de Maxwell (ε_0 est la permittivité du vide et μ_0 est tel que $\mu_0 \varepsilon_0 c^2 = 1$)

$$\begin{cases} \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \nabla \times \mathbf{B} = -\mu_0 \mathbf{j}, \\ \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times \mathbf{E} = 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \end{cases}$$

L'équation de Vlasov non linéaire a été étudiée par plusieurs auteurs : l'existence de solutions classiques pour le système de Vlasov-Poisson a été obtenue dans [10, 138, 144] et pour le système de Vlasov-Maxwell dans [35, 78, 79, 80] et plus récemment dans [16].

L'existence de solutions faibles pour Vlasov-Poisson est décrite dans [6, 47, 115] et pour Vlasov-Maxwell dans [48].

Concernant la discrétisation de l'équation de Vlasov, les méthodes Particle-In-Cell (PIC) sont le plus souvent utilisées et s'avèrent être un outil efficace pour la compréhension de l'évolution des systèmes de particules. Il s'agit d'approcher les trajectoires des particules en discrétisant le système différentiel formé par les courbes caractéristiques correspondant à l'équation de Vlasov. Le principal avantage de ces méthodes est qu'elles donnent des résultats relativement précis même lorsque le nombre de particules discrètes est peu élevé. Ainsi, elles permettent d'approcher la solution de l'équation de Vlasov sur une grande échelle de temps et pour une géométrie tridimensionnelle. Cependant, dans certains cas, nous sommes plutôt intéressés par des phénomènes de propagation d'onde nécessitant une description plus détaillée de la fonction de distribution, ces phénomènes pouvant se produire sur des échelles de temps plus courtes. Aussi, le bruit inhérent à la méthode PIC la rend souvent inadaptée à ce type de problème, puisqu'il diminue seulement en \sqrt{N} lorsque le nombre de particules N augmente. Il s'avère alors inutile d'ajouter plus de particules pour atténuer les effets du bruit. Une meilleure approche pour traiter de tels problèmes consiste donc à employer une méthode eulérienne qui discrétise l'équation de Vlasov sur une grille de l'espace des phases. Ce procédé est intrinsèquement exempt de bruit statistique et l'erreur est seulement associée à la discrétisation de l'équation de Vlasov sur la grille de l'espace des phases.

Le but de ce chapitre est de montrer l'efficacité de cette approche pour deux problèmes appliqués à la physique des plasmas. Nous décrivons d'abord brièvement la méthode de conservation des flux avec une reconstruction préservant la positivité. Cette méthode a déjà été proposée en collaboration avec Éric Sonnendrücker [59, 62] et consiste à approcher la solution de l'équation de Vlasov sur une grille de l'espace des phases en calculant le flux de particules. Toujours en collaboration avec Éric Sonnendrücker, nous proposons d'étudier le modèle paraxial, obtenu à partir du système stationnaire de Vlasov-Maxwell, pour la propagation d'un faisceau de particules chargées. Nous présentons quelques résultats justifiant le choix du champ électromagnétique appliqué pour focaliser un faisceau quelconque et concluons par des résultats numériques [60, 73]. La dernière partie, en collaboration avec Chi-Wang Shu et Yan Guo, est consacrée à l'étude de l'influence des conditions aux limites sur la régularité de la solution du système de Vlasov-Maxwell : nous nous intéressons à un modèle simplifié $1D$ en espace et $2D$ en vitesse, mais tenons compte des effets relativistes et magnétiques. D'une part, nous utilisons la technique du suivi des trajectoires développée par Yan Guo et montrons que le champ électromagnétique est suffisamment régulier pour définir rigoureusement les trajectoires des particules. D'autre part, en raison des conditions aux limites entrantes, f n'est en général pas régulière puisque seule sa variation totale est bornée. Cependant, cette estimation BV est suffisante pour garantir l'unicité de la solution [72].

1.1 La méthode de conservation du flot [59, 62]

Nous introduisons un nouveau schéma conservatif pour la discrétisation d'une équation de transport et proposons plusieurs techniques de reconstruction. Contrairement aux méthodes eulériennes classiques de type différences finies ou volumes finis explicites en temps, la méthode que nous proposons n'est pas contrainte par une condition CFL sur le pas de temps puisque nous utilisons le suivi des courbes caractéristiques.

Le couplage de l'équation de Vlasov avec les équations de Poisson ou de Maxwell engendre la "filamentation" de la fonction de distribution dans l'espace des phases, ceci

constitue la principale des difficultés dans la construction d'un schéma numérique pour l'équation de Vlasov. En effet, la fonction de distribution $f(t, x, v)$ est constante le long des courbes caractéristiques qui deviennent si proches les unes des autres que les régions de l'espace des phases où $f(t, x, v)$ prend des valeurs différentes se rapprochent et de forts gradients sont ainsi générés. À partir d'un certain temps, la grille de l'espace des phases devient trop grossière pour suivre ces filaments devenus trop fins. Les différentes méthodes proposées dans la littérature ne possèdent pas de mécanismes pour distinguer les oscillations numériques de ces filaments. L'algorithme devrait effectivement être d'ordre élevé lorsque le concept d'ordre est relié à celui de la précision et devrait contrôler les oscillations lorsque les gradients deviennent trop forts ou lorsque la fonction de distribution tend vers zéro. La méthode conservative mise au point est fondée sur ces principes.

Considérons l'équation de Vlasov sous sa forme conservative : nous observons d'abord qu'en utilisant un schéma à pas fractionnaire en temps, nous pouvons nous restreindre, sans perte de généralités, à une équation de transport en dimension un

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (u(t, x) f(t, x)) = 0, \quad (t, x) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}, \quad (1.2)$$

où u est une fonction régulière du temps et de l'espace.

Nous définissons les courbes caractéristiques correspondant à l'équation de transport, qui sont solutions du système d'équations différentielles suivant

$$\begin{cases} \frac{dX}{ds}(s) = u(s, X(s)), \\ X(t) = x. \end{cases} \quad (1.3)$$

Nous notons alors $X(s, t, x)$ la solution de (1.3) et définissons le jacobien $J(s, t, x) = \frac{\partial X}{\partial x}(s, t, x)$. Dans [15], il est prouvé que le jacobien $J(s, t, x)$ reste positif pour tout $(s, t, x) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}$, et la solution de l'équation de transport (1.2) décrit la conservation du flot de particules

$$\forall K \subset \mathbb{R}, \quad \int_K f(t, x) dx = \int_{X(s, t, K)} f(s, x) dx, \quad (1.4)$$

où

$$X(s, t, K) = \{y \in \mathbb{R} : y = X(s, t, z); z \in K\}.$$

Nous introduisons ensuite le maillage $(x_{i+1/2})_{i \in I}$ du domaine de calcul $[x_{min}, x_{max}]$ et posons $\Delta x = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$ et $C_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$. Supposons que les valeurs de la fonction de distribution sur le maillage soient connues au temps $t^n = n \Delta t$, nous trouvons les nouvelles valeurs au temps t^{n+1} en intégrant l'équation de Vlasov sur chaque intervalle discret. Ainsi, en utilisant la propriété de conservation des particules (1.4) et en rappelant que le jacobien $x \mapsto J(t^n, t^{n+1}, x)$ est strictement positif, nous obtenons sur chaque intervalle

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(t^{n+1}, x) dx = \int_{X(t^n, t^{n+1}, x_{i-1/2})}^{X(t^n, t^{n+1}, x_{i+1/2})} f(t^n, x) dx$$

et

$$\Phi_{i+1/2}(t^n) = \int_{X(t^n, t^{n+1}, x_{i+1/2})}^{x_{i+1/2}} f(t^n, x) dx,$$

pour finalement décrire la conservation de la masse

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(t^{n+1}, x) dx = \Phi_{i-1/2}(t^n) + \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(t^n, x) dx - \Phi_{i+1/2}(t^n). \quad (1.5)$$

L'évaluation de la moyenne de la solution sur $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ permet d'ignorer les détails de la solution exacte qui peuvent être très coûteux à estimer.

La principale étape consiste maintenant à choisir une méthode efficace pour reconstruire une approximation de la fonction de distribution à partir des valeurs moyennes sur chaque intervalle C_i . La méthode proposée dans [17, 18] fait appel aux limiteurs de pentes classiques comme "minmod" et "superbee" ; elle est malheureusement trop dissipative pour obtenir une description précise de la fonction de distribution. Ici, nous utilisons une reconstruction *via primitive* : soit $F(t^n, \cdot)$ une primitive de la fonction de distribution $f(t^n, \cdot)$, nous notons par

$$f_i^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(t^n, x) dx,$$

ainsi, $F(t^n, x_{i+1/2}) - F(t^n, x_{i-1/2}) = \Delta x f_i^n$, et

$$F(t^n, x_{i+1/2}) = \Delta x \sum_{k=0}^i f_k^n =: w_i^n.$$

Nous proposons différentes méthodes de reconstruction : l'interpolation WENO [1, 2, 147] et la méthode PFC [59] brièvement décrite ci-dessous.

La méthode de conservation des flux (PFC)

Comme pour la méthode WENO, nous utilisons une reconstruction *via primitive*, mais le "stencil" est désormais fixé. Pour assurer la préservation de la positivité et le principe du maximum dans l'étape de reconstruction, nous introduisons des correcteurs de pentes. En effet, c'est seulement en sacrifiant le principe d'ordre élevé que nous pourrions espérer obtenir un schéma positif. Dans la suite, nous notons par $f_\infty = \max_{j \in I} \{f_j\}$.

Une approximation d'ordre deux. Supposons pour simplifier que la vitesse de propagation $u(t, x)$ soit positive, nous construisons alors une première approximation de f , d'ordre élevé sur l'intervalle $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ en utilisant les points $\{x_{i-1/2}, x_{i+1/2}, x_{i+3/2}\}$ et la propriété $w_i - w_{i-1} = \Delta x f_i$:

$$\bar{F}_h(x) = w_{i-1} + (x - x_{i-1/2})f_i + \frac{1}{2}(x - x_{i-1/2})(x - x_{i+1/2})\frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x}.$$

Ainsi, par dérivation, nous obtenons une approximation d'ordre élevé de la fonction de distribution sur l'intervalle $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$:

$$\bar{f}_h(x) = \frac{d\bar{F}_h}{dx}(x) = f_i + (x - x_i)\frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x}.$$

Hélas, cette approximation ne satisfait pas le principe du maximum et des oscillations numériques peuvent apparaître. Pour y remédier, nous introduisons les correcteurs de pentes

$$\epsilon_i = \begin{cases} \min\left(1; 2f_i/(f_{i+1} - f_i)\right) & \text{si } f_{i+1} - f_i > 0, \\ \min\left(1; -2(f_\infty - f_i)/(f_{i+1} - f_i)\right) & \text{si } f_{i+1} - f_i < 0. \end{cases} \quad (1.6)$$

Nous définissons une nouvelle approximation, où les pentes sont atténuées lorsque la solution devient moins régulière,

$$f_h(x) = f_i + \epsilon_i(x - x_i)\frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x}, \quad \forall x \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]. \quad (1.7)$$

À partir de cette reconstruction, nous pouvons démontrer la proposition suivante

Proposition 1.1 *L'approximation numérique définie par (1.7) satisfait :*

- la conservation locale de la masse : pour tout $i \in I$, $\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f_h(x) dx = \Delta x f_i$,
- le principe du maximum : pour tout $x \in [x_{min}, x_{max}]$, $0 \leq f_h(x) \leq f_\infty$.

De plus, si nous supposons que la variation totale de la fonction de distribution $f(x)$ est bornée, l'estimation globale suivante a lieu

$$\int_{x_{min}}^{x_{max}} |f_h(x) - \bar{f}_h(x)| dx \leq \Delta x \sum_i (1 - \epsilon_i) |f_{i+1} - f_i| \leq TV(f) \Delta x.$$

Ainsi, nous définissons une approximation du flux $\Phi_{i+1/2}(t^n)$ en recherchant d'abord l'intervalle C_j tel que $X(t^n, t^{n+1}, x_{i+1/2}) \in C_j$ et nous posons

$$\alpha_i = x_{j+1/2} - X(t^n, t^{n+1}, x_{i+1/2}),$$

lequel satisfait $0 \leq \alpha_i \leq \Delta x$ et le flux de particules est enfin donné par

$$\Phi_{i+1/2}(t^n) = \int_{x_{j+1/2}-\alpha_i}^{x_{i+1/2}} f(t^n, x) dx = \alpha_i \left[f_j + \frac{\epsilon_j}{2} \left(1 - \frac{\alpha_i}{\Delta x} \right) (f_{j+1} - f_j) \right] + \Delta x \sum_{k=j+1}^i f_k.$$

Par symétrie, nous obtenons une approximation de $\Phi_{i+1/2}(t^n)$ lorsque la vitesse de propagation $u(t, x)$ est négative.

Reconstruction d'ordre trois : nous généralisons la méthode précédente à l'ordre trois. Sur l'intervalle $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$, nous utilisons les points d'interpolation $\{x_{i-3/2}, x_{i-1/2}, x_{i+1/2}, x_{i+3/2}\}$ pour approcher la fonction primitive, et introduisons des correcteurs de pentes pour finalement définir une nouvelle approximation

$$\begin{aligned} \Phi_{i+1/2}(t^n) &= \int_{x_{j+1/2}-\alpha_i}^{x_{i+1/2}} f(t^n, x) dx = \Delta x \sum_{k=j+1}^i f_k \\ &+ \alpha_i \left[f_j + \frac{\epsilon_j^+}{6} \left(1 - \frac{\alpha_i}{\Delta x} \right) \left(2 - \frac{\alpha_i}{\Delta x} \right) (f_{j+1} - f_j) + \frac{\epsilon_j^-}{6} \left(1 - \frac{\alpha_i}{\Delta x} \right) \left(1 + \frac{\alpha_i}{\Delta x} \right) (f_j - f_{j-1}) \right], \end{aligned}$$

où ϵ_j^\pm est un correcteur de pente similaire à celui proposé plus haut (1.6).

Nous présentons dans la suite deux applications en physique des faisceaux où l'utilisation d'une méthode eulérienne est particulièrement bien adaptée.

1.2 Le modèle paraxial [60, 67, 73]

L'équation de Vlasov est couramment utilisée pour l'étude de la propagation de faisceaux de particules chargées ou de plasmas. Pour les faisceaux de particules, nous pouvons obtenir un modèle simplifié sous les hypothèses suivantes

- Le faisceau est stationnaire : toutes les dérivées partielles par rapport au temps disparaissent.
- Le faisceau se propage à vitesse constante v_b le long de l'axe de propagation x_3 .

– (p_1, p_2, p_3) avec $p_1, p_2 \ll p_b$ où $p_b = \gamma m v_b$ et

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - |\mathbf{v}(\mathbf{p})|^2/c^2}}.$$

Il vient en particulier

$$\beta \approx \beta_b = (v_b/c)^2, \quad \gamma \approx \gamma_b = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta_b^2}}.$$

– Le faisceau est cylindrique c'est-à-dire la dimension transverse du faisceau est petite par rapport à sa longueur caractéristique.

Le modèle paraxial est une approximation du système de Vlasov-Maxwell obtenue en conservant seulement les premiers termes dans le développement asymptotique de la fonction de distribution et du champ électromagnétique par rapport à $\eta = l/L$, où l désigne la longueur caractéristique transverse et L est la longueur caractéristique longitudinale [37] avec

$$\eta = l/L \ll 1.$$

Par ailleurs, par souci de simplicité nous négligeons les variations du faisceau par rapport à la vitesse moyenne longitudinale v_b . Plus précisément, nous posons $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$, $\mathbf{p} = (p_1, p_2)$ et

$$f = f(\mathbf{x}, x_3, \mathbf{p}), \quad \phi = \phi(\mathbf{x}, x_3), \quad \mathbf{B} = (B_1(\mathbf{x}, x_3), B_2(\mathbf{x}, x_3);)$$

où la fonction de distribution $f(\mathbf{x}, x_3, \mathbf{p}) \delta(p_3 - p_b)$ est une solution particulière de l'équation de Vlasov d'origine (1.1). À partir des hypothèses ci-dessus, f est une solution (au sens des distributions) de

$$v_b \frac{\partial f}{\partial x_3} + \mathbf{v}(\mathbf{p}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + q \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = 0, \quad (1.8)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla_{\mathbf{x}} \phi, \quad -\Delta_{\mathbf{x}} \phi = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad \rho = q \int_{\mathbb{R}^2} f d\mathbf{p}, \quad (1.9)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial B_2}{\partial x_1} - \frac{\partial B_1}{\partial x_2} = \mu_0 v_b \rho, \\ \frac{\partial B_1}{\partial x_1} + \frac{\partial B_2}{\partial x_2} = -\frac{dB_3}{dx_3} \end{cases} \quad (1.10)$$

et $\mathbf{F} = (F_1, F_2)$ est donné par

$$F_1 = -\frac{\partial \phi}{\partial x_1} - v_b B_2 + \frac{p_2}{m \gamma_b} B_3, \quad F_2 = -\frac{\partial \phi}{\partial x_2} + v_b B_1 - \frac{p_1}{m \gamma_b} B_3.$$

Pour confiner le faisceau de particules dans le plan transverse, le champ électromagnétique extérieur doit être maintenant appliqué. Pour cela, nous considérons trois types de forces de focalisation qui sont la plupart du temps employées dans les accélérateurs :

1. Un champ électrique uniforme

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = -\frac{\gamma_b m}{q} \omega_0^2 (x_1 \mathbf{e}_1 + x_2 \mathbf{e}_2),$$

où ω_0 est calculé de manière à focaliser le faisceau (voir parties 1.2.1 et 1.2.2).

2. Focalisation périodique par un champ magnétique

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) = B(x_3) \mathbf{e}_3 - \frac{1}{2} \frac{dB}{dx_3}(x_3) (x_1 \mathbf{e}_1 + x_2 \mathbf{e}_2),$$

où la composante longitudinale du champ magnétique $B(x_3)$ est donnée (voir les parties 1.2.1 et 1.2.2) et satisfait la condition de périodicité $B(x_3 + S) = B(x_3)$ avec $S > 0$.

3. Focalisation par gradients alternés

– soit par un champ magnétique

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \frac{dB}{dx_3}(x_3) (x_2 \mathbf{e}_1 + x_1 \mathbf{e}_2),$$

lequel correspond à un potentiel

$$\psi^e(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \frac{dB}{dx_3}(x_3) (x_1^2 - x_2^2),$$

et $\frac{dB}{dx_3}$ est donné (voir parties 1.2.1 et 1.2.2).

– soit par un champ électrique de la forme

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = \frac{dE}{dx_3}(x_3) (x_1 \mathbf{e}_1 - x_2 \mathbf{e}_2),$$

lequel correspond à un potentiel

$$\phi^e(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \frac{dE}{dx_3}(x_3) (x_1^2 - x_2^2),$$

et $\frac{dE}{dx_3}$ est donné (voir parties 1.2.1 et 1.2.2).

Le modèle paraxial est considérablement plus simple que le modèle de Vlasov-Maxwell. D'une part, nous avons remplacé l'équation stationnaire de Vlasov par l'équation paraxiale (1.8) où la coordonnée longitudinale x_3 joue le rôle de la variable du temps et peut donc être numériquement résolue par un procédé itératif. D'autre part, les équations stationnaires de Maxwell sont remplacées par les équations bidimensionnelles de Poisson où x_3 agit seulement comme un paramètre. L'étape suivante est consacrée au calcul du champ électromagnétique appliqué de sorte que le faisceau soit focalisé. Ainsi, nous introduisons d'abord une solution explicite du modèle paraxial, appelée distribution de Kapchinsky-Vladimirsky (*KV*) et définissons ensuite le concept de faisceaux de particules équivalents *rms*. À l'aide de la définition de faisceaux équivalents, nous générons une fonction de distribution initiale f_0 et utilisons les champs appliqués correspondant à la fonction de distribution *KV* pour focaliser la distribution f_0 donnée en $x_3 = 0$. Nous concluons cette partie en présentant des simulations numériques de faisceaux de particules chargées en utilisant la méthode PFC présentée précédemment.

1.2.1 La distribution de Kapchinsky-Vladimirsky

Dans cette section, nous présentons la distribution *KV*, qui est une solution mesure du modèle paraxial. Pour cela, nous commençons par introduire deux fonctions κ_1 et κ_2 , périodiques par rapport à la variable x_3 (de période S). Ces fonctions vont correspondre

aux forces de focalisation décrites dans la partie précédente (uniforme, périodique et gradients alternés).

Nous notons ensuite par $N_0 = \int f \, d\mathbf{x} \, d\mathbf{v}$ la densité totale de particules et la pervéance K (un paramètre adimensionné relié aux champs auto-consistants)

$$K = \frac{q^2 N_0}{2\pi\epsilon_0 \gamma_b^3 m v_b^2}.$$

Finalement, ϵ_1 et ϵ_2 représentent l'émittance du faisceau, c'est-à-dire le volume occupé par le faisceau dans l'espace des phases (x_1, p_1) et (x_2, p_2) (à une constance π près).

Théorème 1.1 *Nous supposons que $\kappa_1(x_3)$ et $\kappa_2(x_3)$ satisfont*

$$\frac{d}{dx_3} \kappa_1(x_3) \leq C \kappa_1(x_3), \quad \frac{d}{dx_3} \kappa_2(x_3) \leq C \kappa_2(x_3). \quad (1.11)$$

Nous définissons la fonction de distribution KV par [102]

$$f_{KV}(x_1, x_2, x_3, p_1, p_2) = \frac{N_0}{\pi^2 \epsilon_1 \epsilon_2} \delta_0 \left(\frac{x_1^2}{a_1^2} + \frac{x_2^2}{a_2^2} + \frac{(a_1 p_1 - a_1' x_1)^2}{\epsilon_1^2} + \frac{(a_2 p_2 - a_2' x_2)^2}{\epsilon_2^2} - 1 \right), \quad (1.12)$$

où $a_1(\cdot)$, $a_2(\cdot)$ sont solutions de l'équation d'enveloppe (voir [34, 141])

$$a_1'' + \kappa_1(x_3) a_1 - \frac{2K}{a_1 + a_2} - \frac{\epsilon_1^2}{a_1^3} = 0, \quad a_2'' + \kappa_2(x_3) a_2 - \frac{2K}{a_1 + a_2} - \frac{\epsilon_2^2}{a_2^3} = 0, \quad (1.13)$$

où a_i' et a_i'' représentent respectivement la première et la deuxième dérivée par rapport à la variable x_3 . Alors, f_{KV} est une solution mesure du modèle paraxial (1.8)-(1.9) et le champ électrique auto-consistant E^s est solution de l'équation de Poisson et vérifie

$$E^s(x_1, x_2) = \begin{cases} \frac{qN_0}{\pi\epsilon_0(a_1 + a_2)} \begin{pmatrix} x_1/a_1 \\ x_2/a_2 \end{pmatrix} & \text{si } \frac{x_1^2}{a_1^2} + \frac{x_2^2}{a_2^2} \leq 1, \\ \rightarrow 0 & \text{lorsque } x_1, x_2 \rightarrow \infty. \end{cases}$$

À partir de ce théorème, nous dirons qu'une distribution KV représente un faisceau focalisé lorsque la solution de l'équation d'enveloppe (1.13) est périodique avec la même période S que le champ électromagnétique appliqué κ_1 et κ_2 . Nous décrivons maintenant la procédure formelle qui conduit à focaliser un faisceau quelconque à partir d'une solution KV .

1.2.2 La focalisation d'un faisceau quelconque

Dans la partie précédente, nous avons vu que la distribution KV présente un intérêt particulier puisque nous pouvons calculer le champ électromagnétique et les paramètres physiques d'une manière explicite (ou du moins numérique en discrétisant seulement l'équation d'enveloppe (1.13)) pour que le faisceau soit focalisé. Cependant, le faisceau KV ne correspond pas exactement aux faisceaux créés en laboratoire (la fonction de distribution est une mesure de Dirac dans l'espace phases) et il n'est donc pas possible de calculer une solution exacte correspondant à n'importe quelle donnée initiale.

Sacherer [143] et Lapostolle [105] ont donc introduit le concept de faisceaux équivalents *rms* (*root mean square*), qui permet de confiner n'importe quel faisceau.

Définition 1.1 Nous considérons deux faisceaux, représentés par leur fonction de distribution f_1 et f_2 , composés du même type de particules et se propageant à la même vitesse v_b . Nous dirons que ces deux faisceaux sont équivalents *rms*, si les deux fonctions de distributions vérifient

$$\int_{\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2} f_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}) d\mathbf{p} d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2} f_2(\mathbf{x}, \mathbf{p}) d\mathbf{p} d\mathbf{x} \quad (1.14)$$

et ont de plus les mêmes moments d'ordre deux en espace et en vitesse

$$\int_{\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2} |\mathbf{x}_i|^2 f_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}) d\mathbf{p} d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2} |\mathbf{x}_i|^2 f_2(\mathbf{x}, \mathbf{p}) d\mathbf{p} d\mathbf{x}, \quad i = 1, 2 \quad (1.15)$$

et

$$\int_{\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2} |\mathbf{p}_i|^2 f_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}) d\mathbf{p} d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2} |\mathbf{p}_i|^2 f_2(\mathbf{x}, \mathbf{p}) d\mathbf{p} d\mathbf{x}, \quad i = 1, 2. \quad (1.16)$$

Nous calculons d'abord un faisceau *KV* périodique en la variable x_3 et définissons le champ électromagnétique associé. Puis, nous déterminons la fonction de distribution initiale f_0 associée à un faisceau quelconque en calculant ses moments d'ordre deux en espace et en vitesse et en les identifiant à ceux du faisceau *KV* équivalent *rms* périodique. Nous présentons ici un algorithme permettant de calculer les paramètres physiques pour le confinement d'un faisceau quelconque.

- Considérons un faisceau se propageant avec une vitesse constante v_b et avec un courant déterminé par le nombre total de particules N_0 , liés par la relation $N_0 = \frac{I}{qv_b}$. Nous fixons également l'émittance $\epsilon = (\epsilon_1, \epsilon_2)$.
- Nous calculons alors la pervéance du faisceau *KV* correspondant à l'amplitude du champ électrique auto-consistant

$$K = \frac{q^2 N_0}{2\pi\epsilon_0 \gamma_b^3 m v_b^2}.$$

- Nous choisissons les forces de focalisation parmi les trois configurations présentées précédemment (uniforme, périodique, gradients alternés).

Ces paramètres étant déterminés, nous pouvons calculer (au moins numériquement) une solution périodique (de période S) de l'équation d'enveloppe (1.13), où S est la période de la force de confinement. Ainsi, le faisceau *KV* focalisé est complètement déterminé et nous pouvons calculer les moments d'ordre deux en espace et en vitesse de la solution f_{KV} (1.12) en supposant par exemple que $\|f_{KV}\|_{L^1} = 1$, nous avons

$$\int_{\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2} |\mathbf{x}_i|^2 f_{KV}(x_3 = 0, \mathbf{x}, \mathbf{p}) d\mathbf{p} d\mathbf{x} = \frac{a_{0,i}^2}{4}, \quad i = 1, 2$$

et

$$\int_{\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2} |\mathbf{p}_i|^2 f_{KV}(x_3 = 0, \mathbf{x}, \mathbf{p}) d\mathbf{p} d\mathbf{x} = \frac{\epsilon_i^2}{4a_{0,i}^2}, \quad i = 1, 2,$$

où $a_{0,i}$ correspond à la donnée initiale de l'équation d'enveloppe (1.13) c'est-à-dire $a_{0,i} = a_i(0)$ et $a'_{0,i} = 0$.

Nous considérons ensuite un faisceau quelconque représenté par sa fonction de distribution f_0 telle que $\|f_0\|_{L^1} = 1$ et pour $i = 1, 2$,

$$\int_{\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2} |\mathbf{x}_i|^2 f_0(x_3 = 0, \mathbf{x}, \mathbf{p}) d\mathbf{p} d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2} |\mathbf{p}_i|^2 f_0(x_3 = 0, \mathbf{x}, \mathbf{p}) d\mathbf{p} d\mathbf{x} = 1.$$

Alors, nous cherchons à redimensionner la fonction de distribution f_0 de sorte qu'elle soit équivalente au sens *rms* au faisceau *KV* périodique que nous venons de construire. Nous introduisons pour cela $(\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2)$ tel que

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{1}{\alpha_1 \alpha_2 \beta_1 \beta_2} f_0 \left(\frac{x_1}{\alpha_1}, \frac{x_2}{\alpha_2}, \frac{p_1}{\beta_1}, \frac{p_2}{\beta_2} \right).$$

En utilisant la Définition 1.1, nous obtenons alors

$$\alpha_i = \frac{a_{0,i}}{2}, \quad \beta_i = \frac{\epsilon_i}{2 a_{0,i}}, \quad i = 1, 2.$$

Cette procédure est complètement formelle dans le sens où elle n'assure pas de manière rigoureuse que le faisceau f sera exactement focalisé c'est-à-dire périodique en x_3 . De plus, les quantités *rms* introduites dans la Définition 1.1 pourraient diverger lorsque x_3 tend vers l'infini. Dès lors, l'analyse mathématique de ce problème devient très difficile. Nous présentons néanmoins des résultats de simulations numériques utilisant la méthode de conservation des flux, qui montrent que cette approche donne des résultats très satisfaisants en pratique.

1.2.3 Focalisation alternée

Dans cet exemple, nous considérons un faisceau, composé de protons, qui est confiné à l'aide d'une méthode de gradients alternés : le champ électrique est donné par

$$\vec{E}(x_1, x_2, x_3) = \begin{pmatrix} +k_0(x_3) x_1 \\ -k_0(x_3) x_2 \end{pmatrix},$$

avec pour $x_3 \in (0, 1)$

$$k_0(x_3) = \begin{cases} +1 & \text{si } 0 < x_3 < 1/8, \text{ ou } 7/8 < x_3 < 1, \\ 0 & \text{si } 1/8 < x_3 < 3/8, \text{ ou } 5/8 < x_3 < 7/8, \\ -1 & \text{si } 3/8 < x_3 < 5/8. \end{cases}$$

L'émittance du faisceau est choisie $\epsilon = 2 \cdot 10^{-4} \pi$ mrad. La fonction de distribution initiale à $x_3 = 0$ est une distribution de type Maxwell-Boltzmann avec $n_0 = \frac{I}{q v_b}$, le courant $I = 0.1$ A et l'énergie du faisceau est $W = 0.2$ MeV, ce qui donne $v_b = 6.19 \cdot 10^6$ m.s⁻¹ et

$$f_0(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{n_0}{4\pi^2 \beta_1 \beta_2 \alpha_1 \alpha_2} e^{(-r^2/2)}, \quad r^2 = \left(\frac{x_1}{\alpha_1} \right)^2 + \left(\frac{x_2}{\alpha_2} \right)^2 + \left(\frac{p_1}{\beta_1} \right)^2 + \left(\frac{p_2}{\beta_2} \right)^2.$$

Pour ces paramètres physiques, la distribution *KV* équivalente *rms* n'est pas connue de manière exacte mais nous calculons une approximation numérique de l'équation d'enveloppe (1.13) pour obtenir une solution périodique $(a_1(\cdot), a_2(\cdot))$, ce qui permet ensuite de déterminer le faisceau *KV* équivalent (1.12). Ainsi, les paramètres initiaux $(\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2)$ pour $x_3 = 0$ permettant de définir le faisceau de Maxwell-Boltzmann sont calculés en utilisant le concept de faisceau équivalent *rms* (1.14)-(1.16). En suivant cette procédure, la distribution de Maxwell-Boltzmann n'est pas exactement périodique en la variable x_3 . Nous

présentons sur la Figure 1.1, l'évolution des quantités *rms*, c'est-à-dire les moments d'ordre deux en espace $(x_i^{rms})_{i \in \{1,2\}}$ et vitesse $(p_i^{rms})_{i \in \{1,2\}}$, du faisceau Maxwell-Boltzmann et de la distribution *KV* équivalente. Nous constatons alors que les quantités *rms* demeurent très proches pour les deux faisceaux, ce qui permet de valider la méthode de Sacherer et Lapostolle. Observons aussi sur la première figure du haut et du bas (voir Figure 1.1) que le faisceau de Maxwell-Boltzmann n'est pas initialement symétrique puisque $\alpha_1 \neq \alpha_2$, ainsi l'évolution des deux moments d'ordre deux en espace notés x_1^{rms} et x_2^{rms} , est loin d'être identique : les fréquences d'oscillations des deux faisceaux (Maxwell-Boltzmann et *KV*) restent très proches alors que l'amplitude de x_1^{rms} et p_1^{rms} (moment d'ordre deux en p_1) de la distribution de Maxwell-Boltzmann est beaucoup plus importante que celle du faisceau *KV*.

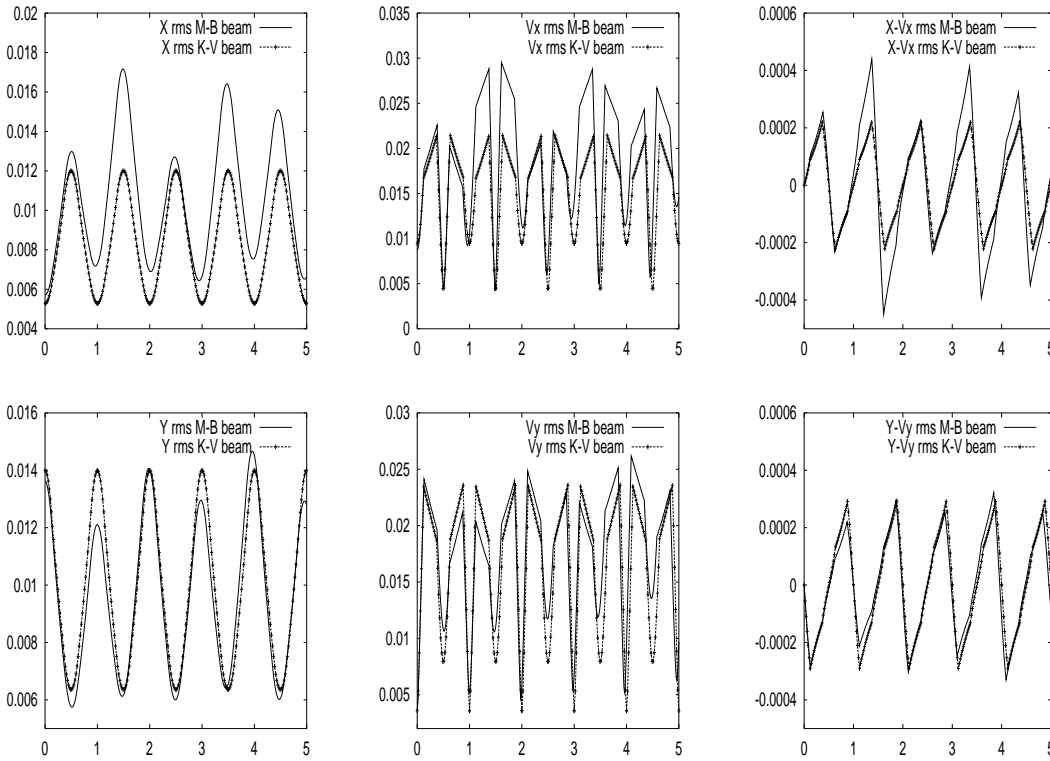


FIG. 1.1 – Évolution des quantités *rms* obtenues par une méthode PFC pour une distribution initiale de type Maxwell-Boltzmann et un faisceau *KV*.

Ce phénomène d'amplification de l'enveloppe peut être observé plus précisément sur les coupes de la fonction de distribution $x_1 - x_2$, $x_1 - p_1$ et $x_2 - p_2$ présentées sur la Figure 1.2. Les courbes représentent les lignes de niveaux correspondant à 0.5, 0.1, 0.01 et 0.001 du maximum normalisé à un de l'espace des phases. Contrairement à ce qu'il se passe pour le faisceau *KV*, les trajectoires du faisceau ne sont pas des ellipses et les champs auto-consistants engendrent la filamentation de la fonction de distribution. Le faisceau est alternativement focalisé dans une direction tandis qu'il est défocalisé dans l'autre. Après plusieurs périodes (environ 100) le faisceau se stabilise et devient quasi-périodique.

Les résultats numériques présentés dans cette section viennent ainsi valider le concept de faisceaux équivalents introduit par Sacherer [143] et Lapostolle [105] (voir section 1.2.2). Ceci permet de calculer les paramètres physiques (densité, courant, énergie et champs appliqués) pour le confinement d'un faisceau donné par une fonction de distribution initiale

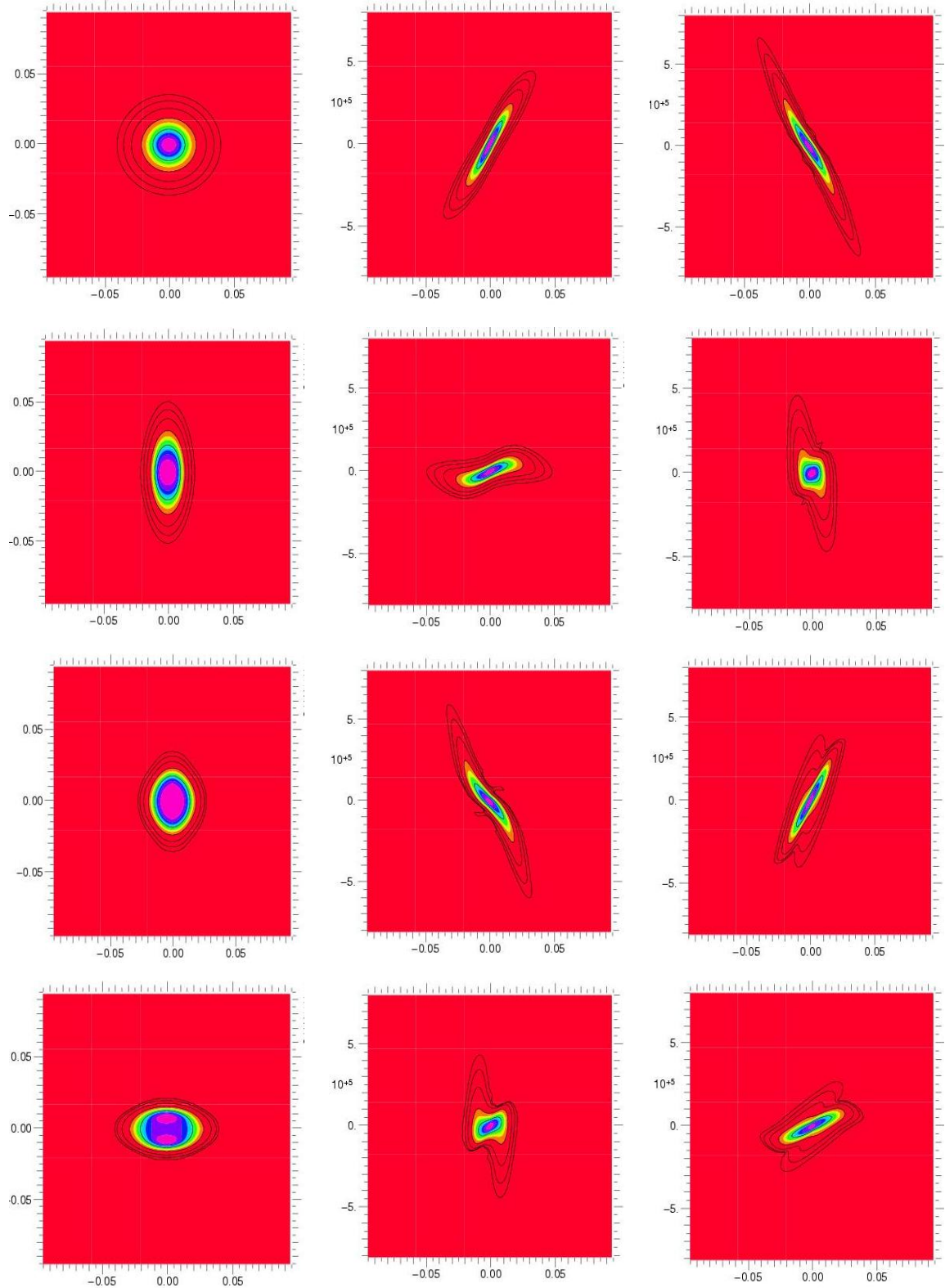


FIG. 1.2 – Évolution par rapport à x_3 des coupes $x_1 - x_2$, $x_1 - p_1$ et $x_2 - p_2$ de la fonction de distribution $f(\mathbf{x}, x_3, \mathbf{v})$ obtenue par la méthode PFC pour un faisceau initial de type Maxwell-Boltzmann pour $x_3=0, 1, 2, 4$.

(donnée à $x_3 = 0$) quelconque.

Finalement, ces simulations numériques justifient aussi l'intérêt des méthodes PFC qui utilisent une grille de l'espace des phases pour l'étude de phénomènes transitoires nécessitant une discrétisation précise de l'équation de Vlasov.

Ces méthodes étant dépourvues de bruit numérique, nous pouvons obtenir d'une part une description précise des quantités macroscopiques mais aussi de la fonction de distribution dans l'espace des phases.

1.3 Le système de Vlasov-Maxwell avec conditions aux limites [72]

Les nouveaux accélérateurs de particules et lasers sont désormais capables de générer des faisceaux de particules complètement relativistes et mettant en jeu de forts champs magnétiques (faible émission et fort courant) de telle sorte que les effets relativistes et électromagnétiques générés par le mouvement des particules ne peuvent plus être négligés. Cependant, nous pouvons utiliser certaines symétries de la géométrie du dispositif des accélérateurs pour réduire la dimension du problème sans pour autant négliger les effets magnétiques et relativistes. Le propos de ce travail est d'étudier la dynamique d'un gaz d'électrons sous l'effet du champ électromagnétique. Dans un tel contexte relativiste, l'influence des conditions aux limites est toujours primordiale. Ainsi, la question de la régularité de la solution de l'équation de Vlasov et l'unicité en présence de conditions aux limites reste une question mathématique ouverte. Ici nous étudions le système de Vlasov-Maxwell de dimension un en espace et deux en vitesse, qui représente le modèle classique de propagation d'un faisceau dans une diode plane.

1.3.1 Le modèle mathématique

Considérons un gaz d'électrons émis en $x = 0$ et absorbé en $x = 1$. Sous l'effet d'un potentiel extérieur, la dynamique du gaz contenu dans une diode plane est modélisée par le système de Vlasov-Maxwell [78]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_1(\mathbf{p}) \frac{\partial f}{\partial x} + q(\mathbf{E} + \mathbf{v}(\mathbf{p}) \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = 0, \quad t \in \mathbb{R}^+, x \in (0, 1), \mathbf{p} \in \mathbb{R}^2, \quad (1.17)$$

avec la vitesse relativiste

$$\mathbf{v}(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}/m}{\sqrt{1 + |\mathbf{p}|^2/m^2c^2}}$$

pour $\mathbf{p} = (p_1, p_2)$. La fonction de distribution $f(t, x, p_1, p_2)$ et le champ électromagnétique

$$\mathbf{E} = (E_1, E_2, 0); \quad \mathbf{B} = (0, 0, B)$$

satisfont le système de Maxwell suivant

$$\begin{cases} \frac{1}{c^2} \frac{\partial E_1}{\partial t} = -\mu_0 j_1(t, x) \equiv -\mu_0 q \int_{\mathbb{R}^2} v_1(\mathbf{p}) f(t, x, \mathbf{p}) d\mathbf{p}, \\ \frac{1}{c^2} \frac{\partial E_2}{\partial t} + \frac{\partial B}{\partial x} = -\mu_0 j_2(t, x) \equiv -\mu_0 q \int_{\mathbb{R}^2} v_2(\mathbf{p}) f(t, x, \mathbf{p}) d\mathbf{p}, \\ \frac{\partial B}{\partial t} + \frac{\partial E_2}{\partial x} = 0, \end{cases} \quad (1.18)$$

avec la contrainte

$$\frac{\partial E_1}{\partial x} = \rho(t, x) \equiv q \int_{\mathbb{R}^2} f(t, x, \mathbf{p}) d\mathbf{p}.$$

La donnée initiale est donnée par

$$f(0, x, \mathbf{p}) = f_0(x, \mathbf{p})$$

tandis que les conditions aux limites pour la fonction de distribution des électrons vérifie

$$f(t, 0, \mathbf{p}) = g(t, \mathbf{p}), \quad p_1 > 0, \quad (1.19)$$

$$f(t, 1, \mathbf{p}) = 0, \quad p_1 < 0. \quad (1.20)$$

Pour le champ électromagnétique, les données initiales sont

$$E_1(0, x) = E_{1,0}(x), \quad E_2(0, x) = E_{2,0}(x), \quad B(0, x) = B_0(x), \quad x \in (0, 1) \quad (1.21)$$

et des conditions aux limites de conducteurs parfaits ($\mathbf{E} \times \mathbf{n} = 0$, $\mathbf{B} \cdot \mathbf{n} = 0$) sont prescrites pour E_2

$$E_2(t, 0) = E_2(t, 1) = 0, \quad t \in \mathbb{R}^+. \quad (1.22)$$

1.3.2 Résultat principal : existence et unicité d'une solution BV

L'étude mathématique du problème aux limites non linéaire pour l'équation de Vlasov a été initiée par les travaux de Greengard et Raviart [85], où des solutions stationnaires (indépendantes du temps t) sont construites (ces solutions stationnaires n'étant généralement pas continues). Une généralisation en dimension supérieure a été proposée dans [36] et [139].

Plus récemment, Yan Guo *et al.* [88] ont fourni une analyse complète du problème de Vlasov-Poisson avec des conditions aux limites entrantes et ont montré que pour une différence de potentiel appliqué suffisamment importante, la solution appartient seulement à l'espace BV et ne peut pas être continue. Dans ce travail, nous étendons cette étude au système de Vlasov-Maxwell avec des conditions aux limites entrantes en tenant compte de l'effet supplémentaire du champ magnétique auto-consistant et extérieur.

Introduisons maintenant quelques notations. Pour une constante positive arbitraire T , nous définissons la région $\Omega = (0, 1) \times \mathbb{R}^2$ et

$$\Pi = [0, T] \times [0, 1] \times \mathbb{R}^2, \quad \Pi_s = \Pi \cap \{t = s\}, \quad 0 \leq s \leq T.$$

L'ensemble des conditions entrantes en $\{x = 0\}$ et $\{x = 1\}$ est donné par

$$\gamma_0^+ = \{(t, 0, \mathbf{p}), \quad v_1(\mathbf{p}) > 0, \quad 0 \leq t \leq T\}, \quad \gamma_1^- = \{(t, 1, \mathbf{p}), \quad v_1(\mathbf{p}) < 0, \quad 0 \leq t \leq T\}.$$

Notre résultat principal pour le problème non linéaire est le suivant (en supposant pour simplifier $q = m = \mu_0 = c = 1$).

Théorème 1.2 *Supposons que*

$$f_0(x, \mathbf{p}) \in L^\infty \cap BV(\Pi_0), \quad g(t, \mathbf{p}) \in L^\infty \cap BV(\gamma_0^+)$$

sont à support compact et

$$E_{1,0}, E_{2,0}, B_0 \in C^{0,1}([0, 1]).$$

Alors, il existe une unique solution faible

$$f \in BV \cap L^\infty(\Pi), \quad E_1, E_2, B \in C^{0,1}([0, T] \times [0, 1])$$

du système non linéaire de Vlasov-Maxwell avec les conditions aux limites (1.17)-(1.22).

La preuve est fondée sur les arguments suivants : nous donnons d'abord des estimations *a priori* sur le champ électromagnétique (E, B) et sur la fonction de distribution f . L'argument clé consiste à établir une borne L^∞ sur les champs qui ne dépende que de l'énergie totale. Nous suivons pour cela l'idée de Glassey et Schaeffer pour le problème posé sur tout l'espace [78]. Nous introduisons la décomposition suivante :

$$k^\pm(t, x) = E_2(t, x) \pm B(t, x),$$

où k^+ et k^- satisfont les équations de transport

$$\frac{\partial k^\pm}{\partial t} \pm \frac{\partial k^\pm}{\partial x} = -j_2(t, x). \quad (1.23)$$

Nous établissons des bornes sur k^+ et k^- dont on peut déduire des estimations uniformes sur les champs E_2 et B . Pour cela, nous écrivons la solution de l'équation (1.23) à l'aide des courbes caractéristiques correspondantes. À cause des conditions aux limites, nous devons décomposer le domaine de l'espace (t, x) en quatre différentes régions et estimer la solution k^\pm sur chaque région (voir Figure 1.3). Ensuite, en utilisant les bornes naturelles

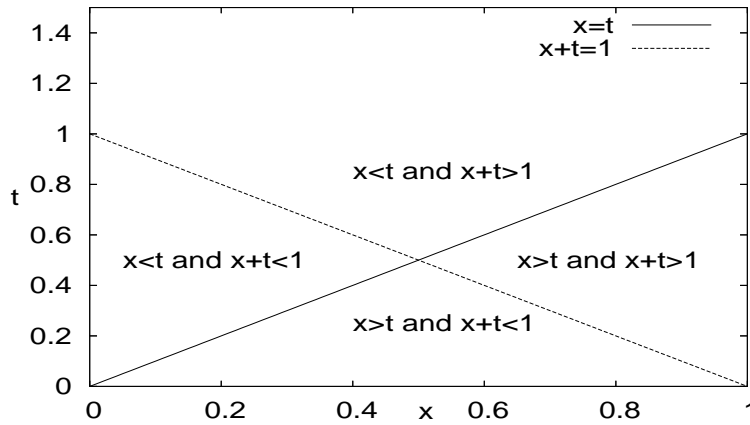


FIG. 1.3 – L'ensemble espace-temps permettant de distinguer les différents cas pour l'estimation de k^\pm .

de l'énergie, nous obtenons des estimations sur les termes suivants

$$\int_{\alpha}^t j_2(\tau, x - t + \tau) d\tau, \quad \alpha \in \{0, t - x\}, \quad \int_{\beta}^t j_2(\tau, x + t - \tau) d\tau, \quad \beta \in \{0, t + x - 1\}$$

et

$$k^+(s, 0), \quad k^-(s, 1), \quad s \in [0, T].$$

Ainsi, nous établissons des bornes L^∞ sur les fonctions k^\pm et donc sur (E_2, B) . Finalement, en poursuivant l'étude nous obtenons des bornes $C^{0,1}$ sur le champ électromagnétique, et nous pouvons de ce fait définir correctement les courbes caractéristiques correspondant à l'équation de Vlasov (1.17) et obtenir des estimations uniformes sur les trajectoires.

Concernant les estimations sur la fonction de distribution, nous prouvons une estimation BV sur f , nous donnons alors une régularisation de l'équation de Vlasov linéaire en ajoutant un terme source d'amortissement au point de singularité $(x, p_1) = (0, 0)$. En utilisant un schéma itératif et en passant à la limite, nous prouvons l'existence d'une solution faible pour le système de Vlasov-Maxwell. Finalement l'unicité se déduit à partir de l'estimation BV sur la fonction de distribution f .

1.3.3 Simulations numériques

Dans cette section, nous présentons quelques résultats de simulations numériques illustrant la formation d'une singularité pour le système de Vlasov-Maxwell en $1D - 2D$. Ces résultats sont obtenus à partir de deux méthodes différentes : d'abord une méthode de type différences finies avec interpolation WENO [100, 147] et un schéma PFC présenté dans la première partie ¹. Nous considérons le système (1.17)-(1.18) avec une donnée initiale nulle pour f et des conditions initiales sur les champs $\mathbf{E}(0) = 0$, $B(0) = 1$ et les conditions aux limites suivantes

$$\begin{aligned} f(t, 0, \mathbf{p}) &= g(t, \mathbf{p}) = \frac{1}{2\pi} |\mathbf{p}|^2 \exp\left(-\frac{|\mathbf{p}|^2}{2}\right) \frac{t^2}{1+t^2}, p_1 > 0, \\ f(t, 1, \mathbf{p}) &= 0, p_1 < 0. \end{aligned}$$

Nous réalisons plusieurs simulations avec $n_{x_1}=n_{p_1}=n_{p_2}=N$ et $N = 100, 150$ et 200 points dans chaque direction.

Dans [72], nous observons l'évolution de la norme BV de la solution numérique f_N . D'une part, la norme BV est relativement peu sensible à l'augmentation du nombre de point, ce qui signifie que cette norme est décrite correctement. D'autre part, l'évolution des normes L^∞ du gradient discret ∇f_N dépend fortement du nombre de points du maillage. D'ailleurs, $|\nabla f_N|_\infty$ tend vers l'infini lorsque le nombre de points augmente, ce qui signifie que la solution du système de Vlasov-Maxwell n'appartient pas à l'espace fonctionnel $W^{1,\infty}$ comme nous avons pu le voir précédemment.

Sur la Figure 1.4, nous représentons les gradients de la fonction de distribution et observons qu'une singularité se forme au point $(x, p_1) = (0, 0)$ et se propage ensuite à l'intérieur du domaine. Ainsi, les méthodes WENO et PFC semblent bien décrire cette propagation de la singularité sans introduire d'oscillation numérique.

1.4 Conclusion et perspectives

En conclusion, nous avons appliqué avec succès les méthodes WENO et PFC pour l'étude de la propagation d'un faisceau en $(2D_x \times 2D_v)$ et pour un problème de dimension trois en physique des plasmas $(1D_x \times 2D_v)$. Ces schémas ont également été appliqués à d'autres problèmes en physique des plasmas et en astronomie. L'avantage de telles méthodes est qu'elles permettent de contrôler des oscillations numériques pouvant se développer à l'intérieur du domaine lorsque la fonction de distribution se filament. Nous renvoyons par exemple aux travaux de M. Brunetti *et al.* [24] pour des applications en physique des accélérateurs, à H. Schmitz et R. Grauer [145] pour la discrétisation du système de Vlasov-Darwin ou à G. Manfredi et P.A. Hervieux [119] pour des simulations sur la dynamique d'électrons ultra-rapides. Dans tous ces travaux, le schéma PFC a été utilisé.

De plus, nous avons développé récemment une méthode numérique pour décrire la dynamique des collisions dans un plasma par l'opérateur de Fokker-Planck-Landau [33]. L'idée consiste à approcher le champ électrique de telle sorte que l'énergie totale soit exactement préservée au cours du temps tandis que l'on utilise une méthode de type différences finies conservative pour l'opérateur de collisions.

¹Une analyse mathématique complète pour de tels schémas est extrêmement difficile. Cependant, dans des situations simplifiées il est possible de prouver que la solution numérique converge vers la solution du problème continu dès lors que la solution est bornée dans l'espace BV .

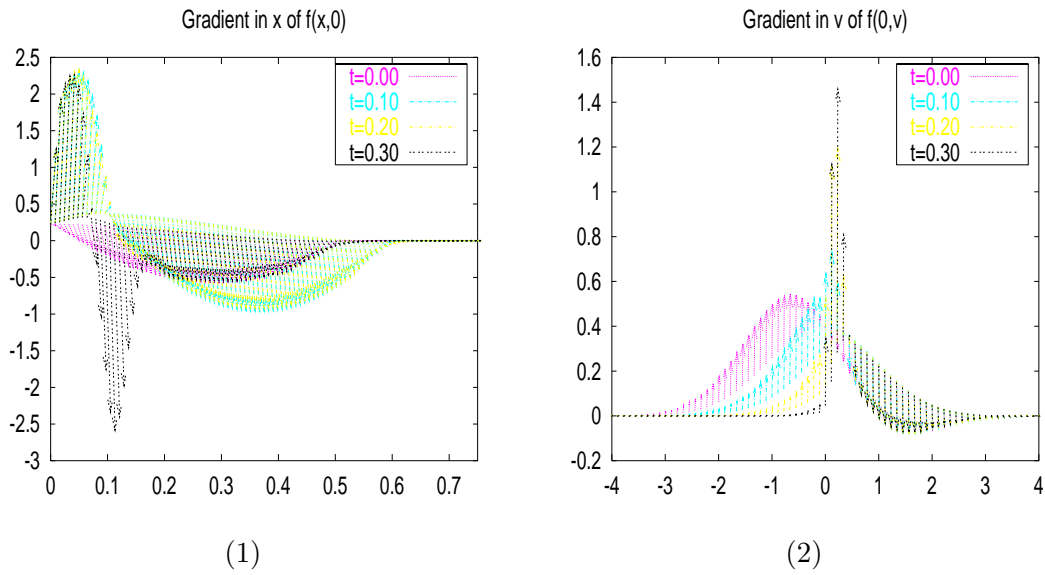


FIG. 1.4 – À gauche : évolution de $\frac{\partial f}{\partial x}$ en $(p_1, p_2) = (0, 0)$. À droite : évolution de $\frac{\partial f}{\partial p_1}$ en $(x, p_2) = (0, 0)$.

Concernant la théorie des équations de transport non linéaires, l'existence et l'unicité d'une solution régulière pour le système de Vlasov-Poisson ou de Vlasov-Maxwell en tenant compte des conditions aux limites en dimension deux et trois est toujours ouvert. Il existe quelques résultats partiels (disons lorsque Ω est une boule) [96]. La principale difficulté est d'établir des estimations L^∞ sur le champ électromagnétique dans le but de contrôler le support de la fonction de distribution f . Finalement, un autre problème ouvert concerne le comportement en temps grand de la solution de l'équation de Vlasov et la convergence vers une solution stationnaire dans le cas d'un domaine borné régulier.

Chapitre 2

Méthodes spectrales pour l'équation de Boltzmann

Nous nous intéressons à l'étude de gaz raréfiés modélisés par une équation cinétique. Dans ce cas, les propriétés du gaz sont décrites par une densité de particules $f(t, x, v)$, appelée *fonction de distribution*. Cette fonction de distribution satisfait l'équation de Boltzmann, une équation intégrodifférentielle, décrivant l'effet du flot à vitesse constante et des collisions binaires entre les particules. En l'absence de force extérieure, l'évolution statistique d'un gaz monoatomique [29, 151] est décrite par l'équation suivante

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\varepsilon} Q(f, f), \quad x, v \in \mathbb{R}^d,$$

où $d > 1$ représente la dimension de l'espace des vitesses, et $\varepsilon > 0$ est le nombre de Knudsen, proportionnel au libre parcours moyen entre deux collisions. Dans le terme de droite, $Q(f, f)$ est l'*opérateur de collisions* et vérifie

$$Q(f, f)(v) = Q^+(f, f) - L[f]f \tag{2.1}$$

avec

$$Q^+(f, f) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{S^{d-1}} B(|v - v_*|, \theta) f(v') f(v'_*) d\omega dv_*,$$
$$L[f] = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{S^{d-1}} B(|v - v_*|, \theta) f(v_*) d\omega dv_*.$$

Les vitesses v et v_* sont les vitesses post-collisionnelles de deux particules ayant une vitesse v' et v'_* avant qu'elles ne collisionnent. L'angle de déviation θ est l'angle formé par les vecteurs $v - v_*$ et $v' - v'_*$. Aussi, les vitesses pré-collisionnelles sont ici paramétrées par

$$v' = \frac{1}{2}(v + v_* + |v - v_*|\omega), \quad v'_* = \frac{1}{2}(v + v_* - |v - v_*|\omega),$$

où ω est un vecteur unitaire de la sphère S^{d-1} .

Les quantités $Q^+(f, f)$ et $L[f]f$ sont respectivement les termes de gain et de perte tandis que la forme précise du noyau B , caractérisant les détails des interactions binaires, dépend des propriétés physiques du gaz. Le plus souvent, le noyau prend la forme suivante

$$B(|v - v_*|, \theta) = b_\alpha(\theta)|v - v_*|^\alpha, \tag{2.2}$$

où α est fixé suivant le type d'interactions des molécules du gaz. En particulier, nous considérons les modèles de variables sphères dures (VHS) [11] c'est-à-dire $b_\alpha(\theta) = C_\alpha$ où

C_α est une constante positive. Le cas $\alpha = 0$ est souvent appelé gaz Maxwellien tandis que le cas $\alpha = 1$ représente le cas des gaz assimilables à des sphères dures.

L'opérateur de collisions de Boltzmann satisfait les propriétés fondamentales de conservations de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie et vérifie le célèbre théorème H de Boltzmann

$$\int_{\mathbb{R}^d} Q(f, f) \log(f) dv \leq 0.$$

Le théorème H de Boltzmann implique que la fonction de distribution d'équilibre c'est-à-dire la fonction f pour laquelle nous avons $Q(f, f) = 0$, s'écrit sous la forme d'une distribution Maxwellienne

$$M(\rho, u, T)(v) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{d/2}} \exp\left(-\frac{|u - v|^2}{2T}\right),$$

où ρ, u, T représentent la densité, la vitesse moyenne et la température du gaz

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^d} f(v) dv, \quad u = \frac{1}{\rho} \int_{\mathbb{R}^d} v f(v) dv, \quad T = \frac{1}{d\rho} \int_{\mathbb{R}^d} |v - u|^2 f(v) dv.$$

Parmi les différentes approches pour la discrétisation de l'équation de Boltzmann, nous pouvons distinguer entre méthodes déterministes et méthodes non déterministes de type Monte Carlo. Les premières présentent l'avantage d'être dépourvues de bruit statistique. Cependant, elles sont beaucoup plus gourmandes en ressources (stockage mémoire) et généralement plus coûteuses en temps de calcul que les méthodes de Monte Carlo pour un même nombre de degrés de liberté. Par exemple, si nous notons par N le nombre de paramètres qui caractérise la densité f pour la variable de vitesse, le coût numérique d'une méthode déterministe conventionnelle pour l'évaluation de l'opérateur de collisions est beaucoup plus grand que $O(N^2)$. Par conséquent, la plupart des calculs numériques sont fondés sur des techniques de type Monte-Carlo comme les méthodes *Direct Simulation Monte Carlo* (DSMC) dues à Bird [11] et la méthode modifiée de Monte Carlo due à Nanbu [125, 8]. Pour une description détaillée de ces méthodes nous renvoyons au livre [38].

L'avantage des méthodes probabilistes provient essentiellement du coût numérique relativement raisonnable (de l'ordre $O(N)$, où N est le nombre de particules discrètes). De plus, le coût en mémoire est moindre, puisque les particules se concentrent aux endroits où la fonction de distribution est non nulle, contrairement à une méthode utilisant une grille où la fonction de distribution est calculée en chaque point indépendamment de sa valeur. Pour ces raisons, les méthodes particulières n'ont aucun concurrent pour décrire les situations où la solution est loin de l'équilibre thermodynamique.

Cependant, les méthodes déterministes sont beaucoup plus précises, et deviennent plus compétitives par rapport aux méthodes Monte Carlo pour les problèmes d'évolution où la solution reste proche de l'équilibre thermodynamique. Dans la classe des schémas déterministes pour l'équation de Boltzmann, l'approximation la plus populaire est la méthode DVM, *discrete velocity models*. Cette méthode [25, 81, 142] utilise une grille régulière du domaine des vitesses et décrit la mécanique des collisions sur les noeuds de la grille tout en préservant les propriétés physiques fondamentales c'est-à-dire conservations de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Bien que les résultats numériques montrent que ces algorithmes ne génèrent pas de fluctuations, leur coût numérique demeure élevé. Habituellement en $O(n_a N^2)$ où n_a est le nombre de paramètres utilisés pour l'intégration angulaire. Typiquement, pour ces méthodes $n_a \approx O(N^{1/3})$. En raison du choix particulier des points d'intégration imposés par les conservations, l'ordre de la méthode DVM est inférieur à celui d'une formule standard de quadrature directement appliquée à

l'opérateur de collisions. Par conséquent, nous constatons que la condition de conservation au niveau discret des propriétés physiques rend extrêmement difficile l'obtention d'une méthode précise et d'ordre élevé. D'autre part, même si des propriétés de conservation ne sont pas imposées au départ, un algorithme précis fournirait une approximation précise des quantités conservées.

Dans [131], Pareschi & Perthame ont développé une discrétisation de l'opérateur de collisions fondée sur le développement en série de Fourier de la fonction de distribution par rapport à la variable des vitesses. L'approximation spectrale résultante peut être évaluée avec un coût en $O(N^2)$, ce qui reste inférieur à celui des méthodes déterministes précédentes. D'autre part, Bobylev & Rjasanow [12] ont utilisé une transformée de Fourier de la fonction de distribution et en modifiant de manière appropriée les coefficients de Fourier, ont construit un schéma assurant la conservation exacte de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. La méthode proposée est ainsi précise à l'ordre deux. Ensuite, Pareschi & Russo [132] ont poursuivi le travail entrepris précédemment en explicitant le calcul des *modes de Fourier*. Ils ont ainsi obtenu un système explicite d'équations différentielles pour les modèles du type variables sphères dures (VHS). La méthode fournit une approximation spectrale en vitesse, ce qui signifie que l'erreur décroît plus rapidement que n'importe quel polynôme lorsque le nombre de points augmente.

Ici, nous nous intéressons à la construction de méthodes rapides et précises pour l'équation de Boltzmann non homogène (dépendant de la variable d'espace) [63, 74]. La complexité du calcul de l'opérateur de collisions discret est ramenée à $O(N \log_2(N))$ et la masse est exactement préservée tandis que la vitesse moyenne et l'énergie sont approchées avec la précision spectrale. Ce travail est le fruit d'une collaboration avec Clément Mouhot, Lorenzo Pareschi et Giovanni Russo.

Dans la suite, nous donnons un schéma pour la discrétisation de l'opérateur de type Boltzmann en utilisant une méthode spectrale. Nous proposons différents algorithmes pour améliorer le coût numérique et plusieurs problèmes numériques sont discutés. Enfin, nous proposons des résultats de simulations numériques dans le cas spatialement non homogène dépendant du temps pour un problème de Riemann. Enfin, nous étudions numériquement le problème de la convergence vers l'équilibre dans le cas d'une boîte périodique.

2.1 Les méthodes spectrales [63, 65]

Dans cette partie, nous détaillons le cadre d'application de la méthode spectrale pour des opérateurs de collisions de type Boltzmann. Ici, nous ne nous intéressons qu'à la discrétisation en vitesse puisque l'approximation de l'opérateur de transport a déjà fait l'objet du chapitre précédent.

2.1.1 Cadre général

Nous considérons l'équation de Boltzmann spatialement homogène que l'on écrit sous la forme suivante

$$\frac{\partial f}{\partial t} = Q(f, f), \quad (2.3)$$

où Q est donné par

$$Q(f, f) = \int_{\{(x,y) \in \mathcal{C}\}} \mathcal{B}(x, y) (f' f'_* - f_* f) dx dy, \quad v \in \mathbb{R}^d \quad (2.4)$$

avec les notations habituelles $f' = f(v')$, ... Puis,

$$v' = v + \Theta'(x, y), \quad v'_* = v + \Theta'_*(x, y), \quad v_* = v + \Theta_*(x, y).$$

Dans l'équation (2.3)-(2.4), l'espace \mathcal{C} représente un domaine en vitesse (généralement non borné) et $\Theta, \Theta', \Theta_*$ sont des fonctions que l'on précisera plus tard suivant la forme prise par l'opérateur, \mathcal{B} est la section efficace. Dans ce cadre général, nous voulons mettre l'accent sur les propriétés d'invariance par translation de l'opérateur de collisions, ce qui est crucial pour la mise au point d'une méthode spectrale. Dans les prochains paragraphes, nous préciserons les changements de variables permettant d'effectuer le passage de l'opérateur de Boltzmann sous sa forme classique (2.1) vers une forme du type (2.4).

Un premier problème associé aux méthodes déterministes utilisant une grille fixe de l'espace des vitesses est la troncation du domaine pour se ramener à un espace borné. En effet, l'espace des vitesses est souvent l'espace complet \mathbb{R}^d et l'opérateur de collisions transforme une fonction à support compact en une fonction strictement positive sur tout l'espace. En général, le processus de collisions élargit le support par un facteur $\sqrt{2}$ dans le cas de collisions élastiques (voir [140, 122] et [121] pour des propriétés similaires dans le cas inélastique). Par conséquent, pour l'équation continue en temps, la fonction f devient immédiatement strictement positive sur tout le domaine \mathbb{R}^d . Ainsi, au niveau numérique une condition "non physique" doit être imposée pour conserver la fonction de distribution dans un domaine uniformément borné en vitesse. Dans ce but, deux stratégies sont possibles.

- Nous pouvons supprimer les collisions binaires physiques qui vont donner lieu à des vitesses post-collisionnelles se trouvant à l'extérieur du domaine. Par conséquent le nombre d'invariants pourrait croître (c'est-à-dire les fonctions φ telles que $(\varphi'_* + \varphi' - \varphi_* - \varphi)$ est nul partout dans le domaine). Si cette étape est réalisée avec précaution (c'est-à-dire sans supprimer trop de collisions), le schéma restera conservatif (et sans invariants indésirables). Cependant, cette troncature casse la structure de convolution de l'opérateur de collisions, qui nécessite les propriétés d'invariance par translation en vitesse. En effet, le noyau de collisions dépend maintenant de v à travers les conditions aux limites artificielles introduites pour préserver les conservations. Cette procédure est le point de départ de la plupart des schémas pour l'opérateur de Boltzmann dans un domaine borné (voir par exemple les *discrete velocity models*).
- Nous pouvons ajouter des collisions binaires "non physiques" en rendant la fonction de distribution et l'opérateur de collisions périodiques. Ceci implique une perte du nombre d'invariants (puisque des collisions non physiques ont été ajoutées). Ainsi, le schéma devient non conservatif à l'exception de la masse si l'étape de "périodisation" est réalisée avec attention. Néanmoins, la structure de l'opérateur de collisions est maintenue dans un domaine borné et pourra être exploitée pour construire des algorithmes rapides. La méthode spectrale que nous proposons est fondée sur cette dernière troncation.

Nous considérons donc l'équation de Boltzmann spatialement homogène dans un domaine borné en vitesse $\mathcal{D}_T = [-T; T]^d$ ($0 < T < \infty$). Il est maintenant nécessaire de tronquer le domaine d'intégration pour les variables x et y puisque l'étape de périodisation conduirait sans cela à une intégrale divergente sur tout \mathbb{R}^d . Nous imposons alors à x et y d'appartenir à un domaine borné $\mathcal{C}_R \subset \mathcal{C}$ (le paramètre R fait référence à sa mesure et sera défini clairement plus tard suivant la forme de l'opérateur). Pour une fonction à support compact dont le support est inclus dans la boule B_S , de centre 0 et de rayon S , nous imposons une relation (dépendant des changements de variables et de la troncation choisie) entre S , R et T dans le but d'une part de tenir compte de toutes les collisions physiques et d'autre part d'éviter que les régions où f est différente de zéro présentent une

intersection non vide (condition de déaliasing). L'opérateur *tronqué* s'écrit alors comme

$$Q^R(f, f) = \int_{\mathcal{C}_R} \mathcal{B}(x, y) (f'_* f' - f_* f) dx dy, \quad (2.5)$$

pour $v \in \mathcal{D}_T$ (l'expression pour $v \in \mathbb{R}^d$ est déduite par périodicité). En utilisant un changement de variable sur v , nous pouvons facilement prouver que pour n'importe quelle fonction φ périodique sur \mathcal{D}_T , la formulation faible suivante est satisfaite

$$\int_{\mathcal{D}_T} Q^R(f, f) \varphi(v) dv = \frac{1}{4} \int_{\mathcal{D}_T} \int_{\mathcal{C}_R} \mathcal{B}(x, y) f_* f (\varphi'_* + \varphi' - \varphi_* - \varphi) dx dy dv. \quad (2.6)$$

Maintenant, nous utilisons la représentation Q^R pour construire une approximation spectrale pour la solution de l'équation de Boltzmann.

Dans la suite, nous utiliserons un seul indice pour représenter la somme en dimension d par rapport au vecteur entier $k = (k_1, \dots, k_d) \in \mathbb{Z}^d$. Ainsi, nous posons

$$\sum_{k=-N}^N := \sum_{k_1, \dots, k_d=-N}^N.$$

L'approximation f_N de f est donc une série de Fourier tronquée

$$f_N(v) = \sum_{k=-N}^N \hat{f}_k e^{i\frac{\pi}{T}k \cdot v}, \quad \text{avec} \quad \hat{f}_k = \frac{1}{(2T)^d} \int_{\mathcal{D}_T} f(v) e^{-i\frac{\pi}{T}k \cdot v} dv. \quad (2.7)$$

Dans une méthode de Fourier-Galerkin, les inconnues sont les coefficients de Fourier \hat{f}_k pour tout $k = -N, \dots, N$. En observant que le terme de reste dans (2.5) est orthogonal à tout polynôme trigonométrique de degré inférieur à N , nous obtenons un ensemble d'équations différentielles pour les coefficients \hat{f}_k . En substituant l'expression (2.7) dans (2.6), il vient finalement

$$Q^R(f_N, f_N) = Q^{R,+}(f_N, f_N) - L^R(f_N) f_N$$

avec

$$L^R(f_N) f_N = \sum_{l=-N}^N \sum_{m=-N}^N \beta(l, m) \hat{f}_l \hat{f}_m e^{i\frac{\pi}{T}(l+m) \cdot v}, \quad (2.8)$$

$$Q^{R,+}(f_N, f_N) = \sum_{l=-N}^N \sum_{m=-N}^N \beta(l, m) \hat{f}_l \hat{f}_m e^{i\frac{\pi}{T}(l+m) \cdot v}, \quad (2.9)$$

où

$$\beta(l, m) = \int_{\mathcal{C}_R} \mathcal{B}(x, y) e^{i\frac{\pi}{T}(l \cdot \Theta'(x, y) + m \cdot \Theta'_*(x, y))} dx dy. \quad (2.10)$$

Ce schéma spectral n'est donc rien d'autre que la projection de l'équation de Boltzmann tronquée sur l'ensemble \mathcal{P}_N , des polynômes trigonométriques de degré inférieur à N dans chaque direction. Cet espace est de dimension $(2N + 1)^d$. La fonction f_N est solution de

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} = \mathcal{P}_N Q^R(f_N, f_N),$$

où \mathcal{P}_N représente la projection orthogonale sur \mathcal{P}_N dans l'espace $L^2(\mathcal{D}_T)$. Un calcul direct donne un système d'équations différentielles ordinaires pour les coefficients de Fourier

$$\frac{\partial \hat{f}_k}{\partial t} = \sum_{\substack{l+m=k \\ l,m=-N}}^N \hat{\beta}(l, m) \hat{f}_l \hat{f}_m, \quad (2.11)$$

où les $\hat{\beta}(l, m)$ sont appelés les *modes de Fourier du noyau* et sont donnés par

$$\hat{\beta}(l, m) = \beta(l, m) - \beta(m, m).$$

2.1.2 La méthode spectrale classique

Pour la méthode spectrale classique proposée dans [132], un simple changement de variables dans (2.1) nous conduit à

$$Q(f, f) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{S^{d-1}} \mathcal{B}^c(g, \omega) (f(v')f(v'_*) - f(v)f(v_*)) d\omega dg, \quad (2.12)$$

avec $g = v - v_* \in \mathbb{R}^d$, $\omega \in \mathbb{S}^{d-1}$ et

$$\begin{cases} v' = v - \frac{1}{2}(g - |g|\omega) =: v + \Theta'(g, \omega), \\ v'_* = v - \frac{1}{2}(g + |g|\omega) =: v + \Theta'_*(g, \omega), \\ v_* = v + g =: v + \Theta_*(g, \omega). \end{cases}$$

L'opérateur de Boltzmann (2.12) est maintenant écrit sous la forme (2.4) avec $(x, y) = (g, \omega) \in \mathbb{R}^d \times S^{d-1} =: \mathcal{C}$.

D'ailleurs, en utilisant les conservations de la quantité de mouvement et de l'énergie et en supposant de plus que $\text{Supp } f \subset B_S$, nous obtenons le résultat suivant [131],

- nous obtenons que $\text{Supp } Q(f, f) \subset B_{\sqrt{2}S}$,
- l'opérateur de collisions est donné par

$$Q(f, f)(v) = \int_{B_{2S}} \int_{S^{d-1}} B(|g|, \cos \theta) (f(v')f(v'_*) - f(v_*)f(v)) d\omega dg,$$

avec $v', v'_*, v_* \in B_{(2+\sqrt{2})R}$.

Par conséquent, dans le but d'écrire un schéma spectral pour l'équation (2.3) nous considérons une fonction de distribution f que nous allons définir sur le domaine $[-T, T]^d$, ($0 < T < +\infty$). En supposant que $f(v) = 0$ sur $[-T, T]^d \setminus B_S$, nous la modifions par extension à une fonction périodique sur $[-T, T]^d$ et nous tronquons le domaine pour $(x, y) = (g, \omega)$ à $\mathcal{C}_R = B_R \times \mathbb{S}^{d-1}$ pour $R > 0$. Ceci définit complètement l'opérateur Q^R .

Ainsi, en appliquant l'algorithme spectral (2.8) et (2.9), nous obtenons les *modes de Fourier du noyau* $\beta^c(l, m)$

$$\beta^c(l, m) = \int_{B_R} \int_{S^{d-1}} B(|g|, \cos \theta) e^{-i\frac{\pi}{T} \left(g \cdot \frac{(l+m)}{2} - |g|\omega \cdot \frac{(m-l)}{2} \right)} d\omega dg.$$

Nous renvoyons aux travaux de Pareschi & Russo [132, 63, 65] pour un calcul explicite des coefficients de Fourier $\beta^c(l, m)$ dans le cas des variables sphères dures où le noyau B

est donné par (2.2). La calcul du terme de droite de (2.11) nécessite maintenant un effort de l'ordre de $O(N^2)$ opérations, où N est le nombre total de coefficients de Fourier. Nous rappelons que le coût habituel d'un modèle DVM avec N paramètres pour le calcul de f dans l'espace des vitesses est de l'ordre de $O(N^2M)$ où M est le nombre d'angles discrets.

2.1.3 Méthodes spectrales rapides (MSP) [74]

Ici, nous allons fournir une approximation spectrale de l'opérateur de collisions en partant d'une autre représentation qui rend mieux compte des symétries lorsque l'on effectue la troncation de l'opérateur.

Cette représentation a déjà été utilisée dans [12, 98] pour construire un schéma aux différences finies et est très proche de la représentation classique de Carleman [28]. À l'aide de cette représentation, l'opérateur de collisions (2.1) peut être écrit comme

$$Q(f, f)(v) = 2^{d-1} \int_{x \in \mathbb{R}^d} \int_{y \in \mathbb{R}^d} \mathcal{B}^{fast}(x, y) \delta_0(x \cdot y) (f(v+y)f(v+x) - f(v+x+y)f(v)) dx dy,$$

où δ_0 représente la mesure de Dirac et

$$\mathcal{B}^{fast}(x, y) = 2^{d-1} B \left(-\frac{x \cdot (x+y)}{|x||x+y|}, |x+y| \right) |x+y|^{-(d-2)}.$$

Ainsi, l'opérateur de collisions est maintenant écrit sous la forme (2.4) avec $(x, y) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d =: \mathcal{C}$, $\mathcal{B}(x, y) = \mathcal{B}^{fast}(x, y) \delta_0(x \cdot y)$, et $v'_* = v + y =: v + \Theta'_*(x, y)$, $v' = v + x =: v + \Theta'(x, y)$, $v_* = v + x + y =: v + \Theta_*(x, y)$.

Nous considérons alors un domaine borné $\mathcal{D}_T = [-T, T]^d$, ($0 < T < \infty$) pour la fonction de distribution f , et le domaine également borné d'intégration $B_R \times B_R$ pour $R > 0$. L'opérateur tronqué s'écrit au point $v \in \mathcal{D}_T$

$$Q^R(f, f)(v) = \int_{x \in B_R} \int_{y \in B_R} \mathcal{B}^{fast}(x, y) \delta_0(x \cdot y) (f(v+y)f(v+x) - f(v+x+y)f(v)) dx dy.$$

Cette représentation du noyau de collisions implique de meilleures propriétés de découplage des arguments de l'opérateur comme nous le verrons plus tard. À cette étape, nous pouvons alors appliquer notre algorithme spectral (2.8) et (2.9) et les *modes de Fourier du noyau* sont alors donnés par

$$\beta^f(l, m) = \int_{x \in B_R} \int_{y \in B_R} \mathcal{B}^{fast}(x, y) \delta_0(x \cdot y) e^{i\frac{\pi}{T}(l \cdot x + m \cdot y)} dx dy.$$

Dans la suite, nous nous concentrons sur le calcul β^f et vérifions facilement qu'en réalité $\beta^f(l, m)$ dépend seulement de $|l|$, $|m|$ et $|l \cdot m|$. La recherche d'un algorithme rapide pour le calcul de l'opérateur de collisions, c'est-à-dire un algorithme dont l'effort de calcul est inférieur à $O(N^{2+\epsilon})$ (avec $\epsilon = 1$ pour les DVM, ou $\epsilon = 0$ pour la méthode spectrale classique), va donc consister à identifier une structure de convolution de l'opérateur (voir par exemple [13, 133]). L'objectif sera d'approcher chaque coefficient $\beta^f(l, m)$ par une somme de la forme

$$\beta^f(l, m) = \sum_{p=1}^{M^2} \alpha_p(l) \alpha'_p(m).$$

Ceci implique le calcul de M^2 convolutions discrètes et le coût de calcul de l'algorithme s'élève ainsi à $O(M^2 N \log_2 N)$ opérations en ayant recours aux techniques de transformées

de Fourier rapides [27]. Mentionnons enfin que l'analyse mathématique de l'algorithme rapide réalisée dans [124] assure les propriétés suivantes

- l'algorithme maintient la précision spectrale par rapport aux paramètres N et M ;
- l'erreur sur la conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie est de l'ordre de la précision spectrale par rapport aux paramètres N . Il n'y a pas d'erreur supplémentaire induite par la discrétisation de l'angle.

2.2 Résultats numériques dans la cas non homogène

Dans l'article [74], nous présentons plusieurs résultats de simulations numériques dans le cas spatialement homogène permettant de mettre en évidence l'amélioration apportée par l'algorithme rapide sur le temps de calcul sans pour autant remettre en question la précision de la méthode. D'ailleurs, des tests de performance viennent justifier l'utilisation de ce type de méthodes par rapport aux méthodes de Monte-Carlo.

Dans cette partie, nous reportons deux exemples des plus significatifs pour les calculs dans le cas spatialement non homogène : nous présentons d'abord le cas d'un problème de Riemann issu de la dynamique des gaz raréfiés. Puis, nous proposons des simulations numériques sur le problème de la convergence vers l'équilibre de la fonction de distribution.

2.2.1 Problème de Riemann : solution dépendant du temps

Dans ce test numérique nous traitons le cas d'une solution dépendant du temps, de l'espace en dimension un et de la vitesse en dimension trois ($1D \times 3D$). L'équation de Boltzmann est considérée pour les molécules de type sphères dures ($\alpha = 1$). Nous présentons des résultats correspondant au problème de Riemann en dimension un et les comparons avec la solution numérique obtenue à partir d'une méthode Monte-Carlo. La condition initiale est donnée par deux Maxwelliennes paramétrées par les quantités suivantes (densité, vitesse moyenne et température)

$$\begin{cases} (\rho_l, u_l, T_l) = (1, 0, 1) & \text{si } 0 \leq x \leq 0.5, \\ (\rho_r, u_r, T_r) = (0.125, 0, 0.25) & \text{si } 0.5 < x \leq 1. \end{cases}$$

D'abord, notons que les fluctuations de la solution issue des simulations Monte Carlo sont diminuées en répétant plusieurs fois le calcul pour différents paramètres statistiques et en ayant recours à un procédé de calcul de moyennes des solutions obtenues pour chaque configuration (moyenne statistique). Ceci permet de diminuer nettement le bruit statistique inhérent à la méthode.

Nous avons donc calculé une approximation de l'équation de Boltzmann pour différents nombres de Knudsen, partant du régime des gaz raréfiés jusqu'à la limite fluide correspondante. La solution numérique de l'équation de Boltzmann à la limite hydrodynamique (ε devient petit) est aussi comparée avec la solution numérique du système d'Euler obtenue par le schéma de Nessyahu-Tadmor [126] en utilisant un grand nombre de points ($n_x=1600$). Nous renvoyons à [63] pour plus de détails.

Ici, nous présentons seulement le résultat correspondant au régime hydrodynamique proche de la limite des équations d'Euler ($\varepsilon = 10^{-4}$) en utilisant seulement 128 points en espace. Dans ce cas, un petit pas de temps ($\Delta t = 0.001$) est requis pour préserver

une précision raisonnable¹. Ceci entraîne une augmentation du temps de calcul de la méthode déterministe tandis que la méthode TRMC (Time Relaxed Monte Carlo) [135] est nettement moins sensible à l'erreur en temps puisque l'erreur en espace et en vitesse est bien plus importante, il n'est donc pas nécessaire de prendre un petit pas de temps. Ceci explique la différence du temps de calcul à l'avantage de la méthode Monte-Carlo. Néanmoins la précision de la méthode est loin d'être satisfaisante. En effet, nous avons reporté les résultats de la densité, vitesse moyenne et température obtenus par la méthode TRMC et la méthode spectrale sur la Figure 2.1. L'utilisation d'un schéma d'ordre un en espace et de type Monte-Carlo en vitesse n'est clairement pas satisfaisante dans ce cas précis. En revanche, l'utilisation d'un petit pas de temps ($\Delta t = 0.001$) pour l'algorithme spectral permet de diminuer considérablement l'erreur de la discrétisation en temps et ainsi d'obtenir des résultats comparables avec la solution de la limite asymptotique.

2.2.2 Convergence vers l'équilibre pour l'équation de Boltzmann spatialement non homogène

Nous considérons l'équation de Boltzmann en dimension deux définie sur le tore en x avec des conditions aux limites périodiques. Nous introduisons d'abord les grandeurs hydrodynamiques associées à la fonction de distribution $f(t, x, v)$. Ce sont les $(d + 2)$ champs scalaires de la densité ρ (scalaire), la vitesse moyenne u (vecteur) et la température T (scalaire). Si la fonction de distribution $f(t, x, v)$ est une solution régulière de l'équation de Boltzmann avec des conditions aux limites périodiques, elle satisfait les conservations globales de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Ces lois de conservation permettent alors de déterminer de manière unique la solution d'équilibre de l'équation de Boltzmann : la fonction de distribution Maxwellienne globale normalisée (dès lors que nous supposons initialement $\rho = T = 1$ et $u = 0$)

$$M_g(v) = \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{|v|^2}{2}\right). \quad (2.13)$$

Dans la suite, nous utiliserons la terminologie suivante : une fonction de distribution de la forme (2.13) sera appelée une *distribution Maxwellienne*, tandis qu'une distribution de la forme

$$M_l(x, v) = \frac{\rho(x)}{2\pi T(x)} \exp\left(-\frac{|v - u(x)|^2}{2T(x)}\right) \quad (2.14)$$

sera appelée une *distribution Maxwellienne locale* (dans le sens où les constantes ρ , u et T dépendent de la position x). Nous définissons aussi la notion d'*entropie relative locale* H_l comme l'entropie relative à la Maxwellienne locale, et l'*entropie relative globale* H_g comme l'entropie relative à la distribution Maxwellienne globale, soit plus précisément

$$H_l(t) = \int f \log\left(\frac{f}{M_l}\right) dx dv, \quad H_g(t) = \int f \log\left(\frac{f}{M_g}\right) dx dv.$$

Notre propos est d'étudier numériquement le comportement en temps grand de la solution f . Lorsque f est une solution suffisamment régulière de l'équation de Boltzmann, c'est-à-dire vérifiant certaines estimations *a priori* (en particulier, en assurant qu'il n'y a pas de perte d'énergie pour les grandes vitesses), il est possible de montrer que la solution f converge effectivement vers la distribution d'équilibre global M_g lorsque le temps t tend

¹La dégradation de la précision est propre au schéma de splitting de Strang lorsque l'un des opérateur devient raide (voir [43, 42, 101]). Une telle dégradation de la précision peut être évitée en utilisant une autre approche pour la discrétisation en temps.

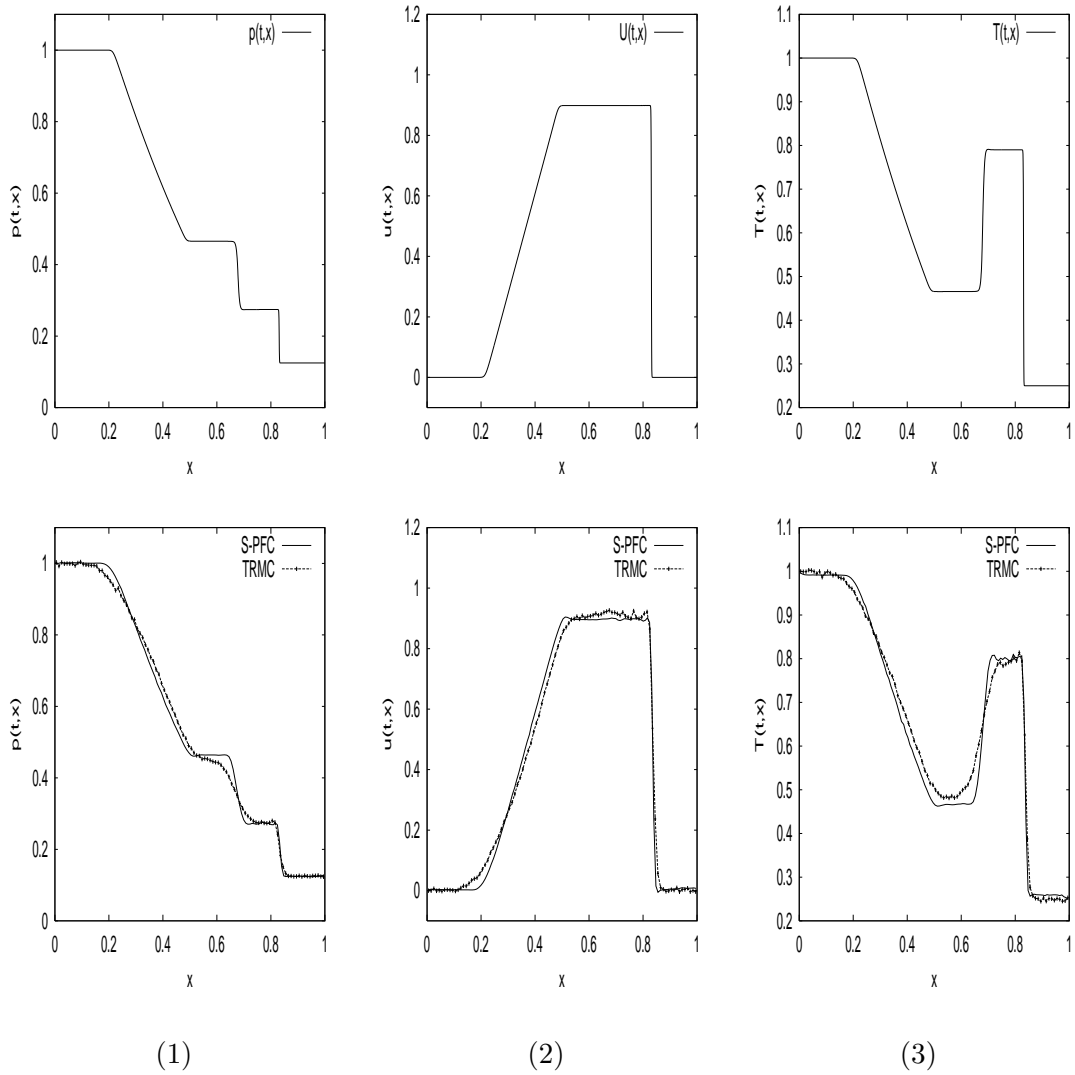


FIG. 2.1 – Problème de Riemann avec $\varepsilon = 10^{-4}$: (1) la densité ρ , (2) la vitesse moyenne u et (3) la température T au temps $t = 0.20$ en fonction de x obtenues par le schéma NT pour le système d'Euler (haut) et par l'algorithme spectral et la méthode TRMC pour la discrétisation de l'équation de Boltzmann (bas).

vers l'infini. Bien sûr, l'obtention de ces bornes *a priori* demeure un problème extrêmement difficile. Pour l'instant, seul le cas spatialement homogène a été complètement résolu (nous renvoyons à [151]) ou lorsque la solution est proche de l'équilibre (voir en particulier [86] pour le cas du tore). Cela constitue toujours un problème ouvert pour le cas spatialement non homogène et lorsque la donnée initiale est loin de l'équilibre. Récemment, Desvillettes & Villani [45, 46] puis Guo & Strain [87] se sont intéressés à l'étude des taux de retour à l'équilibre pour l'équation de Boltzmann et ont mis au point une méthode constructive (dans le sens où elle donne des taux de convergence explicites). En simplifiant, les auteurs prouvent dans [46] que lorsque la solution de l'équation de Boltzmann est suffisamment régulière alors

$$\|f(t) - M_g\| = O(t^{-\infty}),$$

ce qui signifie que la solution converge vers l'équilibre de manière presque exponentielle en temps (en fait avec un taux polynomial $O(t^{-r})$ avec r aussi grand que nous le souhaitons).

La solution f de l'équation de Boltzmann satisfait les formules d'additivité de l'entropie : l'entropie peut être écrite comme la somme d'une entropie purement hydrodynamique, et d'une partie purement cinétique. En terme de fonctionnelles H , nous pouvons écrire

$$H_g(t) = H_l(t) + \int \rho_l(t, x) \log \left(\frac{\rho_l(t, x)}{T_l(t, x)} \right) dx.$$

Nous pouvons aussi montrer que

$$H_l(t) \leq H_g(t), \quad \forall t \geq 0.$$

De plus dans [46], Desvillettes & Villani conjecturent que des oscillations en temps peuvent se produire sur l'évolution de l'entropie relative locale. En fait, leur preuve n'exclut pas la possibilité que la production d'entropie s'effectue de manière oscillatoire et d'ailleurs une grande partie du travail technique est provoquée par cette éventualité.

Description des résultats. Nous avons réalisé plusieurs simulations à l'aide de la méthode spectrale rapide dans le but d'observer l'évolution de l'entropie et de vérifier si de telles oscillations se produisent. Ce test numérique est difficile puisqu'il nécessite de rendre compte de l'évolution de la fonction de distribution avec beaucoup de précision lorsque celle-ci est proche de l'équilibre.

Nous considérons comme donnée initiale une perturbation de l'équilibre global M_g

$$f_0(x, v) = \frac{1}{2\pi} (1 + A_0 \cos(k_0 x)) \exp(-|v|^2/2), \quad x \in [0, L], v \in \mathbb{R}^2 \quad (2.15)$$

pour des constantes $A_0 > 0$ et $k_0 = 2\pi/L$ fixées. Sur la Figure 2.2, nous observons effectivement un comportement oscillatoire de la production d'entropie relative et de l'entropie hydrodynamique. L'intensité des oscillations dépend fortement de la longueur du domaine L , ce qui est consistant avec le fait que dans le cas spatialement homogène ($L = 0$), il n'y a pas d'oscillation.

Les différentes courbes représentent l'évolution en temps de l'entropie totale H et de sa partie cinétique. Dans tous les cas, une distribution Maxwellienne est choisie comme donnée initiale, la première figure correspond à une longueur de domaine $L = \pi$ et la dernière à $L = 4\pi$. Des oscillations peuvent être observées dans le cas $L = \pi$, mais ce qui est le plus étonnant est qu'après un certain temps, l'entropie cinétique est très proche de l'entropie totale ce qui indique que la solution évolue presque comme une solution spatialement homogène (contrairement à l'intuition du régime hydrodynamique). À l'opposé,

dans le cas $L = 4\pi$, les oscillations sont beaucoup plus significatives en fréquence et en amplitude (notons que les figures sont en échelle logarithmique). La solution “hésite” entre deux états : tantôt elle se rapproche du régime hydrodynamique tantôt elle s'en éloigne. Finalement, notons que la convergence vers l'équilibre est plus rapide lorsque la longueur de boîte L est petite et la convergence semble être exponentielle en temps.

Les travaux d'Ellis & Pinsky [54], permettent de donner une interprétation assez simple de ce phénomène. Puisque cet effet est observé lorsque la solution est proche de l'équilibre, nous pouvons remplacer l'opérateur de Boltzmann par l'opérateur linéarisé autour de l'équilibre (de plus les oscillations sont aussi observées pour l'opérateur de Boltzmann linéarisé). Cela revient à étudier l'évolution des *modes de Fourier* correspondant à la variable d'espace x du spectre de l'opérateur linéarisé. En utilisant un changement d'échelle, cette évolution est donnée par le semi-groupe $\tilde{T}_{k_0/L}(t)$, où $\tilde{T}_k(t)$ est défini dans [54] (c'est en fait le semi-groupe correspondant au k -ème coefficient de Fourier de l'équation de Boltzmann linéarisée). Une étude asymptotique du spectre pour de petites fréquences k a été réalisée [54]. Sur une échelle de temps suffisamment grande, le terme dominant c'est-à-dire celui correspondant au plus petit taux de décroissance, est donné par les $(d+2)$ “valeurs propres hydrodynamiques”. D'ailleurs, un calcul explicite montre qu'à l'ordre un par rapport à $\varepsilon = |k|$, les valeurs propres s'annulent, excepté pour deux d'entre elles, données par

$$\lambda_1 = i\varepsilon\sqrt{1+2/d} + O(\varepsilon^2), \quad \lambda_2 = -i\varepsilon\sqrt{1+2/d} + O(\varepsilon^2).$$

Pour $|k_0|/L \ll 1$, ce qui correspond par exemple à k_0 fixé et L suffisamment grand, cette analyse donne la partie imaginaire dominante des valeurs propres. Dans ce régime, nous devrions donc observer des oscillations avec une fréquence de $\sqrt{1+2/d}|k_0|/L$ et la période d'oscillations devrait être donnée par $2\pi(1+2/d)^{-1/2}L/|k_0|$, tout ceci pouvant être vérifié sur les simulations numériques.

Les résultats numériques correspondent en effet aux calculs analytiques $\omega/L \simeq 1/\sqrt{2}$ et nous observons que le taux d'amortissement est aussi relié à la longueur de la boîte et est en fait proportionnel à $1/L^2$ lorsque L tend vers l'infini, $\alpha L^2 \simeq \text{constant}$.

Finalement, les méthodes numériques récemment proposées pour la discrétisation de l'équation de Boltzmann, comme celle présentée dans ce chapitre, sont capables de générer une solution numérique très précise pour le comportement transitoire de la solution de l'équation de Boltzmann et la convergence vers l'équilibre, ceci étant obtenu avec un coût numérique relativement raisonnable même dans la situation spatialement non homogène. Cette méthode pourrait être utilisée pour étudier *numériquement* le spectre de l'opérateur de Boltzmann linéarisé (dans le cas spatialement homogène), ou de façon peut-être plus intéressante, pour l'opérateur de Boltzmann linéarisé avec l'opérateur de transport dans le cas non homogène. Par exemple, il est possible d'évaluer le taux de convergence exponentiel à partir des résultats numériques (voir les figures). Ceci fournit une estimation numérique du trou spectral (qui correspond à la partie réelle de la première valeur propre non nulle) de cet opérateur (il est maintenant connu depuis les travaux d'Ukai [150] que cet opérateur a bien un trou spectral sur le tore, voir aussi [30]). D'ailleurs, à partir d'une analyse en fréquence des courbes présentées sur l'évolution de l'entropie relative locale ou de la distance L^1 à l'équilibre, il est possible d'obtenir une estimation des autres valeurs propres.

2.3 Conclusion et perspectives

L'approximation spectrale pour l'équation de Boltzmann présentée dans ce chapitre est fondée sur une représentation de Fourier de l'équation dans l'espace des vitesses et fournit ainsi une description précise de l'évolution de la fonction de distribution.

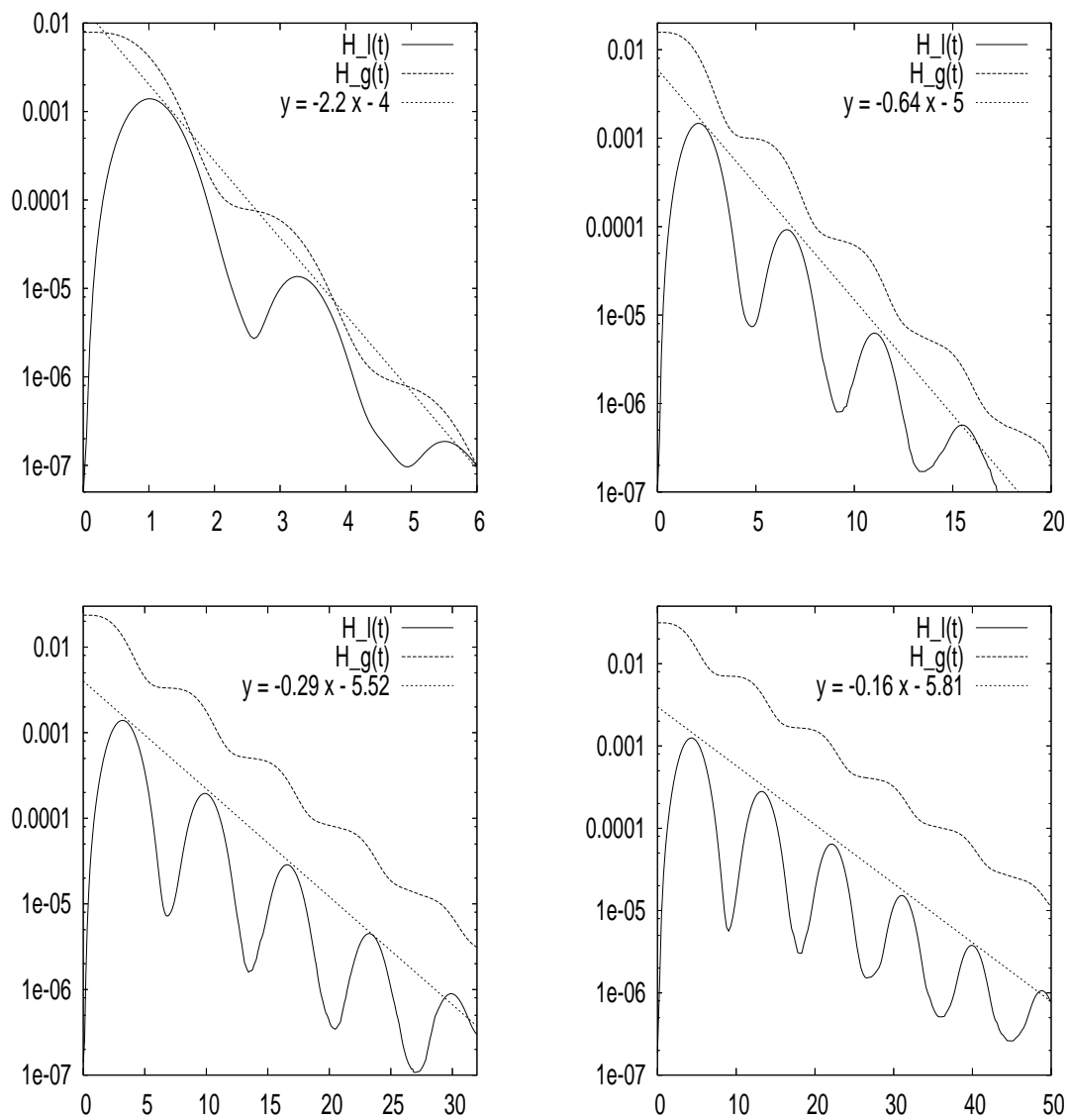


FIG. 2.2 – Influence de la longueur de boîte : entropie relative locale $H_l(t)$ avec $64 \times 64 \times 64$ pour $L = \pi ; 2\pi ; 3\pi$ et 4π et $A_0 = 0.1$ pour la donnée initiale (2.15).

Récemment, nous avons étendu la méthode spectrale au cas de l'équation de Boltzmann inélastique, décrivant le comportement d'un gaz granulaire avec et sans source de chauffage [69]. La complexité dans le traitement de ce problème provient essentiellement du fait que la solution converge vers une masse de Dirac pour des temps grands. Ainsi, une grille fixe en vitesse devient inévitablement trop grossière pour représenter correctement la solution. Nous avons donc développé une méthode fondée sur un changement d'échelle en vitesse permettant de suivre les variations de la fonction de distribution par rapport à v . Finalement, des résultats numériques en dimension un et trois en vitesse permettent de valider cette approche pour l'étude des milieux granulaires. Nous présentons aussi quelques conjectures sur la relaxation de la température (loi de Haff) à l'aide de simulations numériques.

Une autre direction de recherche envisagée est l'étude de la convergence de la solution numérique obtenue à partir des méthodes spectrales vers une solution régulière de l'équation de Boltzmann. En collaboration avec Clément Mouhot, nous travaillons actuellement sur cette preuve : la principale difficulté est d'établir des estimations *a priori* suffisantes pour la stabilité de la méthode. Ce travail est rendu difficile puisque la méthode spectrale ne préserve pas la positivité de la fonction de distribution, ce qui pourrait créer un effet d'emballement et donc d'instabilité. Un premier résultat est donc d'établir un résultat de stabilité de l'opérateur de Boltzmann par rapport à une perturbation qui ne conserve pas la positivité. Nous suivons pour cela la preuve de Pulvirenti-Wennberg pour l'obtention de borne inférieure sur la fonction de distribution.

Chapitre 3

Analyse de schémas volumes finis pour les équations d'évolution

3.1 Les schémas volumes finis pour les équations d'évolution

Les méthodes volumes finis sont généralement considérées comme étant bien adaptées pour la simulation numérique de lois de conservations avec éventuellement un terme source. Elles ont été utilisées en mécanique des fluides, en modélisation de transfert de masse et de chaleur ou en ingénierie du pétrole.

Une loi de conservation exprime la conservation d'une quantité $f(t, x)$, par exemple l'énergie, la masse ou le nombre de particules. L'équation de conservation prend la forme suivante

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_x \cdot \mathbf{J}(t, x) = 0, \quad (3.1)$$

en tout point $x \in \Omega$ et tout temps $t \geq 0$ où la conservation de la quantité f est décrite. À l'aide de considérations physiques, le problème est fermé une fois que nous avons introduit une loi constitutive qui relie f et \mathbf{J} . L'équation (3.1) peut être vue comme l'expression de la conservation de f sur un domaine infinitésimal. Ceci est formellement équivalent à la relation suivante écrite sur un intervalle $[t^n, t^{n+1})$ et sur un volume K ,

$$\int_K f(t^{n+1}, x) dx - \int_K f(t^n, x) dx + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial K} \mathbf{J}(t, x) \cdot n_K(x) d\gamma(x) dt = 0,$$

où $n_K(x)$ est le vecteur normal unité, pointé vers l'extérieur pris au point $x \in \partial K$. Dans le but de construire une discrétisation en espace par une méthode volumes finis, un maillage \mathcal{M} du domaine de calcul $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ est introduit. Le maillage est tel que $\bar{\Omega} = \cup_{K \in \mathcal{M}} \bar{K}$, où un élément de \mathcal{M} , noté par K , est un ouvert de Ω et est appelé volume de contrôle. Pour les schémas volumes finis considérés dans ce chapitre, l'inconnue est la valeur f_K^n , une approximation de la moyenne de f sur le volume K au temps t^n . Le principe de base de la méthode consiste à intégrer l'équation (3.1) sur chaque K du maillage \mathcal{M} . Nous obtenons une loi de conservation sous une forme non locale écrite sur le volume K et en employant par exemple un schéma d'Euler rétrograde, il vient

$$\int_K \frac{f(t^{n+1}, x) - f(t^n, x)}{\Delta t} dx + \int_{\partial K} \mathbf{J}(t^n, x) \cdot n_K(x) d\gamma(x) dt = 0.$$

La dernière étape va alors consister à approcher le "flux", $\mathbf{J}(t^n, x) \cdot n_K(x)$, en ∂K pour chaque volume de contrôle en fonction de $\{f_L^n, L \in \mathcal{M}\}$. Plus précisément, en omettant

les conditions aux limites sur $\partial\Omega$, nous notons l'interface $K|L = \overline{K} \cap \overline{L}$, entre deux volumes K et $L \in \mathcal{M}$. Le terme d'échange, $\int_{K|L} \mathbf{J}(t^n, x) \cdot n_K(x) d\gamma(x)$, entre les volumes de contrôle K et L durant l'intervalle de temps $[t^n, t^{n+1}]$ est approché par la quantité $J_{K,L}^n$, en fonction de $\{f_L^n, L \in \mathcal{M}\}$.

Précisons alors deux propriétés importantes des schémas volumes finis,

1. la conservation, c'est-à-dire $J_{K,L}^n = -J_{L,K}^n$, pour K et $L \in \mathcal{M}$ et pour tout $n \geq 0$.
2. la consistance de l'approximation de $\mathbf{J}(t^n, x) \cdot n_K(x)$, qui doit être définie en fonction de la relation entre \mathbf{J} et l'inconnue f .

À partir de ces propriétés et des estimations de stabilités sur l'approximation numérique, nous prouvons la convergence de la solution numérique obtenue vers la solution du problème continu. Pour un problème de transport linéaire, une estimation L^2 ou L^∞ sur la solution numérique est généralement suffisante pour prouver la stabilité puisque la compacité faible permet le passage à la limite. De plus, la consistance du flux numérique permet de prouver la convergence vers la solution du problème continu. Ceci peut être interprété comme un théorème de Lax pour les schémas volumes finis.

Pour un problème non linéaire, la situation est plus compliquée puisque la compacité forte est nécessaire pour effectuer le passage à la limite. Ainsi, des estimations supplémentaires doivent être établies entraînant de nouvelles difficultés techniques. Ceci constitue l'étape principale dans l'étude de convergence des schémas volumes finis pour les équations de transport non linéaires.

Dans [58], nous avons déjà traité la convergence d'un schéma pour le système de Vlasov-Poisson : la compacité faible est obtenue à partir d'une borne L^∞ sur la fonction de distribution et la compacité forte est montrée pour le champ électrique, lequel est solution de l'équation de Poisson. Nous avons aussi prouvé des estimations d'erreur sur la solution numérique. Dans ce chapitre, nous traitons une situation différente : nous étudions une équation de transport mais cette fois-ci il n'y a plus d'effet régularisant provenant d'une équation elliptique. Nous présentons plusieurs travaux, fruit d'une collaboration avec Philippe Laurençot, dans lesquels nous discrétisons une équation cinétique pour la modélisation de la croissance de grains (système de Lifshitz-Slyozov)

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\mathcal{V} f) = Q_c(f), & t \geq 0, x \geq 0, \\ u(t) + \int_0^\infty x f(t, x) dx = \rho, \end{cases} \quad (3.2)$$

où la densité de grains $f(t, x)$, ayant au temps t la taille x , interagit avec une population de monomères, $u(t)$ étant la concentration de monomères au temps t . Les quantités macroscopiques

$$M_0(t) := \int_0^\infty f(t, x) dx, \quad M_1(t) := \int_0^\infty x f(t, x) dx \quad (3.3)$$

peuvent être interprétées comme étant le nombre total de grains et la masse totale de grains.

Dans la prochaine section, nous traitons un premier problème où nous étudions la convergence d'un schéma volumes finis pour l'équation d'évolution (3.2) "sans interaction locale" c'est-à-dire où $Q_c(f) = 0$. Ceci décrit les dernières étapes de la formation et croissance de grains d'une nouvelle phase à partir d'une solution saturée

Le deuxième problème est l'équation de coagulation de Smoluchowski

$$\frac{\partial f}{\partial t} = Q_c(f),$$

modélisant la croissance de grains (particules, gouttes, etc.) par coalescence binaires. Nous écrivons d'abord l'opérateur $Q_c(f)$ sous la forme $x Q_c(f) = -\frac{\partial J}{\partial x}(f)$, où la fonction de flux $J(f)$ est donnée par une équation intégrodifférentielle non linéaire. Nous proposons alors un schéma numérique pour sa discrétisation et présentons quelques propriétés permettant d'aboutir à la convergence. Finalement, nous réalisons plusieurs simulations numériques illustrant l'efficacité du schéma pour l'étude de la solution en temps grand.

La dernière partie de ce chapitre est consacrée à la convergence de la solution numérique vers un état stationnaire non trivial pour un temps grand. La dynamique de l'équation de Lifshitz-Slyozov est bien trop compliquée pour espérer obtenir un résultat rigoureux. Cependant, lorsque nous considérons un problème de type dérive-diffusion, nous pouvons construire des schémas pour lesquels cette étude est possible. Nous décrivons d'abord le schéma volumes finis pour le modèle de dérive-diffusion et prouvons que la solution numérique converge vers un état stationnaire discret consistant avec la solution stationnaire du problème continu. La méthode présentée ici est fondée sur une inégalité d'entropie discrète.

3.2 Discrétisation du système de Lifshitz-Slyozov [64]

Dans les premières étapes d'évolution d'une solution, des grains se forment essentiellement grâce aux fluctuations de concentration dans la solution. Dès que les grains atteignent une certaine taille, la dynamique de croissance de grains entre dans une nouvelle phase. Pour décrire ces dernières étapes, une approche de type champ moyen a été formulée par Lifshitz & Slyozov [114], puis Wagner [152]. Pour des solutions extrêmement diluées, la variation du degré de saturation peut être négligée et l'évolution au cours du temps de la fonction de distribution f est donnée par

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\mathcal{V} f) = 0, \quad (t, x) \in \mathbb{R}_+^2, \quad (3.4)$$

avec la contrainte (conservation du volume total)

$$\int_0^\infty x f(t, x) dx = \text{const.} \quad t \in \mathbb{R}_+. \quad (3.5)$$

Ici $x \in \mathbb{R}_+ := (0, +\infty)$ représente la variable de volume des grains, $t \in \mathbb{R}_+$ est le temps et $\mathcal{V} = \mathcal{V}(t, x)$ désigne le taux de croissance des grains déterminé par un mécanisme de transfert de masse entre les grains [114, 152]. En général, nous avons $\mathcal{V}(t, x) = k(x)u(t) - q(x)$, où k et q sont donnés par

$$k(x) = x^\alpha, \quad q(x) = 1, \quad x \in \mathbb{R}_+, \quad \text{pour } 0 < \alpha < 1.$$

La fonction u est alors déterminée de sorte que la solution f de l'équation (3.4) satisfait la relation (3.5), c'est-à-dire,

$$u(t) \int_0^\infty k(x) f(t, x) dx = \int_0^\infty q(x) f(t, x) dx, \quad t \in \mathbb{R}_+. \quad (3.6)$$

L'objectif de ce travail est de proposer un schéma numérique pour (3.4)-(3.5) et d'étudier ses propriétés de convergence.

Nous n'étudions pas directement le système (3.4)-(3.5), mais effectuons d'abord plusieurs transformations afin d'obtenir une formulation plus convenable pour notre propos.

En effet, en suivant [127] nous introduisons le nombre de grains $F(t, x)$ de taille supérieure à x , c'est-à-dire,

$$F(t, x) = \int_x^\infty f(t, x') dx', \quad (t, x) \in \mathbb{R}_+^2. \quad (3.7)$$

La contrainte (3.5) devient alors la conservation de la norme L^1 de $F(t)$ au cours du temps et F est la solution de

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathcal{V} \frac{\partial F}{\partial x} = 0, \quad \int_0^\infty F(t, x) dx = \text{const.}, \quad (t, x) \in \mathbb{R}_+^2. \quad (3.8)$$

3.2.1 Comportement en temps long de la solution

La deuxième transformation que nous réalisons est liée au comportement en temps grand de la solution de (3.4)-(3.5) et est motivée par une étude asymptotique formelle [114] pour $\alpha = 1/3$. Cette étude indique que le couple (f, u) converge vers une solution auto-similaire lorsque le temps croît à l'infini

$$f(t, x) \sim t^{-2} f_\infty(x/t) \quad \text{et} \quad u(t) \sim u_\infty t^{-\alpha}.$$

En rappelant que la convergence vers une solution auto-similaire signifie la convergence vers un état stationnaire en variable auto-similaire plus facile à étudier, nous introduisons G et v tels que

$$\begin{cases} F(t, x) &= (1+t)^{-1} G(\ln(1+t), x/(1+t)), \quad (t, x) \in \mathbb{R}_+^2, \\ u(t) &= (1+t)^{-\alpha} v(\ln(1+t)). \end{cases}$$

À partir de (3.8), nous déduisons que (G, v) est solution de l'équation suivante

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\mathcal{W} G) = S, \quad (t, x) \in \mathbb{R}_+^2, \quad (3.9)$$

avec

$$\alpha v(t) \int_0^\infty x^{\alpha-1} G(t, x) dx = G(t, 0), \quad t \in \mathbb{R}_+, \quad (3.10)$$

$$G(0, x) = G_0(x), \quad x \in \mathbb{R}_+, \quad (3.11)$$

où $\alpha \in (0, 1)$ est fixé,

$$\begin{aligned} \mathcal{W}(t, x) &= x^\alpha v(t) - 1 - x, \quad (t, x) \in \mathbb{R}_+^2, \\ S(t, x) &= \alpha x^{\alpha-1} v(t) G(t, x), \quad (t, x) \in \mathbb{R}_+^2. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Nous étudions les propriétés et la convergence d'un schéma numérique pour (3.9)-(3.12) construit à l'aide d'une discrétisation explicite d'Euler pour la variable temporelle et un schéma volumes finis pour la variable de volume x .

Dans la suite, nous introduisons brièvement l'approximation numérique de (3.9)-(3.12) et énonçons le résultat de convergence démontré dans [64]. Mentionnons d'abord qu'à partir de (3.7) et de la positivité de f , la fonction $x \mapsto F(t, x)$ est décroissante tout comme la fonction $x \mapsto G(t, x)$ en utilisant (3.9)-(3.12). Au niveau discret, notre approximation de G va également satisfaire cette propriété. Ensuite, puisque la définition de v utilise l'inverse d'un moment de G (voir la définition (3.6) de u), une étape importante pour la convergence est l'obtention d'une borne uniforme L^∞ sur les approximations de v .

Notons que pour des données initiales à support compact, des estimations ont été établies en suivant l'évolution du support de la solution [107, 127]. Cependant, cette méthode ne semble pas pouvoir s'appliquer ici à cause de la viscosité introduite par le schéma numérique. Nous mettons alors en place une approche différente et obtenons de nouvelles bornes L^∞ en fonction du premier moment de G .

3.2.2 Le schéma numérique et principaux résultats

Soit $h \in (0, 1)$ la taille caractéristique d'une maille, nous posons

$$x_{-1/2} = 0, \quad x_i = x_{i-1/2} + \frac{h}{2}, \quad x_{i+1/2} = x_{i-1/2} + h,$$

et $\Lambda_i^h = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$ pour $i \geq 0$. Puisque x appartient au domaine non borné \mathbb{R}_+ , la solution numérique doit être calculée sur un domaine borné $[0, x_{I^h+1/2})$ où I^h est un entier supposé grand dépendant de h . Nous allons bien sûr demander à ce que $h I^h \rightarrow +\infty$ lorsque $h \rightarrow 0$. Finalement, nous notons par $T \in \mathbb{R}_+$ le temps final, N le nombre d'itérations en temps et posons

$$\Delta t = \frac{T}{N}, \quad t^n = n \Delta t, \quad 0 \leq n \leq N.$$

Les données h , Δt et I^h doivent satisfaire les conditions suivantes : nous souhaitons d'abord que le domaine de calcul approche $[0, +\infty)$, ce qui implique

$$\lim_{h \rightarrow 0} h I^h = +\infty, \quad (3.13)$$

et imposons aussi la condition CFL suivante sur le pas de temps

$$10 \frac{\Delta t}{h} (h I^h) \leq 1. \quad (3.14)$$

En notant $G_i^{n,h}$ une approximation de la moyenne de $G(t^n)$ sur l'intervalle Λ_i^h pour $i \in \{0, \dots, I^h\}$ et par v^n une approximation de $v(t^n)$, le schéma numérique étudié s'écrit

$$G_i^{n+1,h} = G_i^{n,h} - \frac{\Delta t}{h} (F_{i+1/2}^{n,h} - F_{i-1/2}^{n,h}) + \Delta t S_i^{n,h}, \quad 0 \leq i \leq I^h, \quad (3.15)$$

$$G_{-1}^{n,h} = G_{I^h+1}^{n,h} = 0, \quad (3.16)$$

$$h v^{n+1} \left(\sum_{i=0}^{I^h} a_i^h G_i^{n+1,h} \right) = G_0^{n+1,h}, \quad (3.17)$$

pour $n \in \{0, \dots, N-1\}$. L'approximation du flux $F_{i+1/2}^{n,h}$ est donnée par

$$F_{i+1/2}^{n,h} = \nu_+^n(x_{i+1/2}) G_i^{n,h} - \nu_-^n(x_{i+1/2}) G_{i+1}^{n,h}, \quad -1 \leq i \leq I^h, \quad (3.18)$$

avec

$$\nu^n(x) = x^\alpha v^n - 1 - x, \quad x \in \mathbb{R}_+, \quad (3.19)$$

$\nu_+^n(x) = \max\{0, \nu^n(x)\}$, $\nu_-^n(x) = \max\{0, -\nu^n(x)\}$, et le terme source $S_i^{n,h}$ est choisi de la manière suivante

$$S_i^{n,h} = a_i^h v^n G_i^{n,h} \quad \text{avec} \quad a_i^h = \frac{\alpha}{h} \int_{\Lambda_i^h} x^{\alpha-1} dx, \quad 0 \leq i \leq I^h. \quad (3.20)$$

Sous les conditions (3.13), (3.14) et si $h I^h$ est suffisamment grand, la solution $(G_i^{n,h})$ du schéma (3.15)-(3.20) satisfait alors des propriétés similaires à G , que nous résumons dans la Proposition 3.1 ci-dessous.

Proposition 3.1 *Il existe une constante positive x_\star dépendant seulement de α , G_0 et T telle que lorsque*

$$h I^h \geq x_\star \quad (3.21)$$

et lorsque les conditions (3.13), (3.14) sont remplies, la solution $(G_i^{n,h})$, donnée par le schéma (3.15)-(3.20), satisfait :

- *positivité et monotonie* : $0 \leq G_{i+1}^{n,h} \leq G_i^{n,h} \leq G_0^{n,h}$, $0 \leq i \leq I^h - 1$,
- *conservation du volume total* : $\sum_{i=0}^{I^h} h G_i^{n,h} = \sum_{i=0}^{I^h} h G_i^{0,h}$,

pour $n \in \{0, \dots, N\}$.

Nous définissons ensuite l'approximation (G^h, v^h) de (G, v) par

$$G^h(t, x) = \sum_{i=0}^{I^h} G_i^{n,h} \mathbf{1}_{\Lambda_i^h}(x), \quad v^h(t) = v^n, \quad x \in \mathbb{R}_+,$$

où $\mathbf{1}_E$ représente la fonction caractéristique de l'ensemble E de \mathbb{R}_+ et

$$G^h(T, x) = \sum_{i=0}^{I^h} G_i^{N,h} \mathbf{1}_{\Lambda_i^h}(x), \quad v^h(T) = v^N, \quad x \in \mathbb{R}_+.$$

Nous sommes maintenant en mesure d'énoncer le résultat principal

Théorème 3.1 *Supposons que les conditions (3.13), (3.14) et (3.21) soient remplies. Alors,*

$$\begin{aligned} G^h &\longrightarrow G \text{ dans } L^\infty(0, T; L^1(\mathbb{R}_+)), \\ v^h &\xrightarrow{*} v \text{ dans } L^\infty(0, T), \end{aligned}$$

où (G, v) est la solution faible de (3.9), (3.10), (3.11) sur $[0, T]$ avec la donnée initiale G_0 . Plus précisément, (G, v) est un couple de fonctions positives satisfaisant

$$\begin{cases} G \in \mathcal{C}([0, T]; L^1(\mathbb{R}_+)) \cap L^\infty(0, T; W^{1,1}(\mathbb{R}_+; (1+x)dx)), \\ v \in L^\infty(0, T), \end{cases} \quad (3.22)$$

et

$$\int_0^\infty (G(t) - G_0) \varphi dx = \int_0^t \int_0^\infty \left(G(s) - \mathcal{W}(s) \frac{\partial G}{\partial x}(s) \right) \varphi dx ds \quad (3.23)$$

pour tout $t \in [0, T]$ et $\varphi \in L^\infty(\mathbb{R}_+)$, où v et \mathcal{W} sont données par (3.10) et (3.12). De plus, $x \mapsto G(t, x)$ est décroissante pour tout $t \in [0, T]$.

Observons que chaque terme dans (3.23) a bien un sens puisque, en utilisant (3.22), nous déduisons que les fonctions \mathcal{W} et $\partial_x G$ appartiennent respectivement à l'espace fonctionnel $L^\infty((0, T) \times \mathbb{R}_+, (1+x)^{-1} dt dx)$ et $L^\infty(0, T; L^1(\mathbb{R}_+, (1+x)dx))$.

L'idée de la preuve du Théorème 3.1 consiste donc à trouver des estimations sur G^h et sur son gradient discret dans $L^\infty(0, T; L^1(\mathbb{R}_+, (1+x)dx))$, puis sur v^h dans $L^\infty(0, T)$. Dans le cas continu (3.9), (3.10), (3.11), ces bornes sont obtenues de la manière suivante : les estimations sur G dans $L^1(\mathbb{R}_+)$ et $L^\infty(\mathbb{R}_+)$ sont des conséquences directes de la conservation de la moyenne de G et (3.9). La nouvelle observation provient alors du fait qu'une borne supérieure sur v peut être obtenue à partir de (3.10) et des estimations précédentes sur la

norme $L^1(\mathbb{R}_+; xdx)$ de G . Ainsi, en insérant cette estimation dans (3.9), nous établissons une estimation uniforme de G dans $L^1(\mathbb{R}_+; xdx)$, et ensuite une borne supérieure de v dans $L^\infty(0, T)$. L'équation satisfaite par $\partial_x G$ donne alors la compacité faible $L^1(\mathbb{R}_+)$ sur $\partial_x G$, laquelle en retour donne l'équicontinuité en temps de G . À partir de ces estimations, nous pouvons appliquer le théorème de Dunford-Pettis et déduisons que G vit dans un sous-espace compact de $\mathcal{C}([0, T]; L^1(\mathbb{R}_+))$ et $L^1(0, T; W^{1,1}(\mathbb{R}_+))$. Au niveau discret, nous suivons les mêmes étapes pour (G^h, v^h) , ce qui est possible sous les conditions (3.13), (3.14), et (3.21).

3.3 Simulations de l'équation de Smoluchowski [66, 68]

L'équation de Smoluchowski est un modèle de croissance de grains (particules, gouttelettes, etc.) par coalescence binaire, c'est-à-dire le mécanisme de croissance conduisant deux particules à s'assembler pour n'en donner plus qu'une seule, l'équation cinétique s'écrit alors [148]

$$\frac{\partial f}{\partial t} = Q_c(f), \quad (t, x) \in \mathbb{R}_+^2, \quad (3.24)$$

$$f(0) = f_0, \quad x \in \mathbb{R}_+, \quad (3.25)$$

où $\mathbb{R}_+ := (0, +\infty)$ et le terme de coagulation $Q_c(f)$ est donné par

$$Q_c(f)(x) = \frac{1}{2} \int_0^x a(x', x - x') f(x') f(x - x') dx' - \int_0^\infty a(x, x') f(x) f(x') dx' \quad (3.26)$$

pour $x \in \mathbb{R}_+$. La première intégrale dans $Q_c(f)$ décrit la formation d'une particule de volume x résultant de l'assemblage de deux particules de volume x' et $x - x'$ avec $x' \in (0, x)$. La seconde partie de l'intégrale modélise quant-à-elle la désagrégation des particules de volume x par coagulation avec d'autres particules. Le coefficient de coagulation $a = a(x, x')$, caractérise le taux de coalescence avec lequel deux particules de volumes x et x' produisent une particule de volume $x + x'$. D'un point de vue mathématique, c'est une fonction symétrique, positive,

$$0 \leq a(x, x') = a(x', x), \quad (x, x') \in \mathbb{R}_+^2.$$

Observons d'abord que la coagulation de particules conserve le volume total alors que le nombre de particules lui diminue. À partir de la fonction de distribution f , le nombre total de particules $M_0(t)$ et le volume total de particules $M_1(t)$ au temps $t \geq 0$ sont donnés par (3.3). Il est facile de vérifier que M_0 est une fonction décroissante du temps, de manière plus surprenante le moment M_1 , représentant le volume total de particules, peut ne pas rester constant au cours du temps lorsque le coefficients de coagulation a croît trop rapidement [111]. Plus précisément, si a croît suffisamment vite pour des grands x, x' , c'est-à-dire plus les particules ont un volume important, plus elles s'assemblent rapidement. Une accélération de la croissance de grains se produit, conduisant à brève échéance à la formation de particules de taille "infinie", celles-ci ne sont alors plus prises en compte dans le processus de coagulation, M_1 commence donc à décroître. Ce phénomène est appelé habituellement la *gélification*.

L'objectif de ce travail est de proposer et d'étudier un schéma numérique pour l'équation de coagulation (3.24). Il s'agit ensuite d'effectuer des simulations numériques pour rendre compte de la *gélification* lorsque celle-ci a lieu et d'étudier le comportement en temps long de la solution dans le cas contraire. Auparavant, des méthodes numériques ont été

développées pour la discrétisation de (3.24) ; nous renvoyons par exemple à [104, 109] pour des méthodes déterministes, et à [53] pour des méthodes stochastiques. Cependant, aucune des méthodes déterministes mentionnées n'utilise la formulation alternative de l'équation de coagulation (3.24) écrite sous une forme *conservative*, laquelle a pourtant été utilisée dans [118]. Plus précisément, il a été noté dans [118] que l'équation de coagulation (3.24) peut aussi s'écrire sous la forme suivante :

$$x \frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial J(f)}{\partial x}, \quad (t, x) \in \mathbb{R}_+^2, \quad (3.27)$$

où

$$J(f)(x) := \int_0^x \int_{x-u}^{\infty} u a(u, v) f(u) f(v) dvdu, \quad x \in \mathbb{R}_+. \quad (3.28)$$

Par notre approche, nous tirons avantage de cette formulation (3.27) pour proposer un schéma numérique de l'équation de coagulation en utilisant l'esprit de la méthode volumes finis. Avant de décrire en détail le schéma, insistons ici sur le fait que la formulation (3.27) n'implique pas forcément que M_1 reste constant au cours du temps contrairement à ce que pourrait laisser penser une intégration directe de (3.27) sur \mathbb{R}_+ . L'observation clé est que les propriétés d'intégrabilité de f varient avec le temps et ne garantissent pas forcément que $J(f)(t, x) \rightarrow 0$ lorsque $x \rightarrow +\infty$ pour tout temps $t \geq 0$. Le phénomène de *gélification* coïncide avec le fait que la limite $J(f)(t, x)$ est différente de zéro lorsque $x \rightarrow +\infty$ pour un certain temps t . En effet, observons que d'après (3.27), nous avons

$$\lim_{X \rightarrow +\infty} \int_0^t J(f)(s, X) ds = M_1(0) - M_1(t) \quad \text{for } t > 0.$$

Dans la prochaine partie, nous décrivons la discrétisation de (3.27), une étape préliminaire consiste à tronquer convenablement la deuxième intégrale dans (3.28). Nous comparons d'abord la solution numérique avec une solution exacte connue aussi bien pour l'étude de la *gélification* que pour l'étude du comportement en temps grand de la solution. Nous nous concentrons ensuite sur la simulation numérique de la *gélification* et observons la perte de matière attendue à partir d'un certain temps fini. Nous verrons aussi que cette perte correspond à l'explosion simultanée de certains moments de la fonction de distribution f .

3.3.1 Troncation du domaine

Puisque la variable de volume x vit dans l'intervalle non borné \mathbb{R}_+ , la première étape est de réduire le domaine de calcul à un intervalle fini. L'approche la plus souvent utilisée consiste à tronquer la variable de volume au delà d'une valeur maximale R . Dans ce cas, nous devons choisir une troncation convenable $J^R(f)$ de l'opérateur de coagulation $J(f)$ parmi plusieurs possibilités. Ceci est discuté par exemple dans [9], et nous considérons ici seulement deux des possibilités. La première est une forme *conservative*, qui s'écrit

$$J_c^R(f)(x) := \int_0^x \int_{x-u}^{R-u} u a(u, v) f(u) f(v) dvdu, \quad x \in (0, R). \quad (3.29)$$

Dans ce cas, nous avons $J_c^R(f)(R) = J_c^R(f)(0) = 0$, ce qui implique que la solution f_R de l'équation

$$x \frac{\partial f_R}{\partial t} = -\frac{\partial J_c^R(f_R)}{\partial x}, \quad (t, x) \in \mathbb{R}_+ \times (0, R), \quad (3.30)$$

satisfait la conservation du volume total indépendamment de la valeur du coefficient a

$$\int_0^R x f_R(t, x) dx = \int_0^R x f_R(0, x) dx, \quad t \in \mathbb{R}_+.$$

La seconde troncation est cette fois-ci *non conservative*,

$$J_{nc}^R(f)(x) := \int_0^x \int_{x-u}^R u a(u, v) f(u) f(v) dv du, \quad x \in (0, R). \quad (3.31)$$

Dans ce cas, $J_{nc}^R(f)(R) \geq 0$ est tel que le volume total de la solution f_R de l'équation

$$x \frac{\partial f_R}{\partial t} = -\frac{\partial J_{nc}^R}{\partial x}(f_R), \quad (t, x) \in \mathbb{R}_+ \times (0, R), \quad (3.32)$$

est décroissant par rapport au temps. Cette dernière approximation est particulièrement bien adaptée pour l'étude de la *gélification* [9]. Une telle troncature est utilisée dans [104] pour la réalisation de simulations numériques sur l'équation de coagulation originale (3.24).

Lorsque $a(x, x')/(x x') \rightarrow 0$ quand $x + x' \rightarrow +\infty$, la convergence pour $R \rightarrow +\infty$ des solutions de (3.30) vers une solution de (3.27) a été prouvée dans [52]. Sous la même hypothèse, un résultat similaire peut être démontré pour des solutions de (3.32) en utilisant une approche développée dans [108]. Dans les deux cas, le principal objectif est d'établir des résultats d'existence pour (3.27). Mentionnons que l'hypothèse précédente sur le coefficient de croissance $a(x, x')$ n'exclut pas les coefficients pour lesquels la *gélification* a lieu (comme par exemple $a(x, x') = (x x')^\alpha$ pour $1/2 < \alpha \leq 1$). Ensuite, lorsque la *gélification* ne se produit pas, nous démontrons que les solutions de (3.30) et (3.32) convergent toutes les deux vers une solution de (3.27) satisfaisant $M_1(t) = M_1(0)$ pour $t \geq 0$. Nous renvoyons à [52, 56] pour le cas conservatif et à [68] dans le cas non conservatif.

Théorème 3.2 *Supposons que le coefficient de coagulation a et la donnée initiale f^{in} satisfont*

$$a(y, y_*) \leq A (1 + y + y_*), \quad (y, y_*) \in \mathbb{R}_+^2, \quad (3.33)$$

pour $A > 0$ et

$$f^{in} \in L_1^1(\mathbb{R}_+) := L^1(\mathbb{R}_+; (1 + y) dy) \quad \text{est positive p.p.}$$

Pour $n \geq 1$, nous notons par f_n la solution de (3.31), (3.32) avec $R = n$. Alors, il existe une sous-suite (f_{n_k}) de (f_n) et une solution f de (3.27), (3.28) conservant la masse et telle que

$$f_{n_k} \longrightarrow f \quad \text{dans } \mathcal{C}([0, T]; \text{faible} - L_1^1(\mathbb{R}_+)) \quad (3.34)$$

pour tout $T > 0$.

Ensuite, seule la convergence de l'approximation non conservative (3.31), (3.32) est valide lorsque $a(x, x') \sim x x'$ pour x, x' grands [106]. Puisque l'approximation conservative (3.29) ne convient pas à l'étude du phénomène de *gélification*, nous ne considérerons que des schémas non conservatifs dans la suite.

3.3.2 Le schéma numérique

Après avoir réduit le domaine de calcul à un intervalle borné, la seconde étape va consister à introduire une discrétisation en temps et en volume. À ce propos, nous considérons $h \in (0, 1)$, et I^h un entier suffisamment grand, puis notons par $(x_{i-1/2})_{i \in \{0, \dots, I^h\}}$ un maillage de $(0, R)$, où

$$x_{-1/2} = 0, \quad x_i = (x_{i-1/2} + x_{i+1/2})/2, \quad \Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2} \leq h, \quad (3.35)$$

et $\Lambda_i^h = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$ pour $i \geq 0$. Grâce à la formulation (3.27), il semble naturel de calculer une approximation de $g(t, x) = x f(t, x)$ plutôt que de $f(t, x)$. En notant g_i^n une approximation de la moyenne de $g(t^n, x) = x f(t^n, x)$ sur Λ_i^h pour $i \in \{0, \dots, I^h\}$ et $t^n = n \Delta t$, le schéma numérique que nous allons mettre en place s'écrit alors

$$g_i^{n+1} = g_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \left(J_{i+1/2}^{h,n} - J_{i-1/2}^{h,n} \right), \quad 0 \leq i \leq I^h, \quad (3.36)$$

pour $n \in \{0, \dots, N-1\}$, où $J_{i+1/2}^{h,n}$ est donné par

$$J_{i+1/2}^{h,n} = \sum_{k=0}^i \Delta x_k g_k^n \left\{ \sum_{j=\alpha_{i,k}}^{I^h} \int_{\Lambda_j^h} \frac{a(x', x_k)}{x'} dx' g_j^n + \int_{x_{i+1/2}-x_k}^{x_{\alpha_{i,k}-1/2}} \frac{a(x', x_k)}{x'} dx' g_{\alpha_{i,k}-1}^n \right\}$$

et l'entier $\alpha_{i,k}$ correspond à l'indice de la cellule telle que $x_{i+1/2} - x_k \in \Lambda_{\alpha_{i,k}-1}^h$. Notons que le flux approché $J_{i+1/2}^{h,n}$ est une discrétisation pour $-1 \leq i \leq I^h$ de

$$\begin{aligned} J_{nc}^R(f)(x_{i+1/2}) &= \int_0^{x_{i+1/2}} \int_{x_{i+1/2}-x^*}^R a(x', x^*) x^* f(x^*) f(x') dx' dx^* \\ &= \sum_{k=0}^i \int_{\Lambda_k^h} x^* f(x^*) \int_{x_{i+1/2}-x^*}^R a(x', x^*) f(x') dx' dx^*. \end{aligned}$$

Avant de présenter des résultats numériques, nous donnons quelques propriétés, vérifiées par la solution numérique de (3.36), qui constituent l'outil principal de la preuve de convergence.

Proposition 3.2 *Sous la condition de stabilité sur le pas de temps,*

$$\Delta t \sup_{i,n} \left(\int_{\delta_h}^R \frac{a(x_i, x')}{x'} g^h(t^n, x') dx' \right) < 1, \quad (3.37)$$

où $\delta_h = \min\{\Delta x_i/2; i = 0, \dots, I^h\}$, la fonction g^h est positive et le volume total volume est décroissant par rapport au temps, c'est-à-dire,

$$\sum_{i=0}^{I^h} \Delta x_i g_i^{n+1} \leq \sum_{i=0}^{I^h} \Delta x_i g_i^n, \quad 0 \leq n \leq N-1. \quad (3.38)$$

De plus, si $\varphi : [0, +\infty) \rightarrow [0, +\infty)$ est une fonction décroissante, nous avons

$$\sum_{i=0}^{I^h} \Delta x_i \varphi(x_i) g_i^{n+1} \leq \sum_{i=0}^{I^h} \Delta x_i \varphi(x_i) g_i^n. \quad (3.39)$$

3.3.3 Le phénomène de gélification

Cette partie est consacrée à l'étude numérique de la *gélification*, c'est-à-dire à la possible perte de matière durant l'évolution.

Comme nous l'avons déjà mentionné dans l'introduction, lorsque le coefficient de coagulation a croît très rapidement pour de grands x, x' , un emballement de la croissance de grains se produit et conduit à partir d'un certain temps à la formation de particules de volume "infini". Puisque ces particules ne sont plus prises en compte dans l'équation de

Smoluchowski (3.24), une partie de la matière disparaît du système. Par conséquent, le volume total M_1 défini par (3.3) décroît avec le temps, et le temps de *gélification* T_{gel} est défini par

$$T_{gel} := \inf \left\{ t \geq 0, \int_0^\infty x f(t, x) dx < \int_0^\infty x f(0, x) dx \right\} \in [0, +\infty].$$

Nous dirons alors que la *gélification* a lieu lorsque $T_{gel} < +\infty$.

Une preuve élémentaire que $T_{gel} < +\infty$ a été donnée dans [111] lorsque $a(x, x') = x x'$, et un problème central en physique dans les années quatre-vingt fût de déterminer pour quel coefficient de coagulation a , le temps de *gélification* T_{gel} est fini. Pour simplifier notre discussion, nous nous intéressons ici seulement aux modèles du type

$$a(x, x') = x^\mu (x')^\nu + x^\nu (x')^\mu, \quad 0 \leq \mu \leq \nu \leq 1. \quad (3.40)$$

Il a été prouvé que $T_{gel} < +\infty$ pour $\mu = \nu = 1$ [111] et que la *gélification* ne peut pas se produire (c'est-à-dire $T_{gel} = +\infty$) si $\lambda := \mu + \nu \leq 1$. Dans les autres cas, $\lambda \in (1, 2)$, des solutions particulières possédant un temps de *gélification* fini ont été construites dans [49, 113], ce qui confortait la conjecture que $T_{gel} < +\infty$ pour toute donnée initiale avec un volume total fini dès que $\lambda \in (1, 2)$ [90, 112].

Cette conjecture a été prouvée très récemment dans [99] en utilisant une approche probabiliste et dans [55] par des arguments déterministes. Une fois que nous savons que la *gélification* a lieu, une question naturelle est de déterminer T_{gel} et d'étudier le comportement de $f(t)$ près du temps de *gélification*. Des arguments formels en physique (voir par exemple [90, 112]) indiquent que

$$f(T_{gel}, x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\sim} A x^{-(\lambda+3)/2}, \quad (3.41)$$

alors que le temps de *gélification* coïnciderait avec le temps d'explosion du moment d'ordre $(1 + \lambda)/2$ de f . Le moment M_ℓ d'ordre $\ell \geq 0$ de f est défini par

$$M_\ell(t) := \int_0^\infty x^\ell f(t, x) dx, \quad t \geq 0, \quad \ell \in [0, +\infty).$$

Cette conjecture n'a toujours pas été prouvée rigoureusement ; même si plusieurs résultats partiels vont dans ce sens [55]. De plus, des estimations de T_{gel} sont donnés dans [90]. Un résultat plus précis est en fait connu lorsque $\mu = \nu = 1$: dans ce cas, $T_{gel} = 1/M_2(0)$ est le temps d'explosion du second moment M_2 .

L'objectif principal des simulations numériques présentées dans ce travail est double : d'une part, nous espérons observer numériquement la *gélification*. D'autre part, nous étudions le comportement de f et de ses moments proche du temps de *gélification* et vérifions si ces résultats numériques viennent conforter ou contredire ces conjectures.

Ici, nous considérons seulement le cas (3.40) avec $\mu = \nu = \lambda/2$; c'est-à-dire,

$$a(x, x') = (x x')^{\lambda/2}, \quad (x, x') \in \mathbb{R}_+^2,$$

avec $\lambda \in (1, 2]$, et nous prenons pour donnée initiale f_0 :

$$g_0(x) = x f_0(x) = \exp(-x), \quad x \in \mathbb{R}_+. \quad (3.42)$$

Puisque $\lambda > 1$, le phénomène de *gélification* a lieu et $T_{gel} < +\infty$. De plus, pour $\lambda = 2$, l'équation de Smoluchowski (3.24) admet une solution explicite pour la donnée initiale (3.42), et le temps de *gélification* est $T_{gel} = 1$. Nous voyons dans la Figure 3.1 que le choix

de la troncature (3.31) associé au schéma (3.36) fournit une bonne estimation du temps de *gélification* exact.

Ensuite, comme nous l'avons rappelé dans la partie précédente, nous nous attendons à ce que les moments $M_\ell(t)$ explosent lorsque $t \rightarrow T_{gel}$ pour $\ell \geq (1 + \lambda)/2$ et restent bornés si $\ell < (1 + \lambda)/2$. Ainsi pour différentes valeurs de λ , nous calculons des approximations de la solution de (3.24) complétée de la donnée initiale (3.42) tout en faisant croître le paramètre de troncature R . En rappelant que g^h est une approximation numérique de $g(t, x) = x f(t, x)$, nous définissons le moment d'ordre $\ell \geq 0$ par

$$\mathcal{M}_\ell^h(t^n) = \sum_{i=0}^{I^h} \Delta x_i x_i^{\ell-1} g_i^n,$$

et nous traçons l'évolution au cours du temps des moments d'ordre 1, $(1 + \lambda)/2$, et 2 (voir Figure 3.1). Il est clair que la *gélification* se produit à partir d'un temps fini et les moments d'ordre $(1 + \lambda)/2$ et 2 se mettent alors à croître soudainement près du temps de *gélification* numérique. Puisqu'ils croissent lorsque R croît, cela semble confirmer l'explosion des moments de la solution de l'équation de coagulation. Par ailleurs, observons que pour des petites valeurs de λ , nous devons choisir une grande valeur pour le paramètre de troncature R afin de stabiliser le temps de *gélification* numérique près d'une valeur fixé. Nous pouvons nous attendre à cela puisque le phénomène de *gélification* devient plus faible lorsque le paramètre λ se rapproche de 1, et devient alors plus difficile à capter numériquement.

Les dernières images dans la Figure 3.1 sont des tentatives pour vérifier numériquement la validité de (3.41). Puisque le temps de *gélification* n'est pas connu de manière exacte (excepté pour $\lambda = 2$), il n'est pas évident d'obtenir une approximation précise de $f(T_{gel})$. De plus, la troncature influence beaucoup le comportement de f pour de grandes valeurs de x après le temps de *gélification*. Nous décidons alors de représenter sur la même figure la solution numérique juste avant et juste après le temps de *gélification* et de calculer la pente où les deux courbes coïncident. Nous obtenons alors un bon accord avec le comportement attendu (3.41) pour λ suffisamment grand ($\lambda \in \{3/2, 7/4, 2\}$), ce qui confirme par évidence numérique la théorie.

3.4 Conclusion et perspectives

Dans ce chapitre, nous avons mis au point plusieurs schémas volumes finis pour la discrétisation d'équations non linéaires en théorie cinétique pour la croissance de grains. Nous avons montré l'efficacité de ces schémas permettant ainsi de décrire avec beaucoup de précision le comportement de la solution auto-similaire pour le système de Lifshitz-Slyozov, ou de l'équation de Smoluchowski lorsque la *gélification* se produit. Une fois que l'on sait que la *gélification* a lieu, une question naturelle est de déterminer T_{gel} et d'étudier le comportement de $f(t)$ au temps de *gélification*. Des arguments formels rencontrés dans la littérature en physique indiquent que

$$f(T_{gel}, x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\sim} A x^{-(\lambda+3)/2},$$

et le temps de *gélification* coïncide avec le temps d'explosion de certains moments. Bien qu'une preuve mathématique de ceci est toujours manquante, les simulations numériques semblent conforter cette conjecture. Nous voyons clairement que les simulations numériques peuvent ainsi aider à la compréhension de ce phénomène complexe.

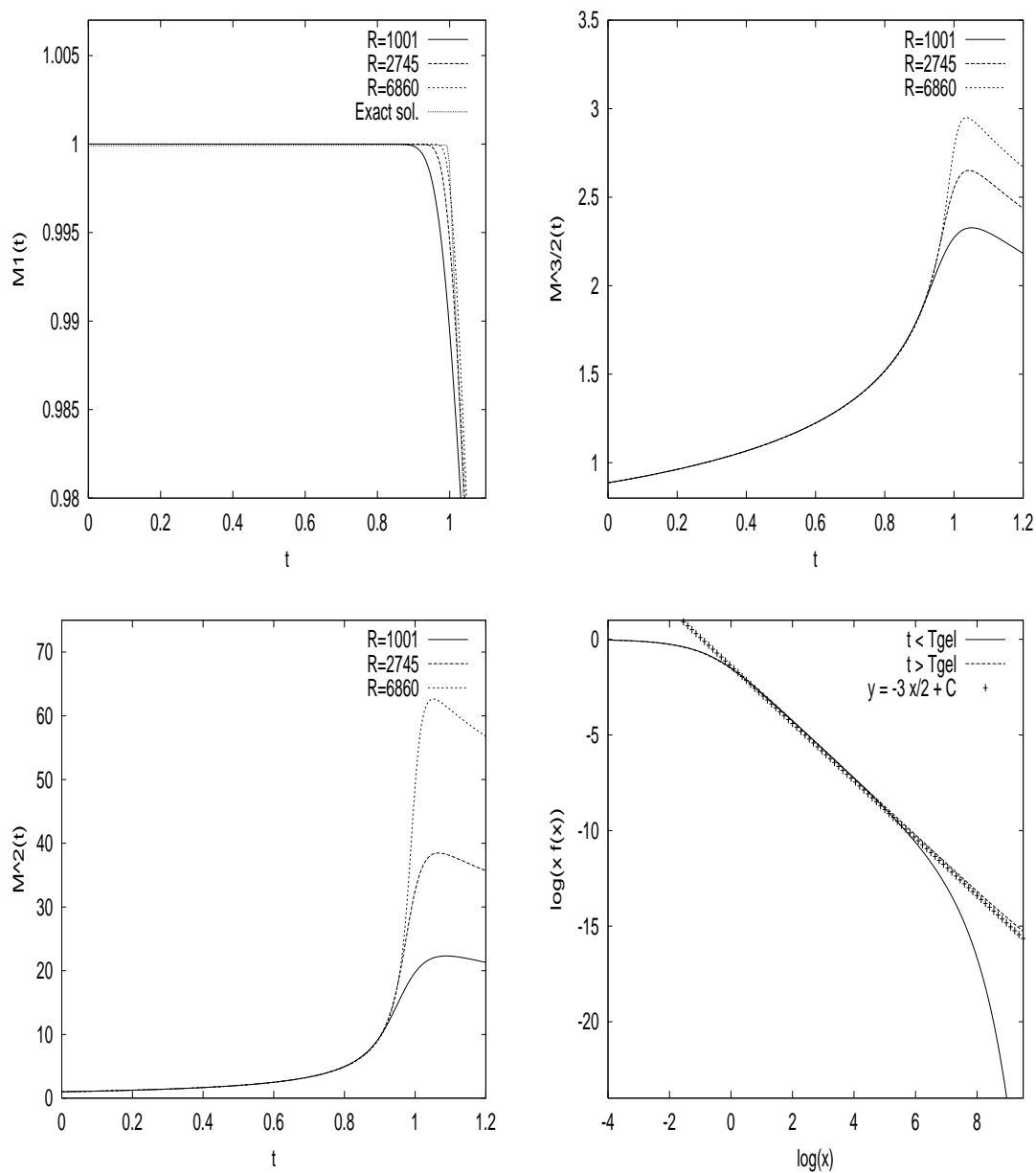


FIG. 3.1 – $\lambda = 2$: évolution au cours du temps des moments discrets de $f(t)$, $\mathcal{M}^{h,1}(t)$, $\mathcal{M}^{h,3/2}(t)$, et $\mathcal{M}^{h,2}(t)$, et l'approximation de $x f(t, x)$ pour $t \simeq T_{gel}$.

En ce qui concerne l'analyse numérique des schémas volumes finis, nous souhaitons établir un programme de recherche pour la construction de méthodes numériques permettant de décrire correctement le comportement en temps grand. La dynamique de la solution numérique donnée par (3.15)-(3.17) pour l'équation de Lifshitz-Slyozov-Wagner ou par (3.36) pour l'équation de Smoluchowski est bien sûr trop compliquée pour être complètement analysée théoriquement. Nous nous intéressons alors dans un premier temps à la dynamique plus simple d'un modèle de dérive diffusion. Ce modèle décrit le transport de particules chargées au niveau macroscopique. Il consiste en une équation de conservation de la masse pour la densité de particules $\rho(t, x)$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - \nabla \cdot (\nabla \rho + \rho \nabla V) = 0. \quad (3.43)$$

Pour compléter ce modèle, les interactions auto-consistantes sont prises en compte en considérant l'équation de Poisson satisfaite par le potentiel $V(t, x)$

$$-\Delta V = \rho. \quad (3.44)$$

Des conditions aux limites de type Dirichlet peuvent être prises en compte

$$\rho = \bar{\rho}; \quad x \in \Gamma = \partial\Omega, \quad V = \bar{V}, \quad x \in \Gamma, \quad (3.45)$$

ou des conditions de type Neumann

$$(\nabla \rho + \rho \nabla V) \cdot \nu(x) = 0, \quad (3.46)$$

où $\nu(x)$ représente le vecteur normal à $\partial\Omega$ unitaire pointé vers l'extérieur du domaine et pris au point $x \in \partial\Omega$. La solution du système de dérive-diffusion doit satisfaire la propriété suivante

$$\frac{dH}{dt} \leq - \int_{\Omega} \rho(t, y) [\nabla (\log(\rho(t, y)) + V(t, y))]^2 dy,$$

où

$$H(t) = \int_{\Omega} \rho(t, y) \log(\rho(t, y)) + \frac{1}{2} |\nabla V(t, y)|^2 dy.$$

Ceci permet de prouver que la solution converge vers un état stationnaire donné par ($\alpha = \text{const.}$)

$$-\Delta V = \alpha \exp(-V). \quad (3.47)$$

L'objectif de ce travail est de démontrer une propriété similaire pour une solution numérique. Nous proposons alors un schéma complètement implicite en temps et montrons une propriété de dissipation de l'entropie discrète.

La prochaine étape consisterait à démontrer des inégalités de Log-Sobolev discrètes, comme pour le cas continu, afin d'établir des taux de convergence vers l'équilibre.

Chapitre 4

Modélisation mathématique du chimiotactisme

Le chimiotactisme décrit le mouvement de cellules "orienté" par une ou plusieurs substances chimiques. Par exemple, des bactéries attirées par de la nourriture, se déplacent vers les zones où cette nourriture est la plus abondante. La bactérie *Escherichia Coli* est très étudiée en laboratoire, et son mouvement est plutôt bien décrit. Il se décompose en deux phases qui alternent. Dans un premier temps, la bactérie se déplace en ligne droite grâce à des flagelles en rotation qui agissent comme des moteurs répartis sur la membrane (phase *run*). Puis, ses flagelles s'inversent brutalement, ce qui a pour conséquence de réorienter la bactérie (phase *tumble*). Certaines molécules ont pour effet d'augmenter la durée de la première phase (*run*), ce qui provoque une marche aléatoire biaisée de la bactérie. Nous ne nous intéressons pas au mouvement d'une bactérie isolée, mais à un ensemble "continu" de bactéries. L'effet du signal chimique est modélisé par un mouvement global des cellules orienté par le gradient de concentration de cette molécule.

Un autre exemple est donné par le *Dictyostelium* (amibes), un organisme unicellulaire qui peut sécréter un signal chimique (la molécule cAMP) qui se propage spontanément en spirales. Les cellules répondent à ce signal par un mouvement dirigé vers les centres émetteurs de pulsations, jusqu'à former des agrégats de cellules. À partir de là, les cellules se différencient à l'intérieur du groupe multicellulaire, et s'assemblent. Le chimiotactisme joue là un rôle dans l'agrégation des amibes.

Dans la situation la plus simple, nous considérons seulement des cellules représentées par un *continuum*, la densité n , et une seule substance chimique (le chimio-attractant), la *concentration* c . Un modèle simple pour l'évolution en temps et en espace du couple (c, n) a été proposé par Patlak [136], et plus tard par Keller & Segel [103] (PKS), il s'écrit

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \nabla \cdot (D_m \nabla n - \chi n \nabla c) = 0, \quad x \in \Omega, t \geq 0, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D_c \Delta c = n - c, \quad x \in \Omega, t \geq 0, \quad (4.2)$$

où Ω est un domaine ouvert borné de \mathbb{R}^2 . Également, nous notons par χ la *sensibilité chimiotactique*, qui est ici supposée constante par rapport à c tandis que D_m représente la *motilité* des cellules. Dans certains cas, lorsque la répartition de la concentration chimique est instantanée, l'équation pour c peut être remplacée par l'équation de Poisson plus simple

$$-\Delta c = n - c, \quad x \in \Omega, t \geq 0, \quad (4.3)$$

avec des conditions aux limites de Neumann c'est-à-dire $\nabla n \cdot \nu = \nabla c \cdot \nu = 0$, où ν est le vecteur normal unitaire défini sur le bord $\partial\Omega$.

D'un point de vue mathématique, nous savons que les solutions du modèle de PKS (4.1), (4.2) ou (4.1), (4.3) explosent en temps fini en une masse de Dirac. En effet, la densité de cellules n se concentre de plus en plus dans des régions autour de points isolés et la solution finit par exploser en ces points. Nous renvoyons à [91] pour l'étude mathématique des solutions à symétrie sphérique dans une boule, le point d'explosion étant le centre de la boule (ceci étant la seule singularité possible). Pour l'explosion dans le cas non symétrique en dimension deux, certains résultats sont établis dans [94, 95], les points d'explosion étant situés sur la frontière. Des simulations numériques viennent illustrer ces résultats théoriques [76, 120]. En fait, l'explosion en certains points du domaine est compatible avec les expériences réalisées sur le *Dictyostelium* ou l'*Escherichia Coli* et les résultats numériques sur le modèle de PKS donnent une idée de l'influence de la concentration chimique sur le mouvement des cellules. Ce modèle est donc très attrayant pour décrire les phénomènes où les cellules se concentrent en certains points isolés. Ceci justifie les nombreux travaux récents sur le modèle de PKS autant d'un point de vue théorique que numérique. Nous renvoyons aux articles de Horstmann pour une revue complète des travaux dans ce domaine [94, 95].

D'autre part, des expériences sur des cellules endothéliales humaines sur un matrigel ont été réalisées. Leur mouvement conduit à la formation de réseaux qui sont interprétés comme les premiers signes de la vasculature [77, 70]. Ce phénomène est important puisqu'il est responsable de l'angiogénèse, un facteur important pour la croissance de tumeurs. Ces structures ne peuvent hélas pas être expliquées par les modèles paraboliques de type PKS qui conduisent génériquement à l'explosion en certains points. Récemment, des simulations numériques sur des modèles hyperboliques ont mis en évidence la formation de ces réseaux [146, 77]. Ceci conforte la tendance actuelle en mathématiques pour la biologie d'utiliser des modèles hyperboliques pour décrire des régimes intermédiaires au niveau macroscopique plutôt que des équations paraboliques (voir par exemple [70] et les références correspondantes).

Une autre classe de modèles à été proposée en considérant des interactions intercellulaires à un niveau plus local, disons des interactions individuelles ou mésoscopiques. Cette approche conduit à l'utilisation d'équations cinétiques (de type Boltzmann) avec des noyaux non linéaires qui nécessitent une connaissance détaillée du mouvement à l'échelle des cellules. La bactérie *Escherichia coli*, par exemple, est connue pour se déplacer en alternant les phases de *runs* et de *tumbles* [5]. L'avantage du modèle cinétique est qu'il fournit non seulement une meilleure description du mouvement, mais permet d'unifier descriptions microscopiques et modèles macroscopiques par l'intermédiaire de limites diffusives ou hydrodynamiques.

Dans la prochaine section, nous présentons le modèle cinétique décrivant les changements d'orientation des cellules au niveau mésoscopique. Nous définissons alors le cadre mathématique général permettant d'établir le lien entre les différents modèles présentés dans la littérature [70] (changement d'échelles, interactions entre les cellules, effet du chimio-attractant). Puis, en collaboration avec Chi-Wang Shu, nous proposons un schéma WENO d'ordre élevé et préservant les équilibres pour l'approximation des modèles hyperboliques avec termes sources [71]. Finalement, à l'aide d'un autre changement d'échelle sur l'équation cinétique, nous obtenons le système parabolique de PKS. Nous proposons un schéma numérique pour sa discrétisation en dimension deux et prouvons la convergence de l'approximation numérique vers la solution de PKS. Dans [75], plusieurs simulations illustrent l'explosion de la solution obtenue par l'algorithme numérique.

4.1 Le cadre cinétique

Les phénomènes de *run* et *tumble* peuvent être modélisés par un processus stochastique appelé le processus de *saut en vitesse*. Il a été introduit pour la première fois par Alt [5] et développé ensuite dans [92, 149]. Une équation cinétique décrivant ce phénomène s'écrit alors [5, 129]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = \mathcal{T}(S, f), \quad (4.4)$$

où $f(t, x, v)$ représente la fonction de distribution des cellules et dépend du temps t , de la position x et de la vitesse $v \in V \subset \mathbb{R}^d$ tandis que \mathcal{T} est un opérateur décrivant les changements d'orientation des cellules. La concentration chimique c est toujours solution de (4.2), où la densité totale de cellules n est donnée par

$$n(t, x) = \int_V f(t, x, v) dv.$$

Comme dans [92, 130], nous supposons que l'opérateur de changement d'orientation s'écrit sous la forme

$$\mathcal{T}(c, f) = \mathcal{T}_0(f) + \varepsilon \mathcal{T}_1(c, f), \quad (4.5)$$

où \mathcal{T}_0 représente la partie dominante du noyau de changement d'orientation et modélise le processus de *tumble* en l'absence de substance chimique tandis que \mathcal{T}_1 est une perturbation due aux effets de la concentration chimique. Le paramètre ε est ici lié à la fréquence des changements d'orientation des cellules. L'opérateur \mathcal{T}_i , $i = 0, 1$, s'écrit le plus souvent comme un opérateur intégral

$$\mathcal{T}_i(f)(t, x, v) = \int_V (K_i(v, v')f(t, x, v') - K_i(v', v)f(t, x, v)) dv'. \quad (4.6)$$

Ici, le noyau $K_i(v, v')$ décrit la réorientation des cellules, c'est-à-dire la probabilité qu'une cellule se déplaçant à la vitesse v change son orientation pour une vitesse v' et peut dépendre du chimio-attractant et de ses dérivées spatiales et temporelles. Mentionnons d'abord qu'une conséquence directe de la structure (4.6) est que \mathcal{T}_0 et \mathcal{T}_1 satisfont automatiquement la conservation de la masse. Nous supposons de plus que l'opérateur dominant \mathcal{T}_0 conserve le flot de population, c'est-à-dire,

$$\int_V \mathcal{T}_0(f) v dv = 0. \quad (4.7)$$

Finalement, nous supposons que pour tout $n \in [0, +\infty)$ et $u \in \mathbb{R}^d$, il existe une unique fonction $F_{n,u} \in L^1(V; (1 + |v|)dv)$ telle que

$$\mathcal{T}_0(F_{n,u}) = 0, \quad \int_V F_{n,u}(v) dv = n, \quad \int_V F_{n,u}(v) v dv = n u. \quad (4.8)$$

L'hypothèse (4.8) signifie simplement que l'opérateur \mathcal{T}_0 est de rang $(d + 1)$. Cette hypothèse est consistante avec la Remarque 2.1 faite dans l'article d'Othmer & Hillen [92], où une telle condition est attendue lorsque nous nous intéressons au caractère hyperbolique du processus. D'autre part, l'hypothèse (4.7) de conservation du flux de la population par l'opérateur \mathcal{T}_0 n'est habituellement pas faite, car la plupart du temps un changement d'échelle de type limite diffusive est réalisé pour retrouver le modèle de PKS où cette hypothèse n'est pas utile.

Dans la suite, nous étudions différents modèles obtenus à partir de l'équation cinétique (4.4) en effectuant des changements d'échelle appropriés. Nous obtenons ainsi plusieurs systèmes hyperboliques et proposons aussi des schémas numériques pour lesquels nous retrouvons certaines propriétés du modèle continu comme la conservation de la masse, la préservation de la positivité de la densité et des états stationnaires et enfin des inégalités d'entropie.

4.2 Le cadre hyperbolique [70]

4.2.1 La limite hydrodynamique

Comme nous l'avons déjà mentionné, une tendance générale consiste à employer des équations hyperboliques pour décrire les régimes transitoires au niveau macroscopique plutôt que des modèles paraboliques comme (4.1), (4.2), qui semblent moins précis. Nous renvoyons par exemple à [50, 51, 146] à ce sujet. Notre propos est ici de décrire une méthode systématique pour l'obtention de tels modèles et de tenter de justifier l'utilisation de certains systèmes d'équations déjà développés de manière *ad hoc* [146, 77] ou à l'aide de méthodes de fermeture de moments [93] en prenant comme point de départ l'équation cinétique (4.4). Dans cette section, nous verrons que les modèles hyperboliques pour le chimiotactisme peuvent également être obtenus comme une limite fluide de l'équation de transport cinétique (4.4), mais en utilisant un changement d'échelle différent de celui réalisé pour l'obtention du modèle de PKS [32].

Nous effectuons un changement d'échelle par rapport aux variables de temps et d'espace $t \rightarrow \varepsilon t$ et $x \rightarrow \varepsilon x$ dans l'équation (4.4) et posons

$$n(t, x) = \int_V f(t, x, v) dv, \quad n(t, x) u(t, x) = \int_V f(t, x, v) v dv. \quad (4.9)$$

Ensuite nous introduisons f_1 telle que

$$\varepsilon f_1(t, x, v) = f(t, x, v) - F_{n(t,x),u(t,x)}(v),$$

où la fonction de distribution d'équilibre $F_{n,u}$ est définie par (4.8). Nous intégrons alors (4.4) par rapport à $v \in V$ et utilisons la définition (4.9) et la conservation de la masse pour obtenir à l'ordre un par rapport à ε

$$\begin{cases} \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n u) = 0, \\ \frac{\partial (nu)}{\partial t} + \nabla \cdot (n u \otimes u + P) = \int_V (v - u) \mathcal{T}_1(c, F_{n,u}) dv, \end{cases} \quad (4.10)$$

où le tenseur de pression est donné par

$$P(t, x) = \int_V (v - u(t, x)) \otimes (v - u(t, x)) F_{n(t,x),u(t,x)} dv \quad (4.11)$$

et l'évolution de c est toujours décrite par (4.2). Dans la littérature, l'opérateur de changement d'orientation des cellules est habituellement choisi linéaire par rapport à f . Nous considérons d'abord ce cas. Le système (4.10) est alors aussi linéaire par rapport à (n, nu) dès lors que nous supposons que c est donnée. En particulier, un choix judicieux des opérateurs de changement d'orientation \mathcal{T}_0 et \mathcal{T}_1 nous permet de retrouver le système de Cattaneo, qui a été extrêmement étudié récemment dans le cadre du chimiotactisme (voir par exemple [50, 93]).

Nous obtenons aussi un modèle macroscopique non linéaire, plus réaliste, en considérant simplement un opérateur de relaxation pour \mathcal{T}_0 et par exemple, lorsque seules les quantités macroscopiques calculées à partir de la fonction de distribution f interviennent dans la description de \mathcal{T}_1 , un choix possible est

$$\mathcal{T}_1(c, f) = \int_V K_1(v - u, v' - u, n, c) \cdot \nabla c f' dv'.$$

Alors, en ne retenant que les termes d'ordre un dans le développement par rapport à ε , nous aboutissons au système ci-dessous déjà proposé par A. Gamba *et al.* dans [146, 77]

$$\begin{cases} \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n u) = 0, \\ \frac{\partial(nu)}{\partial t} + \nabla \cdot (n u \otimes u + n p) = n \chi'(c) \nabla c - \sigma n u, \end{cases} \quad (4.12)$$

toujours couplé avec (4.2) pour le calcul de c . Le modèle considéré dans [146, 77] est en fait (4.12) avec $p = Id$. Ce modèle a été utilisé pour l'étude de la vasculogénèse (les premières étapes de la formation de vaisseaux sanguins)¹.

4.2.2 Modèles paraboliques et hyperboliques

Dans cette partie, nous détaillons plus précisément les différences entre les systèmes hyperboliques comme celui donné par (4.12), (4.2) et les systèmes paraboliques comme celui de PKS (4.1), (4.2). Les deux modèles génèrent des formes singulières qui ont tendance à exploser en temps fini. Il y a cependant une étonnante différence entre les modèles dans le régime transitoire avant que l'explosion ne se produise. En effet, pour le modèle de PKS (4.1), (4.2), la densité des cellules se concentre de plus en plus autour de points isolés aboutissant finalement à l'explosion. L'explosion en temps fini a aussi été prouvée dans [117] pour le système hyperbolique (4.12) dans le cas de solutions à symétrie sphérique. Cependant, des structures du type de chocs apparaissent avant l'explosion formant une sorte de réseau, la densité des cellules se concentre alors à proximité des bords de ce réseau. Ce phénomène se retrouve en effet dans les résultats des simulations numériques et semble compatible avec les résultats des expériences sur les cellules endothéliales. Nous concluons cette partie en faisant quelques remarques sur les liens entre les modèles hyperboliques (4.12), (4.2) et le système de PKS (4.1), (4.2). Nous notons d'abord que lorsque $p = Id$, les solutions stationnaires de (4.12) pour un flux de population nul ($n u = 0$) ont les mêmes états stationnaires que ceux du système de PKS. En effet, ces solutions satisfont

$$n \chi'(c) \nabla c - \nabla n = 0.$$

Finalement, un autre changement d'échelle en temps et en espace sur le modèle hyperbolique conduit formellement au système parabolique (4.1), (4.2) - voir [116].

4.2.3 Discrétisation des systèmes hyperboliques [71]

Dans cette partie, nous construisons des schémas numériques pour le système hyperbolique (4.12). La principale difficulté de ce problème est de trouver une discrétisation adéquate du terme source évitant des oscillations numériques lorsque celui-ci devient trop singulier.

¹Ce modèle a été également utilisé pour décrire l'émergence de galaxies sous forme de réseaux.

Dans la suite, nous notons par U l'inconnue, et par $F(U)$ la fonction du flot et par $S(U)$ le terme source, ce qui donne pour le système non linéaire (4.12)

$$U = \begin{pmatrix} n \\ nu \end{pmatrix}, \quad F(U) = \begin{pmatrix} nu \\ nu^2 + n \end{pmatrix}, \quad S(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ n \chi'(c) \frac{\partial c}{\partial x} - \sigma nu \end{pmatrix}.$$

Nous introduisons ensuite $(x_{i-1/2})_{i \in \mathbb{Z}}$ un maillage de \mathbb{R} et $x_i = (x_{i-1/2} + x_{i+1/2})/2$. Les schémas volumes finis pour les systèmes hyperboliques utilisent habituellement un décentrage amont des flux et la version semi-discrète de (4.12) s'écrit alors sous la forme

$$\Delta x_i \frac{d}{dt} U_i(t) + F_{i+1/2} - F_{i-1/2} = \Delta x_i S_i \quad (4.13)$$

où Δx_i désigne le pas d'espace $x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$, et l'inconnue discrétisée $U_i(t)$ est donnée par

$$U_i(t) = \begin{pmatrix} n_i(t) \\ n_i(t) u_i(t) \end{pmatrix},$$

ce qui représente une approximation de la moyenne de U sur l'intervalle $(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$. De plus, $F_{i+1/2}$ est une approximation du flot au point $x_{i+1/2}$ et S_i est une approximation de la moyenne du terme source $S(U)$ sur l'intervalle $(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$.

Pour un schéma d'ordre un, le flux est habituellement calculé par

$$F_{i+1/2} = \mathcal{F}(U_i(t), U_{i+1}(t)), \quad (4.14)$$

où le flux numérique $\mathcal{F}(U_i, U_{i+1})$ est fourni via la résolution approchée d'un problème de Riemann. Nous supposons que le flux numérique \mathcal{F} satisfait les hypothèses suivantes :

1. le flux numérique est consistant avec la fonction de flux, dans le sens où

$$\mathcal{F}(U, U) = F(U). \quad (4.15)$$

2. Le flux est tel qu'il préserve la positivité de la densité $n_i(t)$ pour le problème homogène, c'est-à-dire (4.12) sans aucun terme source. Autrement dit,

$$\Delta x_i \frac{d}{dt} U_i(t) + F_{i+1/2} - F_{i-1/2} = 0 \quad (4.16)$$

où le flux numérique $F_{i+1/2}$ est défini par (4.14) et implique que $n_i(t) \geq 0$ dès lors que $n_i(0) \geq 0$.

3. Le schéma (4.16) défini par le flux $F_{i+1/2}$ donné par (4.14) vérifie une inégalité d'entropie pour la paire d'entropie du problème homogène

$$\eta_h(n, nu) = n(\log n - 1) + \frac{1}{2} n u^2, \quad G_h(n, nu) = nu(\log n + \frac{1}{2} u^2). \quad (4.17)$$

D'après [14], ceci signifie que nous pouvons trouver un flux d'entropie numérique \mathcal{G}_h tel que

$$\begin{aligned} G_h(U_{i+1}) + \nabla_U \eta_h(U_{i+1}) (\mathcal{F}(U_i, U_{i+1}) - F(U_{i+1})) \\ \leq \mathcal{G}_h(U_i, U_{i+1}) \leq G_h(U_i) + \nabla_U \eta_h(U_i) (\mathcal{F}(U_i, U_{i+1}) - F(U_i)), \end{aligned} \quad (4.18)$$

où $\nabla_U \eta_h$ est la dérivée de η_h par rapport à U .

Le discrétisation d'un système hyperbolique avec un terme source est souvent délicate [82, 84]. Par exemple, une discrétisation du terme source par un schéma centré d'un système hyperbolique non conservatif ne préserve en général pas les solutions stationnaires du problème et peut surtout générer des oscillations numériques. Nous utilisons alors des schémas équilibrés qui permettent d'introduire un décentrage dans le terme source et donne ainsi de meilleures propriétés de stabilité. Dans notre cas, il existe un état stationnaire qui joue un rôle particulier dans la modélisation du chimiotactisme, il s'écrit

$$\log(n_i) - \chi(c_i) = \text{const.}, \quad u_i = 0, \quad \forall i. \quad (4.19)$$

Il se trouve que cet état stationnaire correspond aussi à l'état stationnaire de l'équation parabolique (4.1), et décrit le comportement en temps grand des cellules sous l'influence d'un chimio-attractant c , lorsque les solutions n'explorent pas. Ainsi, nous souhaiterions préserver de manière exacte cette solution stationnaire au niveau discret.

Notre approche suit les travaux présentés dans [7] pour l'équation de Saint-Venant et se généralise à n'importe quel ordre pour les schémas différences finies. Nous proposons un schéma volumes finis pour le système (4.13) avec la fonction flux

$$F_{i+1/2} = \mathcal{F}(U_{i+1/2}^-, U_{i+1/2}^+), \quad U_{i+1/2}^\pm = \begin{pmatrix} n_{i+1/2}^\pm \\ n_{i+1/2}^\pm u_{i+1/2}^\pm \end{pmatrix}, \quad (4.20)$$

où les valeurs à l'interface $U_{i+1/2}^-$ et $U_{i+1/2}^+$ sont reconstruites localement à partir de U_i et U_{i+1} . L'objectif de cette première reconstruction n'est pas d'augmenter l'ordre de précision de la méthode, mais plutôt de construire un schéma préservant la solution d'équilibre (4.19). Le terme source est ainsi discrétisé par

$$S_i = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\Delta x_i} (n_{i+1/2}^- - n_{i-1/2}^+) \end{pmatrix} - \sigma \begin{pmatrix} 0 \\ n_i u_i \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

Cet *Ansatz* est motivé par la volonté de préserver l'équilibre. En effet, lorsque le flux de population $n u$ est nul, la densité de cellules n vérifie l'équilibre du flux et du terme source c'est-à-dire

$$\frac{\partial n}{\partial x} = n \chi'(c) \frac{\partial c}{\partial x}.$$

En intégrant sur l'intervalle $(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$, nous obtenons une approximation du terme source

$$\frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} n \chi'(c) \frac{\partial c}{\partial x} dx = \frac{1}{\Delta x_i} (n_{i+1/2}^- - n_{i-1/2}^+).$$

Par conséquent, lorsque la vitesse u est suffisamment petite, nous pouvons représenter localement l'intégrale du terme source par le gradient discret du flux. Ceci motive la discrétisation du terme source (4.21). Nous montrons que cette discrétisation est bien consistante avec le terme source (4.12) lorsque la solution est loin de l'état d'équilibre. Nous prouvons aussi que l'état stationnaire (4.19) est exactement préservé dès que la relation suivante est satisfaite

$$n_{i+1/2}^- = n_{i+1/2}^+, \quad u_{i+1/2}^- = u_{i+1/2}^+ = 0. \quad (4.22)$$

Ainsi, pour que cette condition se réalise, nous choisissons

$$n_{i+1/2}^- = n_i e^{\chi_{i+1/2} - \chi(c_i)}, \quad u_{i+1/2}^- = u_i, \quad (4.23)$$

et

$$n_{i+1/2}^+ = n_{i+1} e^{\chi_{i+1/2} - \chi(c_{i+1})}, \quad u_{i+1/2}^+ = u_{i+1}, \quad (4.24)$$

ce qui implique que la relation (4.22) est bien satisfaite pour un choix arbitraire de $\chi_{i+1/2}$ lorsque l'état d'équilibre (4.19) est atteint. L'évaluation de la valeur à l'interface $\chi_{i+1/2}$ doit alors être telle que le schéma est consistant et stable. Nous avons choisi par exemple

$$\chi_{i+1/2} = \max(\chi(c_i), \chi(c_{i+1})). \quad (4.25)$$

Finalement, une approximation de la concentration chimique c est obtenue en discrétisant (4.2) à l'aide d'un schéma volumes finis

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{D_c}{\Delta x_i} \left(\frac{c_{i+1} - c_i}{\Delta x_{i+1/2}} - \frac{c_i - c_{i-1}}{\Delta x_{i-1/2}} \right) + n_i - c_i, \quad (4.26)$$

où $\Delta x_{i+1/2} = x_{i+1} - x_i$.

Nous montrons alors les résultats suivants pour le schéma (4.13)-(4.26) proposé ci-dessus.

Théorème 4.1 *Le schéma semi-discret (4.13) défini par (4.20), (4.21), (4.23) et (4.24)*

- (i) *préserve la positivité de la densité de cellules $n_i(t)$*
- (ii) *préserve exactement les états stationnaires de la forme (4.19)*
- (iii) *est consistant avec le système (4.12)*
- (iv) *vérifie une inégalité d'entropie discrète associée à la paire d'entropie*

$$\eta(t, x) = \eta_h(n, nu) - nc + \frac{1}{2} \left(c^2 + \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)^2 \right), \quad (4.27)$$

$$G(t, x) = G_h(n, nu) - nuc - \frac{\partial c}{\partial t} \frac{\partial c}{\partial x}.$$

où (η_h, G_h) correspond à la paire d'entropie pour le problème homogène sans terme source (4.17) et lorsque $\chi(c_i) = c_i$ et c_i est donné par le schéma (4.26)

$$\Delta x_i \frac{\partial \eta_i}{\partial t} + G_{i+1/2} - G_{i-1/2} \leq 0,$$

avec

$$\eta_i = n_i \left(\log(n_i) - 1 + \frac{u_i^2}{2} - c_i \right) + \frac{1}{2} \left(c_i^2 + \frac{1}{\Delta x_i} \frac{(c_{i+1} - c_i)^2}{\Delta x_{i+1/2}} \right)$$

et le flux d'entropie discret $G_{i+1/2}$ est consistant avec la définition de G .

En utilisant une approche similaire, nous mettons au point une extension de ce schéma à l'ordre deux. En fait, nous reconstruisons d'abord les valeurs à l'interface à droite et à gauche à l'ordre deux, classiquement obtenues en trois étapes : une étape de reconstruction des gradients discrets, une extrapolation linéaire et enfin une procédure de limitation pour maintenir la positivité de la reconstruction. Ainsi, nous obtenons deux valeurs à l'interface $x_{i+1/2}$, en suivant les trois étapes mentionnées précédemment, chacune étant d'ordre deux $U_{i,r}$ et $U_{i+1,l}$ à partir d'une reconstruction linéaire sur les intervalles $(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$ et $(x_{i+1/2}, x_{i+3/2})$. Ensuite, en utilisant le même algorithme que pour le schéma d'ordre un, nous calculons deux valeurs à l'interface pour le chimio-attractant $e^{\chi(c)}$ au point $x_{i+1/2}$, que nous notons par $(e^{\chi(c)})_{i,r}$ et $(e^{\chi(c)})_{i+1,l}$. Une fois ces deux reconstructions d'ordre deux connues, nous appliquons une nouvelle reconstruction comme dans la section précédente dans le but d'établir un schéma préservant l'équilibre.

4.3 Simulations numériques

Nous réalisons des simulations numériques du modèle hyperbolique (4.12), (4.2) en dimension deux d'espace dans un domaine carré de longueur $L = 0.2 \text{ cm}$ avec pour simplifier des conditions aux limites périodiques [146, 77]. Pour cela, nous avons mis en œuvre le schéma numérique présenté dans la section précédente. La donnée initiale $n(0)$ est choisie en distribuant de manière aléatoire des concentrations de cellules avec une vitesse moyenne nulle $(nu)(0) = 0$ et sans concentration chimique initiale $c(0) = 0$. Nous présentons plusieurs résultats numériques en augmentant la densité totale de cellules. Nous stoppons la simulation lorsque un état stationnaire est atteint ou lorsque nous constatons qu'un réseau de cellules est formé.

Sur la Figure 4.1, la densité totale de cellules vaut seulement 50 cellules/mm². Alors, les cellules deviennent de plus en plus proches, mais la densité totale n'est pas assez élevée pour faire apparaître des réseaux liés les uns aux autres. Sur les Figures 4.2 et 4.3, la densité totale est augmentée à 100 cellules/mm² puis à 400 cellules/mm². Nous observons alors la formation de régions avec de fortes concentrations de cellules, mais maintenant ces régions sont liées par des cordes représentant des concentrations plus faibles de cellules. Ces résultats reproduisent étonnamment les expériences présentées dans [146, 77] sur l'étude du mouvement et de l'organisation de cellules endothéliales humaines.

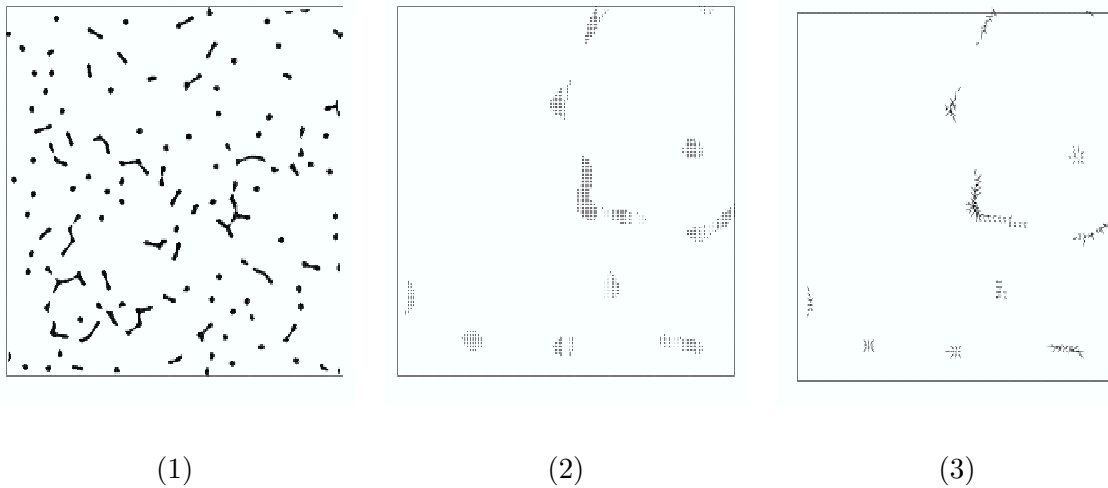


FIG. 4.1 – Formation de réseaux : (1) la densité n et un zoom sur le côté en bas à gauche de (2) la densité n et du (3) champs de vitesse u obtenus pour 50 cellules/mm².

4.4 Conclusion et perspectives

Dans ce travail, nous avons proposé une approche unifiée, fondée sur le développement de Chapman-Enskog, permettant de relier les différents modèles cinétiques et hyperboliques pour l'étude du chimiotactisme. En utilisant un changement d'échelle approprié sur l'équation cinétique, nous obtenons des modèles macroscopiques pour la densité de cellules et le flux de population. Contrairement aux méthodes de moments, notre approche garantit (au moins formellement) que la solution du modèle macroscopique (4.10) est bien une approximation d'ordre un (par rapport au paramètre de changement d'échelle ε) de la densité de cellules et du flux de population de la solution de l'équation cinétique (4.4). De plus, cette méthode fournit des formules explicites pour le flux $nu \otimes u + P$ associé au

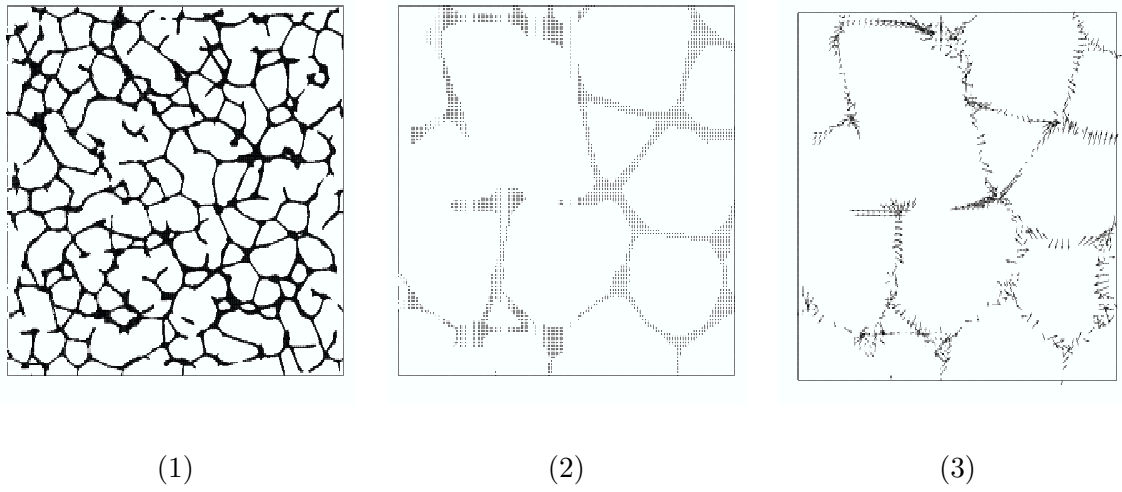


FIG. 4.2 – Formation de réseaux : (1) la densité n et un zoom sur le côté en bas à gauche de (2) la densité n et du (3) champs de vitesse u obtenus pour 100 cellules/mm².

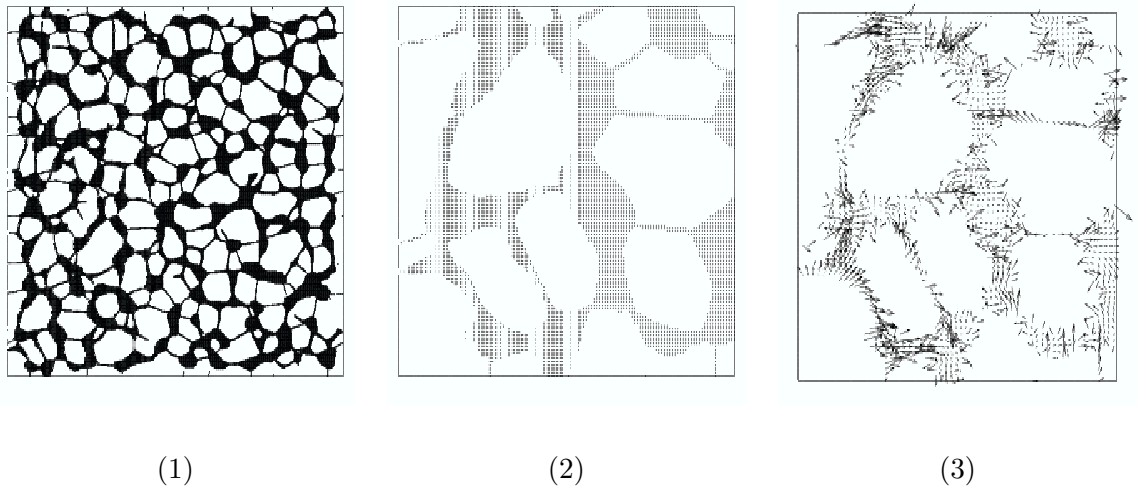


FIG. 4.3 – Formation de réseaux : (1) la densité n et un zoom sur le côté en bas à gauche de (2) la densité n et du (3) champs de vitesse u obtenus pour 400 cellules/mm².

flux de population nu et de la sensibilité chimiotactique χ en fonction de l'opérateur de changement d'orientation des cellules \mathcal{T} , ce qui n'est pas le cas des méthodes empiriques proposées dans [146].

D'un point de vue mathématique, la preuve rigoureuse de la convergence de la solution de l'équation cinétique non linéaire vers la solution du système hyperbolique lorsque ε converge vers zéro, est certainement un problème intéressant, mais ce type de problème se pose pour de nombreuses équations cinétiques en dynamique des gaz et reste très difficile [137]. Une première étape dans cette direction serait de prouver l'existence de solutions pour le système hyperbolique.

D'autre part, nous avons développé et implémenté des schémas numériques pour la discrétisation des systèmes hyperboliques pour l'étude du chimiotactisme. Une approximation d'ordre élevé a été implémentée dans [71] et d'autres simulations numériques ont été réalisées d'abord pour valider les méthodes d'ordre élevé, puis pour traiter des applications plus concrètes.

Une autre direction de recherche concerne la simulation numérique du modèle de PKS en utilisant des schémas volumes finis pour l'étude de l'explosion de la solution [120]. Ce type de méthode semble bien adapté à ces problèmes où la solution peut devenir singulière et il est souvent possible de démontrer la convergence de ces schémas même pour des solutions peu régulières. Ainsi, nous proposons et étudions les propriétés d'un schéma volumes finis pour le système (4.1), (4.3) couplant la densité de cellules n et la substance chimique c .

Nous considérons un maillage régulier \mathcal{M} d'un domaine Ω constitué de volumes de contrôle $K \in \mathcal{M}$ et notons par \mathcal{N}_K l'ensemble des voisins de K , $\sigma_{K,L} = \bar{K} \cap \bar{L}$ pour tout $L \in \mathcal{N}_K$. De plus, $(x_K)_{K \in \mathcal{M}}$ est tel que $x_K \in K$ et la droite (x_K, x_L) est orthogonale à l'arête $K|L$. Nous définissons aussi

$$\tau_{K,L} = \frac{m(\sigma_{K,L})}{d(x_K, x_L)}, \text{ si } K, L \in \mathcal{M},$$

où $m(\sigma)$ représente la mesure de σ et $d(x_K, x_L)$ est la distance euclidienne entre les points x_K et x_L . Aussi, nous introduisons le pas de temps Δt et $t^k = k \Delta t$ et notons par $\delta = \max(\Delta t, h)$, où h est le diamètre maximal des volumes de contrôle. Le schéma volumes finis pour l'équation de dérive-diffusion (4.1) est défini par (pour une motilité $D_m = 1$)

$$\begin{aligned} m(K) \frac{n_K^{k+1} - n_K^k}{\Delta t} - \sum_{L \in \mathcal{N}_K} \tau_{K,L} [n_L^{k+1} - n_K^{k+1}] \\ + \chi \sum_{L \in \mathcal{N}_K} \tau_{K,L} \left[(Dc_{K,L}^{k+1})^+ n_K^{k+1} - (Dc_{K,L}^{k+1})^- n_L^{k+1} \right] = 0 \end{aligned} \quad (4.28)$$

et pour l'équation de Poisson (4.3)

$$- \sum_{L \in \mathcal{N}_K} \tau_{K,L} Dc_{K,L}^{k+1} = m(K) (n_K^{k+1} - c_K^{k+1}), \quad (4.29)$$

pour tout $K \in \mathcal{M}$ et $0 \leq k \leq M_T = [T/\Delta t]$, où $v^+ = \max(v, 0)$, $v^- = \max(-v, 0)$ et $Dc_{K,L}^k = (c_L^k - c_K^k)$.

Pour ce schéma (4.28)-(4.29), nous pouvons facilement établir un théorème d'existence et d'unicité d'une solution numérique $(n_K^k, c_K^k)_{K,k}$, mais la principale difficulté va consister en l'obtention d'estimations *a priori* nécessaires pour la convergence du schéma.

Nous indiquons ici les principaux arguments conduisant à la preuve de convergence vers la solution de (4.1), (4.3). Nous partons du schéma pour la densité (4.28) et arrivons plus ou moins directement après multiplication par n_K^{k+1} , à l'estimation

$$\sum_{K \in \mathcal{M}} m(K) \frac{|n_K^{k+1}|^2 - |n_K^k|^2}{2 \Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma |Dn_\sigma^{k+1}|^2 \leq \chi \sum_{K \in \mathcal{M}} m(K) |n_K^{k+1}|^3, \quad (4.30)$$

où \mathcal{E} représente l'ensemble des arêtes du maillage.

Dans le but d'estimer la norme L^3 de n , nous utilisons une interpolation et une version discrète de l'inégalité fonctionnelle de Gagliardo-Nirenberg-Sobolev (voir [75])

$$\sum_{K \in \mathcal{M}} m(K) |n_K^{k+1}|^3 \leq \frac{9 C_\Omega}{2 \xi} \|n\|_{L^1} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma |Dn_\sigma^{k+1}|^2,$$

où ξ est une constante liée au maillage (voir [75] pour plus de précision). En insérant cette dernière inégalité dans le terme de droite de (4.30), nous trouvons

$$\sum_{K \in \mathcal{M}} m(K) \frac{|n_K^{k+1}|^2 - |n_K^k|^2}{2 \Delta t} \leq -\left(1 - \frac{9 C_\Omega \chi \|n_0\|_{L^1}}{2 \xi}\right) \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma |Dn_\sigma^{k+1}|^2,$$

ce qui signifie que lorsque la masse initiale $\|n_0\|_{L^1}$ est suffisamment petite, alors la norme L^2 de la densité de cellules n décroît au cours du temps $t \geq 0$. Cette estimation permet alors d'obtenir les autres estimations plus classiques sur n et c . La preuve de convergence est la conséquence des travaux d'Eymard, Gallouet et Herbin [57].

Bibliographie

- [1] R. Abgrall, On essentially non-oscillatory schemes on unstructured meshes : analysis and implementation, *J. Comput. Phys.* **114** (1994), 45–58.
- [2] R. Abgrall, An essentially non-oscillatory reconstruction procedure on finite-element type meshes : application to compressible flows, *ICOSAHOM'92 (Montpellier, 1992). Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **116** (1994), 95–101.
- [3] R. Abgrall et A. Harten, Multiresolution representation in unstructured meshes, *SIAM J. Num. Anal.* **35** (1998), 2128–2146.
- [4] R. Abgrall, Toward the ultimate conservative scheme : following the quest, *J. Comput. Phys.* **167** (2001), 277–315.
- [5] W. Alt, Biased random walk models for chemotaxis and related diffusion approximations, *J. Math. Biol.* **9** (1980), 147–177.
- [6] A. A. Arsen'ev, Global existence of a weak solution of Vlasov's system of equations, *Zh. vychisl. Mat. i. Mat. Fiz.* **15** (1975), 136–147.
- [7] E. Audusse, F. Bouchut, M.-O. Bristeau, R. Klein et B. Perthame, A fast and stable well-balanced scheme with hydrostatic reconstruction for shallow water flows, *SIAM J. Sci. Comput.* **6** (2004), 2050–2065.
- [8] H. Babovsky, On a simulation scheme for the Boltzmann equation, *Math. Methods Appl. Sci.* **8** (1986), 223–233.
- [9] T. A. Bak et O. Heilmann, A finite version of Smoluchowski's coagulation equation, *J. Phys. A*, **24** (1991), 4889–4893.
- [10] C. Bardos et P. Degond, Global existence for the Vlasov-Poisson equation in 3 space variables with small initial data, *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire* **2** (1985), 101–118.
- [11] G. A. Bird, Molecular gas dynamics, *Clarendon Press, Oxford* (1994).
- [12] A. V. Bobylev et S. Rjasanow, Difference scheme for the Boltzmann equation based on the fast Fourier transform, *European J. Mech. B Fluids* **16** (1997), 293–306.
- [13] A. V. Bobylev et S. Rjasanow, Fast deterministic method of solving the Boltzmann equation for hard spheres, *European J. Mech. B Fluids* **18** (1999), 869–887.
- [14] F. Bouchut, Nonlinear Stability of Finite Volume Methods for Hyperbolic Conservation Laws and Well-Balanced Schemes for Sources, *Birkhäuser* (2004).
- [15] F. Bouchut, F. Golse et M. Pulvirenti, Kinetic equations and asymptotic theory, *Gauthier-Villars, series in Applied Mathematics* (2000).
- [16] F. Bouchut, F. Golse et C. Pallard, Classical solutions and the Glassey-Strauss theorem for the 3D Vlasov-Maxwell system, *Arch. Ration. Mech. Anal.* **170** (2003), 1–15.
- [17] J. P. Boris et D. L. Book, Flux-corrected transport. I : SHASTA, a fluid transport algorithm that works, *J. Comput. Phys.* **11** (1973), 38–69.
- [18] J. P. Boris et D. L. Book, Solution of continuity equations by the method of flux-corrected transport, *J. Comput. Phys.* **20** (1976), 397–431.
- [19] Y. Brenier et E. Grenier, Limite singulière du système de Vlasov-Poisson dans le régime de quasi neutralité : le cas indépendant du temps, *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.* **318** (1994), 121–124.
- [20] Y. Brenier, Quelques lois de conservations issues de modèles cinétiques. *Journées "Equations aux Dérivées Partielles" (Saint-Jean-de-Monts, 1995), Exp. No. I, 13, École Polytech., Palaiseau* (1995).
- [21] Y. Brenier, Équations de moment et conditions d'entropie pour des modèles cinétiques. *Séminaire sur les équations aux Dérivées Partielles, 1994–1995, Exp. XXII.*

- [22] Y. Brenier et L. Corrias, A kinetic formulation for multi-branch entropy solutions of scalar conservation laws, *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire* **15** (1998), 169–190.
- [23] Y. Brenier, Convergence of the Vlasov-Poisson system to the incompressible Euler equations, *Comm. Part. Diff. Equations* **25** (2000), 737–754.
- [24] M. Brunetti, V. Grandgirard, O. Sauter, J. Vaclavik et H. Villard, Nonlinear global simulations of electrostatic drift-kinetic ITG modes using a semi-Lagrangian code, *10th european fusion theory conference, 2003*
- [25] C. Buet, A discrete velocity scheme for the Boltzmann operator of rarefied gas dynamics, *Transp. Theo. Stat. Phys.* **25** (1996), 33–60.
- [26] C. Buet, S. Cordier et F. Filbet, Comparison of Numerical schemes for Fokker-Planck-Landau equation, *ESAIM Proc. Soc. Math. Appl. Indust.* **10** (1999), 161-181.
- [27] C. Canuto, M. Y. Hussaini, A. Quarteroni et T. A. Zang, Spectral methods in fluid dynamics, *Springer Series in Computational Physics, Springer-Verlag, New York*, (1988).
- [28] T. Carleman, Sur la théorie de l'équation intégrodifférentielle de Boltzmann, *Acta Math.* **60** (1932).
- [29] C. Cercignani, The Boltzmann equation and its applications, *Springer-Verlag, Berlin* (1988).
- [30] C. Cercignani, R. Illner et M. Pulvirenti, The Mathematical Theory of Dilute Gases, *Appl. Math. Sci.* **106**, Springer-Verlag, New York, (1994).
- [31] C. Chainais-Hillairet, J.-G. Liu et Y.-J. Peng, Finite volume scheme for multi-dimensional drift-diffusion equations and convergence analysis, *ESAIM Math. Model. Numer. Anal.* **37** (2003), 319–338.
- [32] F. A. C. C. Chalub, P. Markovich, B. Perthame et C. Schmeiser, Kinetic models for chemotaxis and their drift-diffusion limits, *Monatsh. Math.* **142** (2004), 123–141.
- [33] N. Crouseilles et F. Filbet, Numerical approximation of collisional plasmas by high order methods, *J. Comput. Phys.* **201** (2004), 546–572.
- [34] R. C. Davidson et H. Qin, Physics of charged particle beams in high energy accelerators, *Imperial College Press, World Scientific, Singapore* (2001).
- [35] P. Degond, Local existence of solutions of the Vlasov-Maxwell equations and convergence to the Vlasov-Poisson equations for infinite light velocity, *Math. Methods Appl. Sci.* **8** (1986), 533–558.
- [36] P. Degond et P.-A. Raviart, An asymptotic analysis of the Vlasov-Poisson system : the Child-Langmuir law, *Asymptotic Anal.* **4** (1991), 187–214.
- [37] P. Degond et P.-A. Raviart, On the paraxial approximation of the stationary Vlasov-Maxwell system, *Math. Models Meth. Appl. Sci.* **3** (1993), 513–562.
- [38] P. Degond, L. Pareschi et G. Russo, Modeling and Computational Methods for Kinetic Equations, *Series : Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology, Birkhäuser* (2004).
- [39] B. Després et F. Lagoutière, Contact discontinuity capturing schemes for linear advection and compressible gas dynamics, *J. Sci. Comput.* **16** (2001), 479–524.
- [40] L. Desvillettes, Convergence to equilibrium in large time for Boltzmann and BGK equations, *Arch. Ration. Mech. Anal.* **110** (1990), 73–91.
- [41] L. Desvillettes, Convergence to equilibrium in various situations for the solution of the Boltzmann equation, *Nonlinear kinetic theory and mathematical aspects of hyperbolic systems (Rapallo)* (1992), 101–114.
- [42] L. Desvillettes, On the convergence of splitting algorithms for some kinetic equations, *Asymptotic Anal.* **6** (1993), 315–333.
- [43] L. Desvillettes et S. Mischler, About the splitting algorithm for Boltzmann and B.G.K. equations, *Math. Models Methods Appl. Sci.* **6** (1996), 1079–1101.
- [44] L. Desvillettes et C. Villani, On the spatially homogeneous Landau equation for hard potentials. II. *H*-theorem and applications, *Comm. Part. Diff. Equations* **25** (2000), 261–298.
- [45] L. Desvillettes et C. Villani, On the trend to global equilibrium in spatially inhomogeneous entropy-dissipating systems : the linear Fokker-Planck equation, *Comm. Pure Appl. Math.* **54** (2001), 1–42.
- [46] L. Desvillettes et C. Villani, On the trend to global equilibrium for spatially inhomogeneous kinetic systems : the Boltzmann equation, *Invent. Math.* **59** (2005), 245–316.
- [47] R. J. DiPerna et P.-L. Lions, Solutions globales d'équations du type Vlasov-Poisson, *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.* **307** (1988), 306–329.

- [48] R. J. DiPerna et P.-L. Lions, Global existence of weak solution for the Vlasov-Maxwell system, *Comm. Pure Appl. Math.* **42** (1989), 729–757.
- [49] P. G. J. van Dongen et M. H. Ernst, Cluster size distribution in irreversible aggregation at large times, *J. Phys. A* **18** (1985), 2779–2793.
- [50] Y. Dolak et T. Hillen, Cattaneo models for chemotaxis, numerical solution and pattern formation, *J. Math. Biol.* **46** (2003), 461–478.
- [51] Y. Dolak et C. Schmeiser, Kinetic models for chemotaxis : Hydrodynamic limits and the back-of-the-wave problem, *ANUM preprint*.
- [52] P. B. Dubovski et I. W. Stewart, Existence, uniqueness and mass conservation for the coagulation-fragmentation equation, *Math. Methods Appl. Sci.* **19** (1996), 571–591.
- [53] A. Eibeck et W. Wagner, Stochastic particle approximations for Smoluchowski’s coagulation equation, *Ann. Appl. Probab.* **11** (2001), 1137–1165.
- [54] R. S. Ellis et M. A. Pinsky, The first and second fluid approximations to the linearized Boltzmann equation, *J. Math. Pures et Appl.* **54** (1975), 125–156.
- [55] M. Escobedo, S. Mischler et B. Perthame, Gelation in coagulation and fragmentation models, *Comm. Math. Phys.* **231** (2002), 157–188.
- [56] M. Escobedo, Ph. Laurençot, S. Mischler et B. Perthame, Gelation and mass conservation in coagulation-fragmentation models, *J. Differential Equations* **195** (2003), 143–174.
- [57] R. Eymard, T. Gallouet et R. Herbin, Finite volume methods, *Handbook of Numerical Analysis, Vol. VII, P. G. Ciarlet and J. L. Lions, eds., North-Holland, Amsterdam* (2000) 713–1020.
- [58] F. Filbet, Convergence of a finite volume scheme for the Vlasov-Poisson system, *SIAM J. Num. Anal.* **39** (2001), 1146–1169.
- [59] F. Filbet, E. Sonnendrücker et P. Bertrand, Conservative Numerical schemes for the Vlasov equation, *J. Comput. Phys.* **172** (2001), 166–187.
- [60] F. Filbet, J.-L. Lemaire et E. Sonnendrücker, Direct axisymmetric Vlasov simulations of space charge dominated beams, *Lecture Notes in Comput. Sci., 2331, Springer, Berlin, Computational science—ICCS 2002, Part III (Amsterdam)* (2002), 305–314.
- [61] F. Filbet et L. Pareschi, Numerical method for the accurate solution of the Fokker-Planck-Landau equation in the non homogeneous case, *J. Comput. Phys.* **179** (2002), 1–26.
- [62] F. Filbet et E. Sonnendrücker, Comparison of Eulerian Vlasov Solvers, *Comp. Phys. Communications* **150** (2003), 247–266.
- [63] F. Filbet et G. Russo, High order numerical methods for the space non-homogeneous Boltzmann equation, *J. Comput. Phys.* **186** (2003), 457–480.
- [64] F. Filbet et Ph. Laurençot, Numerical approximation of the Lifshitz Slyozov equation (in self-similar variable), *SIAM J. Num. Anal.* **42** (2003), 563–588.
- [65] F. Filbet et G. Russo, Accurate numerical methods for the Boltzmann equation, *Modeling and Computational Methods for Kinetic Equations. Model Sumil. Sci Eng. Technol. Birkäuser Boston* (2004), 117–145.
- [66] F. Filbet et Ph. Laurençot, Numerical simulation of the Smoluchowski coagulation equation, *SIAM J. Sci. Comput.* **26** (2004), 2004–2028.
- [67] F. Filbet, E. Sonnendrücker, E. Oudet, J.-L. Vay et A. Friedman, Vlasov simulations of beams by a moving grid, *Comp. Phys. Communications* **164** (2004), 390–395.
- [68] F. Filbet et Ph. Laurençot, Mass-conserving solutions and non-conservative approximation to the Smoluchowski coagulation equation, *Archiv der Mathematik* **83** (2004), 558–567.
- [69] F. Filbet, L. Pareschi et G. Toscani, Accurate numerical methods for the collisional motion of (heated) granular flows, *J. Comput. Phys.* **202** (2005), 216–235.
- [70] F. Filbet, Ph. Laurençot et B. Perthame, Derivation of Hyperbolic Models for Chemosensitive Movement, *J. Math. Biology* **50** (2005), 189–207.
- [71] F. Filbet et C.-W. Shu, Approximation of Hyperbolic Models for Chemosensitive Movement, to appear in *SIAM J. Sci. Comput.*
- [72] F. Filbet, Y. Guo et C.-W. Shu, Analysis of the relativistic Vlasov-Maxwell model in an interval, to appear in *Quarterly Applied Math.*

- [73] F. Filbet et E. Sonnendrücker, Modeling and numerical simulation of space charge dominated beams in the paraxial approximation, submitted to *Math. Models Meth. Appl. Sci.*.
- [74] F. Filbet, C. Mouhot et L. Pareschi, Solving the Boltzmann equation in $N \log(N)$ with deterministic methods, submitted to *SIAM J. Sci. Comput.*
- [75] F. Filbet, A Finite Volume Scheme for the Patlak-Keller-Segel Chemotaxis Model, submitted to *Numerische Mathematik*.
- [76] H. Gajewski et K. Zacharias, Global behavior of a reaction diffusion system modelling chemotaxis, *Math. Nachr.* **195** (1998), 77–114.
- [77] A. Gamba, D. Ambrosi, A. Coniglio, A. de Candia, S. Di Talia, E. Giraud, G. Serini, L. Preziosi et F. Bussolino, Percolation, morphogenesis, and Burgers dynamics in blood vessels formation, *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003), 118101.
- [78] R. Glassey et J. Schaeffer, On the “one and one-half dimensional” relativistic Vlasov-Maxwell system, *Math. Methods Appl. Sci.* **13** (1990), 169–179.
- [79] R. Glassey et J. Schaeffer, The “two and one-half dimensional” relativistic Vlasov Maxwell system, *Comm. Math. Phys.* **185** (1997), 257–284.
- [80] R. Glassey et W. Strauss, Large velocities in the relativistic Vlasov-Maxwell equations, *J. Fac. Sci. Univ. Tokyo Sect. IA Math.* **36** (1989), 615–627.
- [81] D. Goldstein, B. Sturtevant et J. E. Broadwell, Investigation of the motion of discrete velocity gases, *Rar. Gas. Dynam., Progress in Astronautics e Aeronautics* **118** AIAA, Washington (1989).
- [82] L. Gosse et A.-Y. LeRoux, A well-balanced scheme designed for inhomogeneous scalar conservations laws, *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.* **323** (1996), 543–546.
- [83] L. Gozalo et R. Abgrall, A new limiter that improves TVD-MUSCL schemes *Godunov methods, Oxford* (1999), 411–417.
- [84] J. M. Greenberg et A.-Y. LeRoux, A well-balanced scheme for the numerical processing of source terms in hyperbolic equations, *SIAM J. Num. Anal.* **33** (1996), 1–16
- [85] C. Greengard et P.-A. Raviart, A boundary-value problem for the stationary Vlasov-Poisson equation : the plane diode, *Comm. Pure Appl. Math.* **43** (1990), 472–507.
- [86] Y. Guo, The Vlasov-Maxwell-Boltzmann system near Maxwellians, *Invent. Math.* **153** (2003), 593–630.
- [87] Y. Guo et R. Strain, Rate of convergence to equilibrium, *Preprint* (2004).
- [88] Y. Guo, C.-W. Shu, et T. Zhou, The dynamic of a plane diode, *SIAM J. Math. Anal.* **35** (2004), 1617–1635.
- [89] A. Harten et S. Osher, Uniformly High-Order Accurate Non-Oscillatory Schemes I, *SIAM J. Num. Anal.* **24** (1987), 279–309.
- [90] E. M. Hendriks, M. H. Ernst et R. M. Ziff, Coagulation equations with gelation, *J. Statist. Phys.* **31** (1983), 519–563.
- [91] M. A. Herrero, E. Medina et J. J. L. Velázquez, Finite-time aggregation into a single point in a reaction-diffusion system, *Nonlinearity* **10** (1997), 1739–1754.
- [92] T. Hillen et H.G. Othmer, The diffusion limit of transport equations derived from velocity jump processes, *SIAM J. Appl. Math.* **61** (2000), 751–775.
- [93] T. Hillen, Transport equations and chemosensitive movement, *Habilitation Thesis, University of Tübingen* (2001).
- [94] D. Horstmann, From 1970 until now : The Keller-Segel model in chemotaxis and its consequences I, *Jahresberichte der DMV* **105** (2003), 103–165.
- [95] D. Horstmann, From 1970 until now : The Keller-Segel model in chemotaxis and its consequences II, *Jahresberichte der DMV* **106** (2004), 51–69.
- [96] H. J. Hwang, Regularity for the Vlasov-Poisson system in a convex domain, *SIAM J. Math. Anal.* **36** (2004), 121–171.
- [97] H. J. Hwang, K. Kang et A. Stevens, Global solutions of nonlinear transport equations for chemosensitive movement, to appear in *SIAM J. Math. Anal.*
- [98] I. Ibragimov et S. Rjasanow, Numerical solution of the Boltzmann equation on the uniform grid, *Computing* **69** (2002), 163–186.

- [99] I. Jeon, Existence of gelling solutions for coagulation-fragmentation equations, *Comm. Math. Phys.* **194** (1998), 541–567.
- [100] G. Jiang et C.-W. Shu, Efficient implementation of weighted ENO schemes, *J. Comput. Phys.* **126** (1996), 202–228.
- [101] S. Jin, Runge-Kutta methods for hyperbolic systems with stiff relaxation terms, *J. Comput. Phys.* **122** (1995), 51–67.
- [102] I. M. Kapchinsky et V. V. Vladimirov, *Proceedings of the 9th international conference on high energy accelerators*. Edited by L. Kowarski (CERN, Geneva) (1959), 274–.
- [103] E. F. Keller et L. A. Segel, Traveling band of chemotactic bacteria : A theoretical analysis, *J. Theor. Biol.* **30** (1971), 235–248.
- [104] D. S. Krivitsky, Numerical solution of the Smoluchowski kinetic equation and asymptotics of the distribution function, *J. Phys. A* **28** (1995), 2025–2039.
- [105] P. M. Lapostolle, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **18** (1971), 1101–1104.
- [106] Ph. Laurençot, On a class of continuous coagulation-fragmentation equations, *J. Differential Equations* **167** (2000), 145–174.
- [107] Ph. Laurençot, The Lifshitz-Slyozov-Wagner equation with conserved total volume, *SIAM J. Math. Anal.* **34** (2002), 257–272.
- [108] Ph. Laurençot et S. Mischler, From the discrete to the continuous coagulation-fragmentation equations, *Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A* **132** (2002), 1219–1248.
- [109] M. H. Lee, On the validity of the coagulation equation and the nature of runaway growth, *Icarus* **143** (2000), 74–86.
- [110] M. H. Lee, A survey of numerical solutions to the coagulation equation, *J. Phys. A* **34** (2001), 10219–10241.
- [111] F. Leyvraz et H. R. Tschudi, Singularities in the kinetics of coagulation processes, *J. Phys. A* **14** (1981), 3389–3405.
- [112] F. Leyvraz et H. R. Tschudi, Critical kinetics near gelation, *J. Phys. A* **15** (1982), 1951–1964.
- [113] F. Leyvraz, Existence and properties of post-gel solutions for the kinetic equations of coagulation, *J. Phys. A* **16** (1983), 2861–2873.
- [114] I. M. Lifshitz et V. V. Slyozov, The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions, *J. Phys. Chem. Solids* **19** (1961), 35–50.
- [115] P.-L. Lions et B. Perthame, Propagation of moments and regularity for the 3-dimensional Vlasov-Poisson system, *Invent. Math.* **105** (1991), 415–430.
- [116] T. P. Liu, Hyperbolic conservation laws with relaxation, *Comm. Math. Phys.* **108** (1987), 153–175.
- [117] T. Makino et B. Perthame, Sur les solutions à symétrie sphérique de l'équation d'Euler-Poisson pour l'évolution d'étoiles gazeuses, *Japan J. Appl. Math.* **7** (1990), 165–170.
- [118] J. Makino, T. Fukushima, Y. Funato et E. Kokubo, On the mass distribution of planetesimals in the early runaway stage, *New Astronomy* **3** (1998), 411–417.
- [119] G. Manfredi et P.-A. Hervieux, Vlasov simulations of ultrafast electron dynamics and transport in thin metal films, *Physical review B* **70** 201402R (2004).
- [120] A. Marrocco, 2D simulation of chemotaxis bacteria aggregation, *ESAIM Math. Model. Numer. Anal.* **37** (2003), 617–630.
- [121] S. Mischler et C. Mouhot, Cooling process for inelastic Boltzmann equations for hard spheres, Part II : Self-similar solutions and tail behavior, *Preprint 2004*
- [122] C. Mouhot, Quantitative lower bounds for the full Boltzmann equation, Part I : Periodic boundary conditions, to appear in *Comm. Part. Diff. Equations*.
- [123] C. Mouhot et L. Pareschi, Fast methods for the Boltzmann collision operator, *C. R. Acad. Sci. Paris Sér I Math.* **339**, (2004).
- [124] C. Mouhot et L. Pareschi, Fast algorithms for computing the Boltzmann collision operator, to appear in *Math. Comp.* (2006).
- [125] K. Nanbu, Direct simulation scheme derived from the Boltzmann equation. I. Monocomponent Gases, *J. Phys. Soc. Japan* **52** (1983), 2042–2049.
- [126] H. Nessyahu et E. Tadmor, Nonoscillatory central differencing for hyperbolic conservation laws, *J. Comput. Phys.* **87** (1990), 408–463.

- [127] B. Niethammer et R. L. Pego, On the initial-value problem in the Lifshitz-Slyozov-Wagner theory of Ostwald ripening, *SIAM J. Math. Anal.* **31** (2000), 467–485.
- [128] B. Niethammer et R. L. Pego, Non-self-similar behavior in the LSW theory of Ostwald ripening, *J. Statist. Phys.* **95** (1999), 867–902.
- [129] H. G. Othmer, S. R. Dunbar et W. Alt, Models of dispersal in biological systems, *J. Math. Biol.* **26** (1988), 263–298.
- [130] H. G. Othmer et T. Hillen, The diffusion limit of transport equations II : chemotaxis equations, *SIAM J. Appl. Math.* **62** (2002), 1222–1250.
- [131] L. Pareschi et B. Perthame, A Fourier spectral method for homogeneous Boltzmann equations, *Transp. Theo. Stat. Phys.* **25** (1996), 369–383.
- [132] L. Pareschi et G. Russo, Numerical solution of the Boltzmann equation. I. Spectrally accurate approximation of the collision operator, *SIAM J. Num. Anal.* **37** (2000), 1217–1245.
- [133] L. Pareschi, G. Russo et G. Toscani, Fast spectral methods for the Fokker-Planck-Landau collision operator, *J. Comput. Phys.* **165** (2000), 216–236.
- [134] L. Pareschi et G. Russo, On the stability of spectral methods for the homogeneous Boltzmann equation, *Transp. Theo. Stat. Phys.* **29** (2000), 431–447.
- [135] L. Pareschi et G. Russo, Time Relaxed Monte Carlo methods for the Boltzmann equation, *SIAM J. Sci. Comp.* **23** (2001), 1253–1273.
- [136] C. S. Patlak, Random walk with persistence and external bias, *Bull. Math. Biol. Biophys.* **15** (1953), 311–338.
- [137] B. Perthame, Kinetic formulation of conservation laws, *Oxford Univ. Press* (2002).
- [138] K. Pfaffelmoser, Global classical solutions of the Vlasov-Poisson system in three dimensions for general initial data, *J. Differential Equations* **95** (1992), 281–303.
- [139] F. Poupaud, Boundary value problems for the stationary Vlasov-Maxwell system, *Forum Math.* **4** (1992), 499–527.
- [140] A. Pulvirenti et B. Wennberg, A Maxwellian lower bound for solutions to the Boltzmann equation, *Comm. Math. Phys.* **183** (1997), 145–160.
- [141] M. Reiser, Theory and design of charged particle beams, *Wiley and sons* (1994).
- [142] F. Rogier et J. Schneider, A direct method for solving the Boltzmann equation, *Transp. Theo. Stat. Phys.* **23** (1994), 313–338.
- [143] F. J. Sacherer, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **18** (1971), 1105–1109.
- [144] J. Schaeffer, Global existence of smooth solutions to the Vlasov-Poisson system in three dimensions, *Comm. Part. Diff. Equations* **16** (1991), 1313–1335.
- [145] H. Schmitz et R. Grauer, Darwin-Vlasov simulations of magnetized plasmas, *preprint 2005*.
- [146] G. Serini, D. Ambrosi, E. Giraudo, A. Gamba, L. Preziosi et F. Bussolino, Modeling the early stages of vascular network assembly, *EMBO Journal* **22** (2003), 1771–1779.
- [147] C.-W. Shu, Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws, *Advanced Numerical Approximation of Nonlinear Hyperbolic Equations*, B. Cockburn, C. Johnson, C.-W. Shu and E. Tadmor (Editor : A. Quarteroni), *Lecture Notes in Mathematics*, Springer **1697** (1998), 325–432.
- [148] M. Smoluchowski, Drei Vorträge über Diffusion, Brownsche Molekularbewegung und Koagulation von Kolloidteilchen, *Physik. Zeitschr.* **17** (1916), 557–599.
- [149] A. Stevens, Derivation of chemotaxis-equations as limit dynamics of moderately interacting stochastic many particle systems, *SIAM J. Appl. Math.* **61** (2000), 183–212.
- [150] S. Ukai, On the existence of global solutions of mixed problem for non-linear Boltzmann equation, *Proc. Japan Acad.* **50** (1974), 179–184.
- [151] C. Villani, A review of mathematical topics in collisional kinetic theory, *Handbook of mathematical fluid dynamics I* North-Holland, Amsterdam (2002), 71–305.
- [152] C. Wagner, Theorie der Alterung von Niederschlägen durch Umlösen (Ostwald-Reifung), *Z. Elektrochem.* **65** (1961), 581–591.