



HAL
open science

Modélisation, analyse numérique et simulations de phénomènes complexes pour des systèmes hyperboliques de lois de conservation avec termes sources raides et en électrocardiologie.

Rodolphe Turpault

► **To cite this version:**

Rodolphe Turpault. Modélisation, analyse numérique et simulations de phénomènes complexes pour des systèmes hyperboliques de lois de conservation avec termes sources raides et en électrocardiologie.. Analyse numérique [math.NA]. Université de Nantes, 2012. tel-01382786

HAL Id: tel-01382786

<https://theses.hal.science/tel-01382786>

Submitted on 17 Oct 2016

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

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

Document de synthèse
pour
l'habilitation à diriger les recherches

Université de Nantes

Mathématiques appliquées

Rodolphe TURPAULT

*Modélisation, analyse numérique et simulations de
phénomènes complexes pour des systèmes hyperboliques de
lois de conservation avec termes sources raides et en
électrocardiologie.*

Soutenue le 22 octobre 2012

Rapporteurs :

Matania BEN ARTZI, Professeur
Yves BOURGAULT, Professeur
Bruno DESPRÉS, Professeur

Université de Jérusalem (Israël)
Université d'Ottawa (Canada)
UPMC (Paris 6)

Jury :

Rémi ABGRALL, Professeur
Christophe BERTHON, Professeur
Yves BOURGAULT, Professeur
Jean-François COULOMBEL, Directeur de Recherche
Pierre DEGOND, Directeur de Recherche
Bruno DESPRÉS, Professeur
Thierry GOUDON (Président), Directeur de Recherche

Université Bordeaux I
Université de Nantes
Université d'Ottawa (Canada)
CNRS (Université de Nantes)
CNRS (Université Paul Sabatier)
UPMC (Paris 6)
INRIA (Sophia-Antipolis)

Table des matières

1	Syst. hyp. avec terme source	9
1.1	Comportement des systèmes étudiés en temps long	10
1.2	Schémas numériques préservant l'asymptotique	12
1.2.1	Schémas préservant l'asymptotique en temps long	12
1.2.2	Schéma préservant l'asymptotique en temps court	20
1.3	Transfert radiatif	22
1.3.1	Modèle M_1 -multigroupe et modèle hybride	26
1.3.2	Couplage fort en hydrodynamique radiative	32
1.3.3	Radiothérapie	34
1.3.4	Rayonnement dans les nuages	36
1.4	Schéma GRP espace-temps	38
2	Électrocardiologie	43
2.1	Présentation	43
2.1.1	Mécanismes cellulaires	44
2.1.2	Les modèles bidomaine et monodomaine	45
2.2	Un schéma DDFV pour l'électrocardiologie	48
2.3	Modélisation du réseau de conduction rapide	54
2.3.1	Modèle monodomaine sur un réseau 1D	54
2.3.2	Les jonctions Purkinje-Muscle (PMJ)	56
2.3.3	Résultats numériques	57
2.4	Modèles pour le calcul d'électrogrammes	59
2.5	Une application médicale	61

Remerciements

En premier lieu, je tiens à remercier chaleureusement Matania Ben Artzi, Yves Bourgault et Bruno Desprès d'avoir accepté d'être mes rapporteurs pour ce mémoire. Le tâche n'était pas aisée en raison de la présence de deux thèmes très différents et j'apprécie donc encore davantage la justesse de leurs commentaires.

Je remercie également Rémi Abgrall, Christophe Berthon, Jean-François Coulombel, Pierre Degond et Thierry Goudon d'avoir accepté de faire partie de mon jury.

Bien entendu, j'adresse un remerciement tout particulier à Pierre Charrier et Bruno Dubroca qui m'ont aidé à faire mes premiers pas dans le monde de la recherche avec un sujet passionnant qui m'occupe encore aujourd'hui.

Il est également important pour moi de souligner la bonne ambiance qui règne au sein du département de mathématiques et du Laboratoire de Mathématiques Jean Leray. Un bon état d'esprit, mais également un soutien qui ont grandement facilité mon travail au cours de ces années.

Je remercie en particulier François Jauberteau pour son accueil chaleureux lors de mon arrivée à Nantes, sa disponibilité et sa bonne humeur.

Un grand merci à Yves Coudière pour tout le travail partagé depuis des années sur l'électrocardiologie, qu'il m'a faite découvrir, mais aussi pour son accueil en 2004.

Je ne peux que remercier une seconde fois Christophe Berthon pour toutes les collaborations de ces dernières années. Son dynamisme a été un indiscutable atout pour tous les numériciens nantais depuis son arrivée.

La quasi-totalité de mes travaux ayant été réalisée avec des collaborateurs, je les remercie tous beaucoup pour toutes les qualités dont ils ont su faire preuve. La première d'entre elles étant d'avoir eu la patience de travailler avec moi ! Parmi eux, j'adresse un remerciement soutenu à Martin Frank, Stéphane Clain et Axel Klar qui m'ont invité à faire des recherches en Allemagne et au Portugal. J'ai également beaucoup appris de mes contacts avec des physiciens et biologistes qui m'ont aidé à comprendre *in fine* les applications. Une mention spéciale doit être donnée à Georges Duffa et à Gildas Loussouarn. Enfin, outre les personnes déjà citées, il faut rajouter ici Christophe Chalons, Philippe LeFloch, Fabien Marche et Charles Pierre, sans oublier Hélène et Benjamin avec lesquels il m'a toujours été agréable de travailler.

J'ai également beaucoup appris de l'encadrement avec Adnane, Marx et Céline. L'ambiance et la productivité ayant été au rendez-vous, que demander de plus ?

Et comme il n'y a pas que les maths dans la vie, j'ai une pensée pour tous les musiciens avec lesquels j'ai pu jouer au cours de ces années. Eric, Friedrich, Fred, Jean ainsi que tous les anciens membres de Bypass, les mêmes plus Claude, Jean-Marc, François, Nicolas, Xavier et tous les Fanfarons et bien entendu Etienne, Skander et tous les inquisiteurs d'Ad Extirpenda.

Je n'oublie pas Alain, Antoine, Aymeric, Etienne et Vincent, qui n'ont que trop souffert en ces contrées reculées (en slavonique du sud), ainsi que tous les taroincheurs. Pour finir,

j'adresse un remerciement spécial à Emeric, Fabrice et bien entendu aux membres de ma famille qui m'ont soutenu depuis des années.

Préambule

Ce document a pour vocation d'être une synthèse de mes travaux de recherche. Son objectif est donc de décrire et de mettre en perspective les modèles et méthodes numériques développés dans les articles ou preprints que j'ai publiés. Par souci de lisibilité, les preuves et passages techniques qui ne sont pas cruciaux à la compréhension seront systématiquement omis. Le lecteur intéressé par ceux-ci est renvoyé aux articles concernés.

J'ai choisi de structurer ce mémoire en deux parties distinctes correspondant chacune à l'un de mes axes majeurs de recherche. La première partie est ainsi consacrée à des problèmes hyperboliques avec terme source potentiellement raide. Au sein de celle-ci, le transfert radiatif joue un rôle particulier puisqu'il est à la fois la source et l'application principale de ces travaux. La seconde partie concerne l'électrocardiologie. Les problèmes que l'on y rencontre sont paraboliques-elliptiques et donc de nature fondamentalement différente de la première partie.

Le lien fondamental entre tous ces travaux est la volonté de pouvoir réaliser des simulations de phénomènes complexes décrivant avec le maximum de précision possible des situations physiquement réalistes. Cela implique d'aborder à la fois les aspects de modélisation, d'analyse numérique et de calcul scientifique. Cette diversité me semble être particulièrement profitable à la compréhension globale des phénomènes. Elle constitue pour moi l'un des principaux attraits de cette branche des mathématiques appliquées.

Chaque partie comprend une courte introduction la décrivant et la motivant. Les applications physiques principales de chaque chapitre, à savoir le transfert radiatif et l'électrophysiologie cardiaque, sont décrits dans l'objectif de fournir au lecteur suffisamment de détails pour que leurs problématiques principales puissent être abordées sereinement dans la suite.

Chapitre 1

Systèmes hyperboliques de lois de conservation avec terme source

Introduction

Ce premier chapitre est consacré à des systèmes hyperboliques de lois de conservation avec terme source de la forme :

$$\partial_t U + \partial_x F(U) = \gamma R(U), \quad (1.1)$$

où $U \in \mathbb{R}^N$, F est une fonction régulière de U dont la jacobienne est diagonalisable dans \mathbb{R} . Enfin γ et R sont des fonctions de U . Les hypothèses plus fines seront détaillées plus bas, mais on peut dire que les systèmes qui nous intéressent sont une sous-classe de ceux étudiés par Chen, Levermore et Liu [66]. Plus précisément, ce sont des systèmes qui, en temps long et lorsque γ devient grand, dégénèrent en des systèmes de type diffusion non-linéaire.

Parmi les nombreuses applications concernées, je me suis plus particulièrement focalisé sur des systèmes de type Euler ou Saint-Venant avec friction, mais surtout à des problèmes en transfert radiatif. Le transfert radiatif est le fil rouge de cette première partie. C'est en effet à la fois l'application principale et la source des autres travaux.

Ce chapitre s'ouvre sur la description du comportement en temps long des systèmes de la forme (1.1) tel qu'il est étudié dans [4]. Je décris ensuite la technique numérique développée dans [4, 8] permettant d'obtenir des schémas numériques préservant cette asymptotique en temps long, puis le schéma introduit dans [3] qui préserve l'asymptotique en temps court dans le contexte de Chen, Levermore et Liu.

La troisième partie est consacrée aux applications du transfert radiatif. Après une brève introduction de la physique et des principaux modèles, je montre comment on peut coupler en fréquence un modèle cinétique et un modèle aux moments, puis de quelle manière on peut réaliser numériquement un couplage fort entre rayonnement et hydrodynamique. Enfin, je présente deux applications très particulières du transfert radiatif : la radiothérapie et le rayonnement dans les nuages.

La dernière partie du chapitre est consacrée à des schémas de type GRP espace-temps, implicites et d'ordre aussi élevé que nécessaire, dédiés à des systèmes hyperboliques linéaires.

1.1 Comportement des systèmes étudiés en temps long

L'objectif de ce travail, qui est présenté en détail dans l'article [4], est d'étudier le comportement en temps long et lorsque le terme source devient raide de systèmes de la forme (1.1). Pour ce faire, on introduit un paramètre $\varepsilon > 0$ destiné à tendre vers 0 et on considère le système :

$$\varepsilon \partial_t U + \partial_x F(U) = -\frac{1}{\varepsilon} R(U). \quad (1.2)$$

En temps court, c'est-à-dire lorsqu'on ne considère pas le paramètre ε devant $\partial_t U$, Chen-Levermore et Liu [66] ont démontré que le terme source agissait asymptotiquement (et sous certaines hypothèses sur R bien entendu !) comme un terme dissipatif de premier ordre en ε . Notre but est ici d'étudier ces systèmes en temps long. Comme on le verra par la suite, dans certaines applications physiques, comme en transfert radiatif par exemple, les modèles sont connus pour dégénérer vers une équation de diffusion. On s'attend donc à retrouver ce résultat pour certaines classes de systèmes du type (1.2).

Pour préciser le cadre de l'étude, $U \in \Omega \subset \mathbb{R}^N$ où Ω est l'espace convexe des états admissibles. Le système homogène (*i.e.* dans lequel $R = 0$) est supposé hyperbolique : $D_U F$ est une matrice $N \times N$ diagonalisable dans \mathbb{R} . On demande à $R : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^N$ d'être régulière et de satisfaire les hypothèses de [66]. Tout d'abord, on suppose qu'il existe une matrice constante Q de taille $n \times N$ et de rang $n < N$ telle que :

$$QR(U) = 0, \quad U \in \Omega. \quad (1.3)$$

On en déduit que le vecteur $QU \in \mathbb{R}^n$ est solution du système de lois de conservation de taille n :

$$\varepsilon \partial_t QU + \partial_x QF(U) = 0, \quad (1.4)$$

le vecteur QU étant un élément de l'ensemble convexe $\omega := Q\Omega \subset \mathbb{R}^n$.

On suppose également qu'il existe une variété d'équilibre $\mathcal{E} : \omega \rightarrow \Omega$ qui détermine de manière unique les équilibres locaux :

$$Q\mathcal{E}(u) = u, \quad R(\mathcal{E}(u)) = 0, \quad u \in \omega. \quad (1.5)$$

La dimension du noyau de la matrice $D_U R(\mathcal{E}(u))$ est supposée maximale :

$$\dim\left(\ker(D_U R(\mathcal{E}(u)))\right) = n, \quad (1.6)$$

$$\ker(D_U R(\mathcal{E}(u))) \cap \text{Im}(D_U R(\mathcal{E}(u))) = \{0\}. \quad (1.7)$$

Enfin, on rajoute une hypothèse supplémentaire par rapport à [66] : d'après (1.4), on voit que $\partial_x QF(U) \rightarrow 0$ quand $\varepsilon \rightarrow 0$. On doit donc imposer :

$$QF(\mathcal{E}(u)) = c, \quad u \in \omega,$$

où $c \in \mathbb{R}^n$ est un vecteur constant. Moyennant une renormalisation, on supposera même que :

$$QF(\mathcal{E}(u)) = 0, \quad u \in \omega. \quad (1.8)$$

Avec toutes ces hypothèses, un développement de type Chapman-Enskog permet de conclure que (1.2) dégénère quand $\varepsilon \rightarrow 0$ en le système :

$$\partial_t u + \partial_x \left(Q D_U F(\mathcal{E}(u)) U_1 \right) = 0, \quad (1.9)$$

où le correcteur de premier ordre U_1 est l'unique solution du problème :

$$\begin{aligned} D_U R(\mathcal{E}(u)) \cdot U_1 &= -\partial_x F(\mathcal{E}(u)), \\ Q U_1 &= 0. \end{aligned}$$

Ce résultat n'est pas encore totalement satisfaisant car on n'a pas déterminé la nature exacte du système (1.9). Pour ce faire, l'entropie joue un rôle crucial, à l'image des résultats obtenus en temps court. On rajoute alors trois hypothèses supplémentaires.

Tout d'abord, on admet l'existence d'une entropie $\Phi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ telle que la matrice $D_U^2 \Phi(U) D_U F(U)$ soit symétrique pour tout U dans Ω . Pour assurer la convexité, on impose que $D_U^2 \Phi(U)$ soit positive.

Enfin, on suppose que l'inégalité d'entropie est compatible avec le terme source de la manière suivante :

$$D_U \Phi(U) R(U) \geq 0, \quad U \in \Omega, \quad (1.10)$$

$$D_U \Phi(\mathcal{E}(u)) = D_u \Phi(\mathcal{E}(u)) Q, \quad u \in \omega. \quad (1.11)$$

Notons que, malgré le nombre élevé d'hypothèses requises à ce stade, de nombreux modèles physiques entrent dans le cadre de cette étude. C'est le cas du modèle M_1 pour le transfert radiatif que nous étudierons plus loin, mais aussi des équations d'Euler avec friction et de beaucoup de modèles aux moments provenant d'équations cinétiques avec des termes de collision *ad hoc* (pour d'autres exemples, voir aussi [86, 110]).

Armé de toutes ces hypothèses, on peut déduire la nature du système limite (1.9) :

Théorème 1.1. *Le système limite (1.9) est dissipatif relativement à l'entropie. Plus précisément, il peut s'écrire sous la forme :*

$$\partial_t u = \partial_x \left(S \mathcal{L}^{-1}(u) S^T (\partial_x D_u \Phi(\mathcal{E}(u)))^T \right), \quad (1.12)$$

où :

$$S := Q D_U F(\mathcal{E}(u)) \quad (1.13)$$

et :

$$\mathcal{L}(u) := D_U^2 \Phi(\mathcal{E}(u)) D_U R(\mathcal{E}(u)), \quad (1.14)$$

en notant pour tout $b \in \mathbb{R}^N$ tel que $Qb = 0$, $\mathcal{L}^{-1}(u) \cdot b$ l'unique solution du système :

$$\mathcal{L}(u) \cdot V = b \quad \text{et} \quad QV = 0.$$

De plus, pour tout $u \in \omega$, on a :

$$(\partial_x D_u \Phi(\mathcal{E}(u))) S \mathcal{L}^{-1}(u) S^T (\partial_x D_u \Phi(\mathcal{E}(u)))^T \geq 0.$$

Mentionnons que des preuves de convergence plus rigoureuses ont été obtenues dans le cas quasilinear et semilinear avec des termes source un peu différents (*c.f.* [75, 96]). Les techniques utilisées, comme la compacité par compensation, ne sont toutefois pas extensibles au cas général.

Pour finir, on montre aussi le résultat suivant :

Proposition 1.1. *L'entropie est décroissante :*

$$\partial_t \Phi(\mathcal{E}(u)) \leq -\partial_x (D_U \Psi(\mathcal{E}(u)) U_1), \quad u \in \omega.$$

Ces résultats ont une conséquence importante du point de vue numérique : il devient crucial d'utiliser des schémas numériques préservant l'asymptotique *i.e.* dégénéralant en des schémas consistants avec le système limite (1.9). Il y a une réelle difficulté puisque le système change de nature. Comme on vient de le voir, on passe d'un système hyperbolique (1.2) quand ε est grand à un système parabolique portant sur d'autres variables (1.9) lorsque ε est petit. Le développement de tels schémas fait l'objet du paragraphe suivant.

1.2 Schémas numériques préservant l'asymptotique

On s'intéresse ici à la construction de schémas numériques préservant l'asymptotique pour des systèmes de la forme (1.1). En pratique, il existe deux asymptotiques différentes selon que $QF(\mathcal{E}(u)) = c$ ou non. Dans le premier cas, on retrouve le comportement présenté plus haut : le régime asymptotique est gouverné par un système parabolique. Dans le second cas, on peut se reporter aux travaux de Chen, Levermore et Liu [66] pour constater que le régime asymptotique est un autre système hyperbolique (le système relaxé). Ces deux cas sont donc clairement très différents et *a priori* incompatibles. On présentera donc ici deux techniques, chacune adaptée à l'une de ces asymptotiques.

1.2.1 Schémas préservant l'asymptotique en temps long

Ce paragraphe présente une méthode numérique permettant d'obtenir un schéma préservant l'asymptotique en temps long pour des systèmes de la forme (1.1) vérifiant $QF(\mathcal{E}(u)) = c$. Cette méthode a été introduite dans [8] et généralisée dans [4]. Comme on l'a vu dans le paragraphe précédent, la grande difficulté des systèmes étudiés est qu'ils possèdent deux régimes limites bien distincts. D'une part, lorsque $\gamma = 0$ pour un régime appelé *régime de transport*, on est en présence d'un système hyperbolique. D'autre part, lorsque $\gamma \rightarrow \infty$ pour un régime appelé *régime de diffusion*, les solutions sont régies par un système parabolique. Or, dans certaines applications physiques entrant dans ce cadre, un même domaine de calcul voit coexister des zones où γ est très faible et d'autres dans lesquelles γ prend des valeurs trop élevées pour être résolues par le maillage. Il est donc crucial de posséder un schéma numérique capable de gérer tous les régimes¹.

Il existe dans la littérature récente de nombreux schémas préservant l'asymptotique en temps long. Ceux-ci sont en général basés sur l'une des deux approches suivantes. La première, introduite par Gosse et Toscani [81], consiste en une modification d'un solveur de Riemann approché associé au régime de transport. Il s'agit en résumé d'en contrôler finement la diffusion numérique afin de forcer le schéma à dégénéraler correctement dans le

1. *a priori*, la dégénérescence vers le système de diffusion ne devrait avoir lieu que quand le terme source est raide et en temps long. On pourrait donc s'attendre à ne constater ce phénomène que dans des configurations extrêmes. Pourtant, des résultats à la fois numériques et théoriques -sur des systèmes simples- montrent que le régime asymptotique est atteint dès lors que $\gamma t \rightarrow \infty$ soit beaucoup plus rapidement que prévu (*c.f.* voir par exemple [104]).

Ce comportement est d'ailleurs bien connu des physiciens dans certaines applications, comme en transfert radiatif. Certains modèles, dits de diffusion à flux limité, sont d'ailleurs conçus pour étendre la validité de l'équation régissant le régime asymptotique (voir [92] mais aussi [111] pour des exemples).

régime de diffusion. Cette approche a été utilisée avec succès pour le modèle M_1 en transfert radiatif (voir [54, 58–61] et l'article pionnier [84] dans le même esprit). Son principal inconvénient est que le contrôle de la diffusion numérique peut vite devenir très complexe selon les solveurs de Riemann approchés considérés. En pratique, tous ces schémas sont d'ailleurs basés sur le schéma HLL [83].

La seconde s'appuie sur les travaux de Greenberg et LeRoux [82]. Elle consiste en la dérivation d'une reconstruction hydrostatique (*c.f.* [47, 56]). Contrairement à la technique précédente, elle ne dépend pas a priori du choix du schéma pour la partie transport. En revanche, les reconstructions peuvent vite devenir très sophistiquées, requérant la résolution de systèmes nonlinéaires. Cette approche n'est donc pas applicable à tous les problèmes de la forme (1.1). Dans le cas des équations d'Euler avec un terme de friction, on trouvera un exemple d'utilisation de cette technique dans [56].

Soulignons enfin qu'aucun des schémas cités ci-dessus ne permet de prendre en compte le cas (fréquent) où γ dépend de U . Le coefficient γ étant généralement considéré comme constant ou, à la rigueur, dépendant de x . La méthode présentée ici a donc été construite avec la contrainte d'être :

- directement applicable à une large gamme de systèmes de la forme (1.1), à savoir au moins ceux vérifiant les hypothèses du paragraphe précédent,
- assez souple pour permettre de retrouver les schémas classiques en régime de transport,
- facilement implémentable.

Pour terminer, notons que l'obtention de schémas préservant l'asymptotique est loin d'être limité au cas étudié ici (voir [49, 63, 72] pour quelques autres exemples).

Idée du schéma Par souci de simplicité, la méthode est ici d'abord construite dans le cas où le terme source s'écrit comme un terme de relaxation (à propos de termes de relaxation et des schémas numériques associés voir [86] ainsi que [45, 53, 55, 65, 94] et leurs références) :

$$\partial_t U + \partial_x F(U) = \sigma(R(U) - U), \quad (1.15)$$

où $\sigma = \sigma(t, x, U) \in \mathbb{R}^+$ est une fonction régulière représentative de la raideur du terme source (exemples : coefficient de friction, opacité du milieu,...) et $R : \Omega \rightarrow \Omega$ telle que $U - R(U)$ vérifie les hypothèses de compatibilité du paragraphe précédent. La généralisation sera présentée dans un second temps.

On commence donc par choisir un schéma numérique de type Riemann approché pour la partie transport. On note respectivement b^- et b^+ les vitesses de l'onde la plus lente et de l'onde la plus rapide. On note également U^* l'état intermédiaire associé. Bien entendu, cet état intermédiaire n'est en général pas constant : $U^* = U^*(x/t, U_L, U_R)$. Si l'on considère un maillage uniforme de pas Δx , la mise à jour d'un tel schéma s'écrit de manière usuelle :

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathcal{F}_{i+1/2} - \mathcal{F}_{i-1/2} \right), \quad (1.16)$$

où l'on a noté $\mathcal{F}_{i+1/2} = \mathcal{F}_{i+1/2}(U_i^n, U_{i+1}^n)$ le flux numérique du schéma considéré.

On incorpore alors le terme source en modifiant le solveur de Riemann approché lui-même. Le principe est illustré sur la figure 1.1.

A cet effet, l'état intermédiaire U^* est modifié en un nouvel état intermédiaire \tilde{U}^*

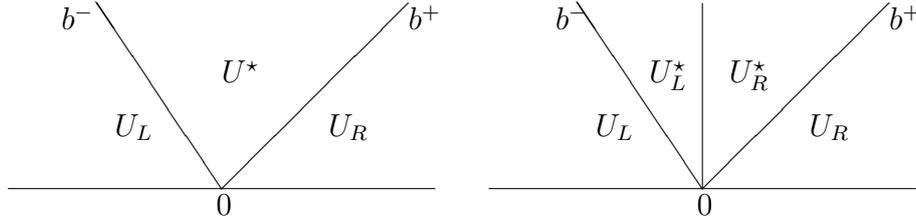


FIGURE 1.1 – Solveurs de Riemann initial (g) et modifié (d).

obtenu de la manière suivante en rajoutant éventuellement une onde stationnaire :

$$\tilde{U}^*(x/t; U_L, U_R) = \begin{cases} U_L^*, & \text{si } x/t < 0, \\ U_R^* & \text{si } x/t > 0, \end{cases},$$

$$U_L^* = \alpha U^*(x/t; U_L, U_R) + (1 - \alpha)R^-(U_L; U_L, U_R),$$

$$U_R^* = \alpha U^*(x/t; U_L, U_R) + (1 - \alpha)R^+(U_R; U_L, U_R).$$

Les termes R^\pm sont consistants avec R au sens où l'on demande que $R^\pm(U; U, U) = R(U)$ et que si $U_L, U_R \in \Omega$ alors $R^\pm(U_L; U_L, U_R), R^\pm(U_R; U_L, U_R) \in \Omega$.

Par ailleurs, $\alpha \in [0, 1]$ est choisi *a posteriori* pour assurer de bonnes propriétés au schéma.

Pour obtenir un schéma volumes finis, on n'a plus qu'à intégrer sur chaque maille la solution composée d'une juxtaposition de problèmes de Riemann ainsi modifiés. Tant que ceux-ci n'interagissent pas, c'est-à-dire sous la condition CFL :

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \max(|b^-|, |b^+|) \leq \frac{1}{2}, \quad (1.17)$$

la mise à jour est donc donnée par :

$$U_i^{n+1} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \tilde{U}^h(x, t + \Delta t) dx,$$

soit, tous calculs faits :

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\alpha_{i+1/2} \mathcal{F}_{i+1/2} - \alpha_{i-1/2} \mathcal{F}_{i-1/2} \right) + \Delta t \left(\frac{1 - \alpha_{i-1/2}}{\Delta x} S_{i-1/2}^+ + \frac{1 - \alpha_{i+1/2}}{\Delta x} S_{i+1/2}^- \right), \quad (1.18)$$

où $S_{i+1/2}^\pm$ sont définis par :

$$S_{i+1/2}^- = \min(0, b_{i-1/2}^-) \left(U_i^n - R_{i+1/2}^-(U_i^n; U_i^n, U_{i+1}^n) \right) + \min(0, b_{i-1/2}^+) \left(R_{i+1/2}^-(U_i^n; U_i^n, U_{i+1}^n) - U_{i+1}^n \right) - F(U_i^n),$$

$$S_{i-1/2}^+ = \max(0, b_{i-1/2}^-) \left(U_{i-1}^n - R_{i-1/2}^+(U_i^n; U_{i-1}^n, U_i^n) \right) + \max(0, b_{i-1/2}^+) \left(R_{i-1/2}^+(U_i^n; U_{i-1}^n, U_i^n) - U_i^n \right) + F(U_i^n).$$

Pour finir, il reste à choisir $\alpha_{i+1/2}$, qui doit vérifier les propriétés suivantes :

- Limite de transport : $\alpha_{i+1/2} = 1$ quand $\sigma_{i+1/2} = 0$,
- Limite de diffusion : $\alpha_{i+1/2} \rightarrow 0$ quand $\sigma_{i+1/2} \rightarrow \infty$,
- Consistance du terme source : $\frac{1-\alpha_{i+1/2}}{\Delta x} = \frac{\sigma_{i+1/2}}{b_{i+1/2}^+ - b_{i+1/2}^-} + o(1)$,
- $\alpha_{i+1/2} \in [0; 1]$.

Parmi les choix possibles, on utilise essentiellement l'un des plus simples, à savoir :

$$\alpha_{i+1/2} = \frac{b_{i+1/2}^+ - b_{i+1/2}^-}{b_{i+1/2}^+ - b_{i+1/2}^- + \sigma_{i+1/2} \Delta x}. \quad (1.19)$$

Il est bien entendu tout à fait possible de considérer d'autres formes de $\alpha_{i+1/2}$, en particulier si l'on souhaite certaines propriétés supplémentaires pour le schéma (1.18). Avec ce choix de $\alpha_{i+1/2}$, le schéma (1.18) possède déjà un certain nombre de propriétés importantes qui sont résumées dans la proposition suivante :

Théorème 1.2. *Sous la condition CFL (1.17), le schéma (1.18) possède les propriétés suivantes :*

- il coïncide avec le schéma choisi pour la partie transport (1.16) si $\sigma = 0$.
- il préserve l'espace des états admissibles si le schéma pour la partie de transport (1.16) possède cette propriété i.e. dans ce cas, si $\forall i \in \mathbb{Z}$, $U_i^n \in \Omega$ alors $U_i^{n+1} \in \Omega$.
- il dissipe localement l'entropie : soit (η, ψ) une paire entropie/flux compatible avec le terme source au sens discret suivant :

$$\begin{aligned} \nabla_U \eta \left(U^* \left(\frac{x - x_{i-1/2}}{t^n + \Delta t}; U_{i-1}^n, U_i^n \right) \right) \cdot \left(R_{i-1/2}^+ - U^* \right) (U_i^n; U_{i-1}^n, U_i^n) &\leq 0, \\ \nabla_U \eta \left(U^* \left(\frac{x - x_{i+1/2}}{t^n + \Delta t}; U_i^n, U_{i+1}^n \right) \right) \cdot \left(R_{i+1/2}^- - U^* \right) (U_i^n; U_i^n, U_{i+1}^n) &\leq 0. \end{aligned} \quad (1.20)$$

alors, pour Δx assez petit, on a la relation de dissipation d'entropie suivante $\forall i \in \mathbb{Z}$:

$$\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \eta(U^h(x, t^n + \Delta t)) dx + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\psi(U_i^n, U_{i+1}^n) - \psi(U_{i-1}^n, U_i^n) \right) \leq 0, \quad (1.21)$$

où U^h est la valeur de U dans le solveur de Riemann modifié.

Il est important de noter que toutes ces propriétés sont obtenues sous la condition CFL standard (1.17) qui est également celle du schéma pour la partie transport. L'un des aspects intéressants est donc que la modification apportée au schéma (1.16) pour prendre en compte le terme source n'a pas modifié la condition CFL. Il reste maintenant à étudier les asymptotiques de ce schéma.

Préservation de l'asymptotique La manière de construire le schéma (1.18) nous assure bien entendu que celui-ci coïncide avec (1.16) en limite de transport, comme précisé ci-dessus. Les deux techniques de construction de schémas préservant l'asymptotique pour des systèmes de la forme (1.1) mentionnées dans l'introduction de ce paragraphe étant également basées sur des modifications de schémas pour la partie transport, cette propriété est donc simple à préserver. En revanche, l'asymptotique en régime de diffusion est plus délicate à obtenir, surtout dans un cadre relativement général.

Afin d'étudier le comportement de notre schéma (1.18) en régime de diffusion, on peut faire le changement d'échelle $t \leftarrow \frac{t}{\varepsilon}$, $\sigma \leftarrow \frac{\sigma}{\varepsilon}$ et identifier les termes en puissance de ε .

Ces calculs sont extrêmement fastidieux dans le cas général, mais en fixant le schéma de transport (1.16) et en précisant les expressions de F , R et σ , on s'aperçoit que (1.18) ne préserve pas l'asymptotique en général. Par exemple, si l'on considère les équations du Télégraphe :

$$\begin{aligned}\partial_t u + a \partial_x u &= \sigma(v - u), \\ \partial_t v - a \partial_x v &= \sigma(u - v),\end{aligned}\tag{1.22}$$

avec $a, \sigma \in \mathbf{R}^+$ et le schéma HLL pour la partie transport, alors le schéma (1.18) correspondant dégénère vers :

$$(u + v)_i^{n+1} = (u + v)_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{a^2}{\sigma} \left((u + v)_{i+1}^n - 2(u + v)_i^n + (u + v)_{i-1}^n \right),$$

qui est consistant avec $\partial_t(u + v) = \frac{a^2}{\sigma} \partial_x^2(u + v)$ alors que le système (1.22) dégénère vers $\partial_t(u + v) = \frac{a^2}{2\sigma} \partial_x^2(u + v)$. Dans ce cas, le schéma obtenu est deux fois trop diffusif.

Afin d'assurer que l'on obtienne un schéma consistant avec le bon régime de diffusion, il est donc nécessaire de réécrire (1.15) en introduisant un paramètre $\bar{\sigma} > 0$:

$$\begin{aligned}\partial_t U + \partial_x F(U) &= \sigma R(U) - \sigma U + (\bar{\sigma} - \sigma)U, \\ &= (\sigma + \bar{\sigma}) \left(\left(\frac{\sigma}{\sigma + \bar{\sigma}} R(U) + \frac{\bar{\sigma}}{\sigma + \bar{\sigma}} U \right) - U \right).\end{aligned}$$

Si on pose, pour $U \in \Omega$:

$$\bar{R}(U) = \frac{\sigma}{\sigma + \bar{\sigma}} R(U) + \frac{\bar{\sigma}}{\sigma + \bar{\sigma}} U,$$

alors (1.15) se réécrit par conséquent sous la forme :

$$\partial_t U + \partial_x F(U) = (\sigma + \bar{\sigma})(\bar{R}(U) - U).\tag{1.23}$$

Or, dès lors que $\bar{\sigma} > 0$ et comme l'espace des états admissibles Ω est convexe, le système (1.23) entre dans le formalisme (1.15). C'est donc à ce système (1.23) que l'on applique le schéma (1.18). Le paramètre $\bar{\sigma} > 0$ pourra alors être choisi pour obtenir un schéma numérique préservant l'asymptotique. Notons que le choix de ce paramètre $\bar{\sigma} > 0$ n'a aucune influence sur les autres propriétés du schéma, les systèmes (1.23) et (1.15) étant équivalents. Bien entendu, il modifie en revanche la diffusion numérique.

Pour reprendre l'exemple du Télégraphe, le schéma (1.18) basé sur le système réécrit (1.23) dégénère en :

$$(u + v)_i^{n+1} = (u + v)_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{a^2}{\sigma + \bar{\sigma}} \left((u + v)_{i+1}^n - 2(u + v)_i^n + (u + v)_{i-1}^n \right),$$

il suffit donc de prendre par exemple $\bar{\sigma} = \sigma$ pour obtenir un schéma préservant l'asymptotique.

Étant donné que le choix de $\bar{\sigma}$ détermine le régime de diffusion approché à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$, on peut tout à fait choisir ce paramètre pour corriger un mauvais comportement du modèle en régime de diffusion. Un exemple est présenté dans [15] où l'on construit un schéma préservant l'asymptotique physique attendue alors que le modèle ne possède pas exactement la bonne. Dans le cas précis du modèle M_1 pour le transfert radiatif -cas

traité en l'occurrence-, les différences entre la limite physique et celle du modèle sont minimales, comme on le verra dans la suite. Il est bien entendu peu souhaitable d'utiliser un modèle ayant un mauvais comportement en limite de diffusion pour faire des simulations numériques, ne serait-ce que dans les régimes intermédiaires.

Remarque 1.1. *Dans le cas linéaire, le schéma (1.18) est équivalent à d'autres schémas préservant l'asymptotique en temps long (comme [64, 81]).*

Le schéma (1.18), construit en utilisant un formalisme de type relaxation pour le terme source et des valeurs scalaires pour σ se généralise à n'importe quel système possédant les propriétés listées dans le paragraphe précédent, y compris lorsque les valeurs de σ sont des matrices de taille N . Cette généralisation se construit de manière tout à fait similaire à celle présentée plus haut et est décrite dans [4]. Au final, si l'on intègre la correction (1.23), on obtient un schéma qui approche les solutions de (1.1) de la forme :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t}(U_i^{n+1} - U_i^n) + \frac{1}{\Delta x}(\alpha_{i+1/2}\mathcal{F}_{i+1/2} - \alpha_{i-1/2}\mathcal{F}_{i-1/2}) \\ = \frac{1}{\Delta x}(\alpha_{i+1/2} - \alpha_{i-1/2})F(U_i^n) - \frac{\gamma}{2}(\alpha_{i+1/2} + \alpha_{i-1/2})R(U_i^n). \end{aligned} \quad (1.24)$$

Bien entendu, dans ce cas, l'analogue de α noté $\underline{\alpha}$ est une matrice de taille N que l'on choisit comme étant de la forme :

$$\underline{\alpha} = \left(I + \frac{\gamma\Delta x}{2b}(I + \underline{\sigma}) \right)^{-1}, \quad (1.25)$$

et $\bar{R}(U)$ est donné par :

$$\bar{R}(U) = (I + \underline{\sigma})^{-1}R(U). \quad (1.26)$$

Cette généralisation du schéma (1.18) vérifie la généralisation du théorème (1.2) pour peu que toutes les matrices soient bien définies et que la matrice $\underline{\sigma}$ soit la discrétisation d'une variété continue. De plus, un choix judicieux de la matrice $\underline{\sigma}$ permet d'obtenir un schéma préservant l'asymptotique à $\varepsilon \rightarrow 0$. Plus précisément, on a le théorème suivant :

Théorème 1.3. *On considère des matrices de taille N $\underline{\sigma}_{i+1/2}$ telles que $I + \underline{\sigma}_{i+1/2}$ et $(1 + \frac{\Delta x}{2\varepsilon b})I + \underline{\sigma}_{i+1/2}$ sont bien définies et inversibles pour $\varepsilon > 0$. On suppose l'existence d'une matrice de taille n notée $\mathcal{M}_{i+1/2}$ telle qu'on ait la relation :*

$$Q(I + \underline{\sigma}_{i+1/2})^{-1} = \frac{1}{b^2}\mathcal{M}_{i+1/2}Q. \quad (1.27)$$

Avec les notations du paragraphe précédent, on définit de plus la matrice de taille n $\mathcal{M}(u)$:

$$\mathcal{M}(u) = QD_U F(\mathcal{E}(u))\mathcal{L}^{-1}(u)D_U^2\Phi(\mathcal{E}(u))D_U F(\mathcal{E}(u))D_u\mathcal{E}(u). \quad (1.28)$$

On suppose enfin que $\mathcal{M}_{i+1/2}$ sont des discrétisations de $\mathcal{M}(u)$ aux interfaces $x_{i+1/2}$. Alors, le schéma (1.24) préserve l'asymptotique à $\varepsilon \rightarrow 0$.

Dans ce théorème, la matrice \mathcal{M} définie par l'équation (1.28) représente la matrice de diffusion du système limite. Étant donné qu'on doit en construire une discrétisation, sa forme complexe dans le cas général peut faire craindre des difficultés à mettre en œuvre le schéma. En pratique, la forme de \mathcal{M} est souvent nettement plus conviviale que ne

le laisse supposer l'équation (1.28). Il est alors relativement simple et efficace d'adopter la stratégie suivante. On commence par écrire une forme discrète de \mathcal{M} , par exemple en sélectionnant un schéma numérique pour discrétiser l'équation de diffusion. Muni de cette forme discrète, on déduit de (1.27) la forme de $\underline{\sigma}_{i+1/2}$ à utiliser dans le schéma (1.24).

A titre d'exemple, on applique le schéma (1.24) pour approcher les solutions du système suivant :

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \partial_x q &= 0, \\ \partial_t q + \partial_x \left(\frac{q^2}{\rho} + p(\rho) \right) &= -\kappa q + \sigma f, \\ \partial_t e + \partial_x f &= 0, \\ \partial_t f + \partial_x \chi \left(\frac{f}{e} \right) e &= -\sigma f,\end{aligned}$$

où p est une fonction régulière, convexe et croissante de ρ et χ est définie par :

$$\chi(\xi) = \frac{3 + 4\xi^2}{5 + 2\sqrt{4 - 3\xi^2}}.$$

Ce système académique pouvant être vu comme un couplage ultra-simplifié entre le système d'Euler avec friction et le modèle M_1 pour le transfert radiatif avec scattering isotrope. Si l'on suppose que κ et σ ont le même rapport d'échelle, ce système dégénère en temps long vers le système :

$$\begin{aligned}\partial_t \rho - \frac{1}{\kappa} \partial_x^2 p(\rho) - \frac{1}{3\kappa} \partial_x^2 e &= 0, \\ \partial_t e - \frac{1}{3\sigma} \partial_x^2 e &= 0.\end{aligned}$$

L'intérêt de ce système est que c'est un exemple simple pour lequel le régime de diffusion est gouverné par deux équations. Le système limite n'est de plus pas trivial puisque, si l'équation de diffusion sur e est indépendante de ρ , l'inverse n'est pas vrai. Le comportement du schéma est illustré sur la figure 1.2. Les courbes représentent les résultats obtenus avec la configuration suivante :

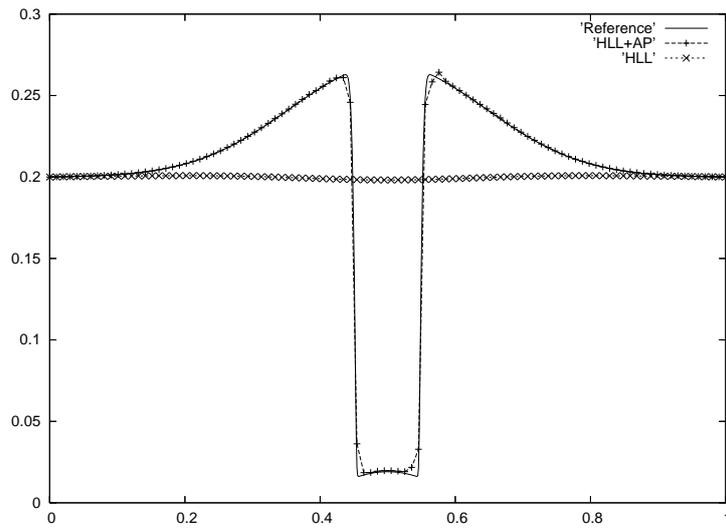
$$\rho_0 = 0.2, \quad q_0 = 0, \quad f_0 = 0, \quad \text{et } e_0 = \begin{cases} 1.5 & \text{si } x \in [0.45, 0.55] \\ 1 & \text{sinon} \end{cases},$$

et les paramètres $\kappa = 2$, $\sigma = 1$, $\varepsilon = 10^{-3}$, $p(\rho) = 10^{-3}\rho^2$. On utilise un maillage uniforme avec un pas d'espace $\Delta x = 10^{-2}$. La solution obtenue avec le schéma (1.24) est comparée avec celle donnée par un schéma qui approche le système de diffusion à un temps $t = 50$.

On a également représenté sur la figure 1.2 les solutions du schéma (1.24) en choisissant $\underline{\sigma}_{i+1/2} = 0$. Ces résultats sont typiques de ce qu'on obtient avec un schéma qui ne préserve pas l'asymptotique. En ce qui concerne e , un tel schéma prédit typiquement un régime de diffusion mais avec un mauvais coefficient, comme dans l'exemple du Télégraphe. En revanche, il prédit pour ρ un régime de diffusion qui ne dépend pas de e . On constate nettement ce très mauvais comportement sur la figure. Pour obtenir une approximation acceptable de la solution, un maillage extrêmement fin va être requis.

En revanche, le schéma (1.24) avec une matrice $\underline{\sigma}_{i+1/2}$ *ad hoc* (entre autres non diagonale)

Densité (ρ) :



Énergie (e) :

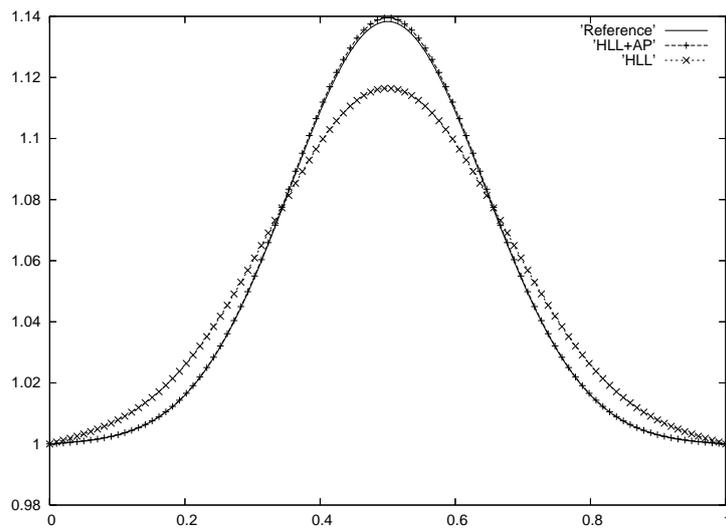


FIGURE 1.2 – Solution de référence (trait plein) et du schéma (1.24) (pointillés) avec et sans la correction AP.

capture parfaitement la solution pourtant très particulière et ce même sur un maillage relativement grossier.

La technique numérique présentée ici remplit donc ses objectifs initiaux. Elle a d'ailleurs été appliquée avec succès pour des simulations physiques complexes.

Dans [6], on considère les équations de St Venant avec terme de friction. Dans ce cas, la limite n'est plus un opérateur de diffusion standard mais contient un opérateur de type p-laplacien. Ce type de cas est également traité dans [4].

Dans [10], on considère le modèle M_1 en 2D cartésien. A noter que le schéma numérique pour la partie transport est un schéma de type HLLC adapté.

Enfin, dans [22], on considère l'extension du schéma dans le cas 2D non-structuré. Celle-ci est relativement directe. En fait, la principale difficulté dans ce cas est de choisir un schéma numérique vers lequel dégénérer en régime de diffusion. Dans certains cas, on obtient des régimes très anisotropes, voire des p-laplaciens comme mentionné plus haut. Il est alors nécessaire d'utiliser des formalismes volumes finis adaptés comme par exemples des schémas de type DDFV (*c.f.* description d'un tel schéma dans le chapitre suivant).

1.2.2 Schéma préservant l'asymptotique en temps court

L'objectif de ce paragraphe est de présenter le schéma détaillé dans [3], qui préserve l'asymptotique en temps court pour des systèmes hyperboliques de la forme :

$$\partial_t u + \partial_x v = 0, \quad (1.29)$$

$$\partial_t v + \partial_x g(u, v) = \frac{1}{\varepsilon(t, x, u)} S(u, v), \quad (1.30)$$

Sous les hypothèses de [66], lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, ce système dégénère vers une équation relaxée :

$$\partial_t u + \partial_x f(u) = 0. \quad (1.31)$$

Notons qu'il existe de nombreux schémas préservant l'asymptotique pour ce système, au moins lorsque ε est une constante (*c.f.* les références dans [3]). Par exemple un simple splitting d'opérateur fonctionne très bien de ce point de vue. En revanche, la discrétisation de l'équation limite (1.31) est alors imposée. L'originalité du schéma proposé dans [3] est qu'il permet de choisir n'importe quel solveur de Riemann approché pour discrétiser chacun des deux régimes limites ($\varepsilon \rightarrow 0$ et $\varepsilon \rightarrow \infty$). Ceci peut être particulièrement utile dans des contextes de couplage de codes, de réduction de modèles ou de décomposition de domaine. Il permet ainsi également de construire facilement des approximations d'ordre élevé dans tous les régimes.

Afin d'expliquer le principe de ce schéma, on se place d'abord dans le cadre d'un système quasilinéaire de type relaxation :

$$\partial_t u + \partial_x v = 0, \quad (1.32)$$

$$\partial_t v + a^2 \partial_x u = \frac{1}{\varepsilon(t, x, u)} (f(u) - v), \quad (1.33)$$

avec $a > 0$ vérifiant la condition sous-caractéristique de Whitham :

$$|f'(u)| < a. \quad (1.34)$$

On choisit alors de définir un solveur de Riemann approché à deux états comme illustré sur la figure 1.3. Les quatre états intermédiaires sont définis par les quatre équations suivantes. Tout d'abord, on impose la consistance de u avec la forme intégrale :

$$(v_R - v_L) = -a(u_L^* - u_L) + a(u_R - u_R^*). \quad (1.35)$$

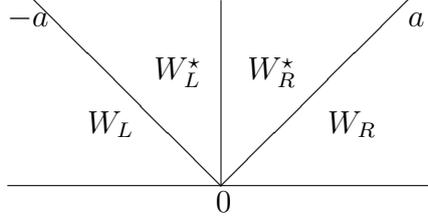


FIGURE 1.3 – Illustration du solveur de Riemann approché.

Le terme source n'intervient donc pas dans cette équation. Les trois autres équations sont données par les relations de Rankine-Hugoniot sur v à travers chacune des ondes :

$$a^2(u_L^* - u_L) = -a(v_L^* - v_L), \quad (1.36)$$

$$a^2(u_R^* - u_L^*) = \frac{\Delta x}{\varepsilon} \tilde{S}(W_L, W_R), \quad (1.37)$$

$$a^2(u_R - u_R^*) = a(v_R - v_R^*), \quad (1.38)$$

où $\tilde{S}(W_L, W_R)$ est une approximation consistante de $f(u) - v$ à définir. On résout alors ce système pour obtenir le schéma suivant :

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathcal{F}_{i+1/2}^u - \mathcal{F}_{i-1/2}^u \right), \quad (1.39)$$

$$v_i^{n+1} = v_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathcal{F}_{i+1/2}^v - \mathcal{F}_{i-1/2}^v \right) + \frac{\Delta t}{2\varepsilon_{i+1/2}^n} \left(\tilde{S}_{i+1/2} + \tilde{S}_{i-1/2} \right), \quad (1.40)$$

avec :

$$\mathcal{F}_{i+1/2}^u = \frac{1}{2}(v_i + v_{i+1}) - \frac{a}{2}(u_{i+1} - u_i) + \frac{\Delta x}{2a\varepsilon} \tilde{S}(W_i, W_{i+1}), \quad (1.41)$$

$$\mathcal{F}_{i+1/2}^v = \frac{a^2}{2}(u_i + u_{i+1}) - \frac{a}{2}(v_{i+1} - v_i). \quad (1.42)$$

Enfin, on choisit l'approximation suivante du terme source $\tilde{S}_{i+1/2}$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon} \tilde{S}_{i+1/2} &= \frac{a \left(2\psi(u_i^n, u_{i+1}^n) - (v_i^n + v_{i+1}^n) + a(u_{i+1}^n - u_i^n) \right)}{2a\varepsilon_{i+1/2}^n + \Delta x}, \\ &= \frac{2a}{2a\varepsilon_{i+1/2}^n + \Delta x} \left(\psi(u_i^n, u_{i+1}^n) - v_{i+1/2}^* \right) \end{aligned} \quad (1.43)$$

avec :

$$v_{i+1/2}^* = \frac{1}{2}(v_i + v_{i+1}) - \frac{a}{2}(u_{i+1} - u_i)$$

et :

$$\varepsilon_{i+1/2}^n = \varepsilon \left(t^n, x_{i+1/2}, \frac{u_i^n + u_{i+1}^n}{2} \right).$$

Ici, ψ est n'importe quel flux numérique consistant avec (1.31). Cette approximation de \tilde{S} a été construite de telle sorte que le schéma final soit consistant, préserve l'asymptotique et dégénère quand $\varepsilon \rightarrow 0$ en un schéma volumes finis pour (1.31) de flux ψ .

Le schéma ainsi obtenu possède les bonnes propriétés résumées dans la proposition suivante :

Proposition 1.2. *Sous la condition CFL $2a\Delta t \leq \Delta x$, le schéma préserve :*

- l'asymptotique $\varepsilon \rightarrow 0$ (sous une condition très peu contraignante sur ψ),
- le principe du maximum, les inégalités d'entropies et le caractère TVD sur les variables diagonales $u \pm av$ quand $\varepsilon \rightarrow \infty$,
- toutes les propriétés satisfaites par le choix de ψ quand $\varepsilon \rightarrow 0$.

De plus, si ψ est le flux d'un schéma L^2 stable sous la même condition CFL alors le schéma est également L^2 stable sous cette condition CFL.

Ce schéma se généralise très bien et conserve ses propriétés fondamentales. Il est même possible de choisir ψ de façon à ce qu'il soit consistant avec le correcteur d'ordre 1 en ε dans la limite $\varepsilon \rightarrow 0$.

A titre d'exemple, on considère un cas-test proposé par Jin *et al.* dans [85] (qui proposent une technique de décomposition de domaine adaptée). On y choisit $g(u, v) = u$ et ε discontinu :

$$\varepsilon = \begin{cases} 1 & \text{si } x < 1, \\ 2.10^{-3} & \text{sinon.} \end{cases}$$

Le terme source a une forme de relaxation : $S(u, v) = f(u) - v$ avec $f(u) = \frac{1}{4}(e^{-u} - 1)$. Les données initiales sont $u(0, x) = u_0(x) = \sin(\pi(x - 1))^3$ et $v(0, x) = f(u(0, x))$. Les conditions aux limites sont $u(t, 0) = u(t, 2) = 0$ et :

$$\begin{aligned} v(t, 0) &= u(t, 0) - (u_0 - f(u_0))(t), \\ v(t, 2) &= -u(t, 2) + (u_0 + f(u_0))(2 - t). \end{aligned}$$

Le maillage ne comporte que 50 mailles de sorte que $\varepsilon < \Delta x$. On compare alors la méthode de splitting standard, notre schéma avec deux choix de ψ (à savoir les flux de HLL et Lax-Wendroff) et une solution de référence obtenue en faisant converger la méthode de splitting. Les résultats sont donnés pour $t = 0.5$ sur la figure 1.4. On voit clairement qu'au voisinage de la discontinuité en ε , la solution approchée par splitting présente une différence non négligeable avec la solution de référence. Notre schéma se comporte mieux. Par ailleurs, on constate que le choix d'un flux de Lax-Wendroff pour ψ améliore l'approximation même dans la zone où $\varepsilon = 1$, où l'on est pourtant loin du régime asymptotique. Le contrôle du choix de ψ est donc un atout non négligeable, même pour des problèmes pour lesquels ce n'était pas évident *a priori*.

1.3 Transfert radiatif

Mon intérêt pour le transfert radiatif remonte à mon stage de DEA (!) [40]. Mon objectif principal durant toutes ces années a été (et reste) de permettre de réaliser des simulations dans des cas de rentrée atmosphérique superorbitale. De telles applications sont extrêmement complexes tant du point de vue de la modélisation que du calcul. Bien entendu, il existe de nombreuses autres applications du transfert radiatif. On trouvera à la fin de ce paragraphe des exemples en radiothérapie ou en climatologie (rayonnement dans les nuages).

Le transfert radiatif représente le transfert d'énergie *via* les photons. Au niveau mésoscopique, il est décrit par l'équation du transfert radiatif (ETR) qui peut s'écrire sous la forme :

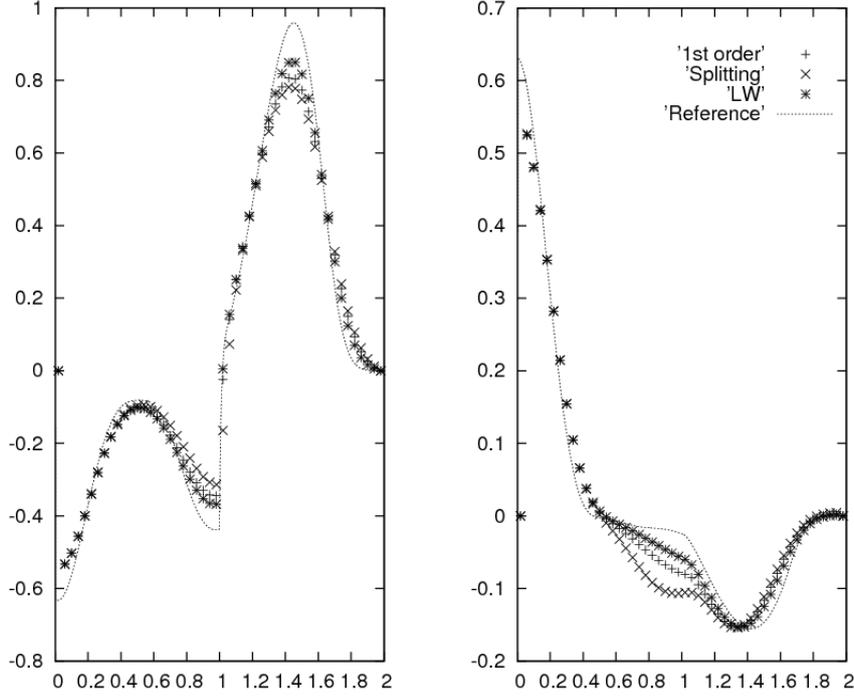


FIGURE 1.4 – Cas test de Jin, Liu et Wang : $u(l)$ et $v(r)$ à $t = 0.5$.

$$\frac{1}{c} \partial_t I_\nu(\Omega) + \Omega \cdot \nabla_x I_\nu(\Omega) = \sigma_\nu \left(B_\nu(T) - I_\nu(\Omega) \right),$$

$$- \kappa I_\nu(\Omega) + \frac{\kappa}{4\pi} \int_{S^2} p(\Omega \rightarrow \Omega') I_\nu(\Omega') d\Omega'. \quad (1.44)$$

Dans cette équation, l'inconnue est l'intensité radiative $I_\nu(\Omega) = I(t, x, \Omega, \nu)$ qui est liée à la fonction de répartition des photons. La vitesse d'un photon a toujours pour module la vitesse de la lumière c et ne nécessite donc qu'un vecteur de direction $\Omega \in S^2$ pour être décrite. Par ailleurs, chaque photon est caractérisé par une énergie $h\nu$ où h est la constante de Planck et ν la fréquence. Comme on peut le voir, l'ETR est une équation cinétique et qui possède à ce titre des similitudes avec d'autres équations du même type comme l'équation de Boltzmann. Elle possède aussi des spécificités surprenantes, comme en témoignent par exemples les pics dits de Zel'dovitch dans les chocs radiatifs [113] (on pourra voir [70] pour une approche mathématique de ce phénomène).

En l'absence d'interaction avec la matière, les photons se propagent donc en ligne droite à la vitesse $c\Omega$: c'est le régime de transport.

Les interactions rayonnement/matière quant à elles, sont essentiellement de trois sortes. Tout d'abord, la matière émet des photons. Dans des conditions "raisonnables"², cette émission peut s'écrire sous la forme $\sigma_\nu B_\nu(T)$ où $B_\nu(T)$ est la fonction de Planck, ou planckienne, qui joue un rôle comparable à la maxwellienne pour l'équation de Boltzmann et qui est donnée par :

$$B_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \left[\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1 \right]^{-1},$$

2. à l'équilibre thermodynamique local

où k est la constante de Boltzmann et T la température de la matière. Le coefficient $\sigma_\nu = \sigma(\nu, T, \dots)$ représente l'opacité du milieu : c'est l'inverse du libre parcours moyen. Ce coefficient est crucial car il est contient des propriétés fondamentales du milieu considéré. C'est en général une fonction très complexe de ν en raison de la présence de millions de raies d'émission caractéristiques des espèces en présence. La figure 1.5 montre par exemple, une partie du spectre dans un plasma d'atmosphère vénusienne. Dans cet exemple, on constate des composantes continues dues aux transitions lié/libre et libre/libre.

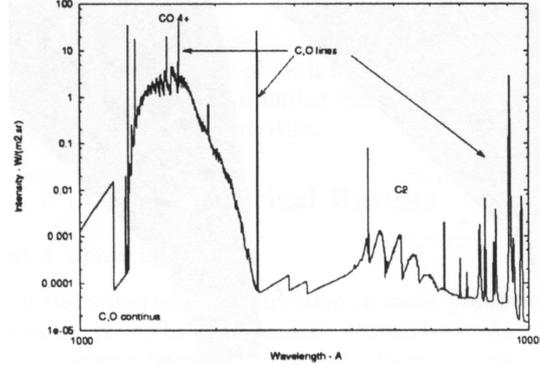


FIGURE 1.5 – Exemple de spectre d'un plasma.

Le deuxième type d'interaction photons/matière est l'absorption. C'est le phénomène inverse de l'émission : certaines populations gagnent un (ou plusieurs) niveau d'énergie en captant les photons d'énergie $h\nu$ correspondante. L'absorption correspond au terme $-\sigma_\nu I_\nu(\Omega)$ dans l'ETR.

Enfin, le troisième type d'interaction correspond au scattering : les photons sont alors déviés avec une certaine probabilité p . Il existe plusieurs types de scattering mais pour simplifier, on n'a conservé dans (1.44) que ceux qui modifient uniquement la trajectoire (d'autres modifient également la fréquence). Dans la suite, le scattering ou l'absorption seront parfois négligés selon les régimes physiques considérés.

La forme (1.44) de l'ETR contient d'autres simplifications, le lecteur désireux d'en apprendre plus se référera à [100, 102, 106, 113]. Il semble toutefois important de souligner certaines propriétés afin d'éclairer la suite de ce paragraphe.

Tout d'abord, certaines grandeurs macroscopiques ont un intérêt particulier. On définit ainsi :

$$\begin{aligned} \text{l'énergie radiative : } E_R &= \frac{1}{c} \int_{S^2} \int_0^\infty I_\nu(\Omega) d\nu d\Omega, \\ \text{la température radiative : } T_R &= \left(\frac{E_R}{a} \right)^{\frac{1}{4}}, \\ \text{le flux radiatif : } F_R &= \frac{1}{c} \int_{S^2} \int_0^\infty c\Omega I_\nu(\Omega) d\nu d\Omega. \end{aligned}$$

Afin de simplifier les notations, les intégrales en direction et en fréquence seront notées :

$$\langle \bullet \rangle := \frac{1}{c} \int_{S^2} \int_0^\infty \bullet d\nu d\Omega.$$

Pour plus de clarté, les dépendances en ν et en Ω seront omises dans les crochets. La notion de température radiative dérive d'une propriété fondamentale de la fonction de Planck :

son énergie est proportionnelle à T^4 . On note $\langle B(T) \rangle = aT^4$, où $a \simeq 7.56 \cdot 10^{-16} \text{ SI}$. Autre notion importante dans la suite, l'entropie radiative h_R est définie par :

$$h_R(I) = \frac{2k\nu^2}{c^3} \left[n_I \ln(n_I) - (n_I + 1) \ln(n_I + 1) \right], \quad (1.45)$$

où n_I est le nombre d'occupation défini par :

$$n_I = \frac{c^2}{2h\nu^3} I_\nu(\Omega).$$

La planckienne représente le minimum de l'entropie radiative parmi toutes les intensités d'énergie aT^4 :

$$B_\nu(T) = \operatorname{argmin} \{ \langle h_R(J) \rangle, \langle J \rangle = aT^4 \},$$

Remarquons ensuite que le rayonnement dépend étroitement des propriétés physiques de la matière : température, mais aussi pression ou composition chimique (ces influences sont cachées dans l'expression de l'opacité). Il convient donc d'ajouter à l'ETR une description de ces grandeurs matière. Pour certaines applications, comme en climatologie, l'influence du rayonnement sur la température peut être négligée et celle-ci peut être une donnée du modèle. Pour d'autres applications, en astrophysique ou pour des rentrées atmosphériques superorbitales, l'impact du rayonnement peut être prépondérant. Dans ce cas, on peut par exemple coupler le rayonnement avec des équations de type Navier-Stokes. Afin de présenter les modèles de rayonnement dans un cadre agréable, on utilisera l'équation d'évolution de la température suivante :

$$\rho C_v \partial_t T = \int_{S^2} \int_0^\infty \sigma_\nu \left(I_\nu(\Omega) - B_\nu(T) \right), \quad (1.46)$$

c'est-à-dire que la différence d'énergie entre le rayonnement et la matière modifie simplement la température. Ici, ρ est la densité et C_v la capacité calorifique à volume constant du milieu.

Signalons enfin que lorsque les opacités σ_ν ou κ deviennent importantes, l'ETR dégénère en temps long vers une équation de diffusion. Lorsque $\sigma_\nu \rightarrow \infty$, on obtient ainsi le régime dit de *diffusion à l'équilibre* (c.f. [48, 90] et [73]) :

$$\partial_t (\rho C_v T + aT^4) - \nabla_x \left(\frac{4acT^3}{3\sigma_R} \nabla_x T \right) = 0, \quad (1.47)$$

où σ_R est la moyenne de Rossland de l'opacité :

$$\sigma_R = \frac{\langle \partial_T B \rangle}{\langle \frac{1}{\sigma} \partial_T B \rangle}. \quad (1.48)$$

On retrouve ainsi le comportement familier abordé au début de ce chapitre.

L'analyse du comportement des solutions de l'ETR et du problème couplé avec l'hydrodynamique a fait l'objet de nombreux travaux. On peut citer [44, 48, 69, 70, 109] pour une liste non exhaustive.

1.3.1 Modèle M_1 -multigroupe et modèle hybride

Calculer de manière très précise les solutions de l'ETR se révèle très coûteux numériquement. Il faut en effet discrétiser les variables directionnelles et fréquentielle. Cette dernière est de loin la plus problématique car un gaz donné contient des dizaines d'espèces chimiques, chacune possédant des millions de raies d'émission. Pour capter certains phénomènes, comme le fait que l'absorption a tendance à "creuser" les profils de raie, il faut donc échantillonner finement chaque raie. Un tel calcul est tellement lourd numériquement (et le restera longtemps) qu'il est inenvisageable de l'utiliser dans un contexte de couplage fort. L'un des principaux défis est alors de proposer des modèles nettement moins coûteux tout en étant capables de correctement représenter les phénomènes considérés. C'est l'objet de ce paragraphe.

L'une des particularités de l'ETR, quand on compare avec l'équation de Boltzmann par exemple, est le découplage entre les variables de direction Ω et de fréquence ν . La principale difficulté résidant dans le traitement des fréquences, on va considérer un découpage de $[0, +\infty[_\nu$ en *groupes* et en *bandes étroites* de la manière suivante :

$$[0, +\infty[_\nu = \left(\bigcup_{q=1}^Q \mathcal{Q}_q \right) \cup \left(\bigcup_{k=1}^K \overline{\mathcal{Q}}_k \right). \quad (1.49)$$

Dans la suite, les groupes seront systématiquement notés \mathcal{Q}_q et les bandes étroites $\overline{\mathcal{Q}}_k$. Afin de préciser les appellations utilisées dans ce paragraphe :

- Les *bandes étroites* sont des intervalles de fréquence assez petits pour que l'on puisse faire certaines hypothèses simplificatrices. Typiquement, la fonction de Planck peut être considérée comme constante à l'intérieur d'une bande étroite. On peut y calculer des moyennes d'opacité en utilisant des techniques spécifiques comme les méthodes CK [88]. Dans des configurations usuelles, on doit considérer quelques milliers de bandes étroites.
- Les *groupes* sont de grands intervalles de fréquence à l'intérieur desquels on ne peut pas faire les simplifications précédentes. Dans des configurations usuelles, on utilise peu de groupes (jusqu'à quelques dizaines).

On peut distinguer deux grandes familles de modèles selon le choix du découpage en fréquence. D'une part les méthodes que l'on peut appeler abusivement microscopiques et qui utilisent une discrétisation fine à la fois en direction et en fréquence (donc des bandes étroites). Parmi ces méthodes, on peut citer les méthodes aux ordonnées discrètes et les méthodes de lancer de rayon. Ces méthodes sont aussi coûteuses que précises et sont très populaires dans des applications en climatologie et en spectroscopie.

A l'autre bout de l'échelle, on trouve des modèles basés sur des grandeurs macroscopiques. Moins détaillés et moins coûteux que les précédents, ils sont couramment utilisés en astrophysique ou pour des applications à des incendies. On y trouve essentiellement les modèles aux moments, dont le modèle M_1 décrit plus bas, et les modèles de diffusion à flux limité qui se basent sur la limite de diffusion (1.47). Les plus classiques d'entre eux sont comparés dans [105].

Dans ce paragraphe, on présente deux modèles : l'un cinétique, l'autre aux moments.

On montrera que chacun d'entre eux possède de bonnes propriétés mathématiques. Ces deux modèles serviront alors de base à la construction d'un modèle hybride faisant un compromis entre les deux approches.

Modèle cinétique Ce modèle a été introduit dans [30] et développé dans [9]. On se place ici dans le cas où $Q = 0$ *i.e.* le découpage en fréquence est fait exclusivement par bandes étroites. Afin d'obtenir un modèle semi-discret (continu en t et en x , discret en Ω et en ν), on choisit d'utiliser une méthode de type ordonnées discrètes en choisissant un ensemble de directions $(\Omega_l)_{l=1\dots L}$ (pour plus de précisions, on pourra par exemple se référer à [106]). Les intégrales sont alors remplacées par une formule de quadrature :

$$\overline{\langle \bullet \rangle} = \sum_{k=1}^K \sum_{l=1}^L \bullet \omega_l \xi_k \simeq \frac{1}{c} \int_0^\infty \int_{S^2} \bullet d\Omega d\nu.$$

Muni de celle-ci, on discrétise simplement l'ETR dans chacune des bandes étroites et dans les intervalles autour de chacun des Ω_l :

$$\frac{1}{c} \partial_t J_{k,l} + \Omega_l \nabla_x J_{k,l} = \sigma_k [\mathcal{B}_k(T) - J_{k,l}], \quad (k, l) \in [1 \dots K] \times [1 \dots L] \quad (1.50)$$

$$\rho C_v \partial_t T = \overline{\langle c\sigma(J - \mathcal{B}(T)) \rangle}, \quad (1.51)$$

L'inconnue de ce modèle, notée $J_{k,l}$ est une approximation de $I_{\nu_k}(\Omega_l)$. Par ailleurs, $\mathcal{B}_k(T)$ est une approximation de $B_\nu(T)$. Dans les modèles ordonnées discrètes classiques, on choisit en général $\mathcal{B}_k(T) = B_{\nu_k}(T)$ mais ce choix n'est pas complètement anodin. Par exemple, les formules de quadrature utilisées ne permettent pas de vérifier $\overline{\langle \mathcal{B}(T) \rangle} = aT^4$. De l'énergie est donc créée ou perdue artificiellement à cause des erreurs de quadrature. Pour pallier cet inconvénient, on construit donc un modèle cinétique dans lequel la forme de $\mathcal{B}_k(T)$ permet d'assurer que ce modèle semi-discret conserve les propriétés essentielles du modèle continu. L'idée, inspirée de ce que Mieussens a proposé pour Boltzmann-BGK [99], est d'utiliser une technique de minimisation d'entropie à la Levermore [93] pour définir \mathcal{B} :

$$\mathcal{B} = (\mathcal{B}_{k,l}(T))_{k,l} = \operatorname{argmin} \{ \overline{\langle h_d(J) \rangle}, \overline{\langle J \rangle} = aT^4 \}, \quad (1.52)$$

avec :

$$h_d(J) = \frac{2k\nu_k^2}{c^3} \left[n_{k,l} \ln(n_{k,l}) - (n_{k,l} + 1) \ln(n_{k,l} + 1) \right],$$

et :

$$n_{k,l} := n(J)_{k,l} = \frac{c^2}{2h\nu_k^3} J_{k,l}.$$

Ce choix est cohérent dans la mesure où l'équivalent discret de la fonction de Planck est également choisi en minimisant une forme discrète de l'entropie radiative sous contrainte d'avoir une énergie de aT^4 . Il permet au modèle (1.50)-(1.51)-(1.52) de posséder un certain nombre de propriétés intéressantes résumées dans les théorèmes suivants :

Théorème 1.4. *Si $T > 0$ alors il existe un unique \mathcal{B} solution de (1.52). Il est donné par :*

$$\mathcal{B}_{k,l} = \mathcal{B}_k = \frac{2h\nu_k^3}{c^2} \left[\exp\left(\frac{h\nu_k \alpha}{k}\right) - 1 \right]^{-1}, \quad (1.53)$$

où α est l'unique solution de l'équation $\overline{\langle \mathcal{B} \rangle} = aT^4$.

Théorème 1.5. *Si la formule de quadrature $\overline{\langle \bullet \rangle}$ est exacte pour les polynômes de degré 2 en Ω alors :*

– *l'énergie totale est conservée :*

$$\partial_t(\overline{\langle J \rangle} + \rho C_v T) + c \nabla_x \overline{\langle \Omega_l J \rangle} = 0,$$

– *si $J(t=0) \in L^\infty$ alors $\forall t > 0$, $J(t) \in L^\infty$,*

– *l'entropie totale est localement dissipée :*

$$\partial_t \left(\frac{\overline{\langle h_R(J) \rangle}}{c} + \rho C_v \mathcal{U} \right) + \nabla_x \overline{\langle \Omega_l h_R(J) \rangle} \leq 0.$$

où $\mathcal{U} = - \int_0^T \alpha(T) dT$ est une fonction convexe de T .

– *la limite de diffusion du modèle (1.50)-(1.51)-(1.52) est l'équation de diffusion à l'équilibre (1.47).*

Ce modèle est donc un modèle cinétique satisfaisant. Malheureusement, il requiert un très grand nombre de bandes étroites à l'instar de tous les modèles de même nature (cinétiques ou lancer de rayon). Pour des applications nécessitant un couplage fort, le coût de calcul d'un tel modèle devient vite prohibitif et il convient donc d'utiliser des modèles plus simples.

Modèle M_1 -multigroupe Ce modèle est décrit en détail dans [13], certaines de ses propriétés sont prouvées dans [9]. C'est une extension du modèle M_1 gris [76] qui peut être construite en deux étapes. La première consiste à considérer uniquement les moments angulaires de $I_\nu(\Omega)$. On intègre alors (1.44) et Ω .(1.44) sur S^2 pour obtenir :

$$\begin{aligned} \partial_t E(\nu) + \nabla F(\nu) &= \sigma(4\pi B_\nu(T) - E(\nu)), \\ \partial_t F(\nu) + \nabla P(\nu) &= -(\sigma + (1-g)\kappa)F(\nu), \end{aligned}$$

avec :

$$\begin{pmatrix} E(\nu) \\ F(\nu) \\ P(\nu) \end{pmatrix} = \frac{1}{c} \int_{S^2} \begin{pmatrix} 1 \\ c\Omega \\ \Omega \otimes \Omega \end{pmatrix} I_\nu(\Omega) d\Omega,$$

et g est le premier moment de la fonction de répartition du scattering. Ce système à deux moments générique dépend encore continûment de la fréquence. Par ailleurs, il fait intervenir plus d'inconnues que d'équations et on doit donc lui ajouter une hypothèse de fermeture. En pratique, cela revient à choisir une forme à $P(\nu)$ en fonction de $E(\nu)$ et $F(\nu)$.

Le choix le plus classique consiste à prendre le premier terme dans la décomposition en harmoniques sphériques. On obtient alors le modèle dit $P1$ pour lequel $P(\nu) = \frac{1}{3}E(\nu)I_d$. Ce choix a l'avantage de la simplicité car le système résultant est alors linéaire. Il donne de bons résultats lorsque $\|F(\nu)\| \ll cE(\nu)$ mais est trop frustré dans le cas contraire. Il peut prédire des situations où $\|F(\nu)\| > cE(\nu)$, ce qui ne peut pas arriver si $E(\nu)$ et $F(\nu)$ sont les deux premiers moments d'une intensité radiative positive puisque $\|\Omega\| = 1$.

En ce qui concerne le modèle M_1 , l'idée est d'utiliser un principe de minimisation d'entropie : parmi les intensités radiatives dont les deux premiers moments angulaires sont $E(\nu)$ et $F(\nu)$, on choisit celle qui minimise l'entropie radiative :

$$\mathcal{I} = \operatorname{argmin} \left\{ \langle h_R(I) \rangle / \forall \nu > 0, \int_{S^2} \begin{pmatrix} 1 \\ \Omega \end{pmatrix} I_\nu(\Omega) d\Omega = \begin{pmatrix} cE(\nu) \\ F(\nu) \end{pmatrix} \right\}.$$

La pression radiative est alors définie comme étant le deuxième moment angulaire de \mathcal{I} . Tous calculs faits, on arrive à écrire $P(\nu)$ sous une forme dite d'Eddington : $P(\nu) = E(\nu)D(\nu)$ où le tenseur d'Eddington $D(\nu)$ est donné par :

$$D(\nu) = \frac{1 - \chi(\nu)}{2} I_d + \frac{3\chi(\nu) - 1}{2} \frac{F(\nu) \otimes F(\nu)}{\|F(\nu)\|^2},$$

le facteur d'Eddington $\chi(\nu)$ étant une fonction scalaire de $E(\nu)$ et de $F(\nu)$ déterminée par les contraintes du problème de minimisation.

Une fois ce modèle intermédiaire construit, il reste à l'intégrer en fréquence. On le fait à l'intérieur de chaque groupe $[\nu_{q-1/2}, \nu_{q+1/2}[$ pour obtenir le modèle multigroupe à deux moments générique :

$$\forall q = 1 \dots Q, \quad \partial_t E_q + \nabla_x F_q = c\sigma_q^e a\theta_q^4 - c\sigma_q^a E_q, \quad (1.54)$$

$$\partial_t F_q + c^2 \nabla_x P_q = -c\sigma_q^f F_q. \quad (1.55)$$

L'énergie radiative E_q , le vecteur de flux radiatif F_q et le tenseur de pression radiative P_q sont les trois premiers moments de l'intensité radiative dans le q^{eme} groupe :

$$\begin{aligned} E_q &= \langle I \rangle_q, \\ F_q &= \langle c\Omega I \rangle_q, \\ P_q &= \langle \Omega \otimes \Omega I \rangle_q, \\ a\theta_q^4 &= \langle B(T) \rangle_q. \end{aligned}$$

Par ailleurs, σ^e , σ^a et σ^f sont des valeurs moyennes de l'opacité σ sur lesquelles nous reviendrons plus tard. Là encore, il faut faire un choix de fermeture. La stratégie M_1 , décrite dans le cas dit "gris" (*i.e.* $Q = 1$) dans [76] et étendue au cas multigroupe dans [13], consiste une nouvelle fois à utiliser un principe de minimisation d'entropie. Il permet comme précédemment de définir une intensité radiative sous-jacente \mathcal{I} :

$$\mathcal{I} = \operatorname{argmin}\{\langle h_R(I) \rangle / \forall q = 1 \dots Q \quad \langle I \rangle_q = E_q, \langle c\Omega I \rangle_q = F_q\}. \quad (1.56)$$

Ce problème de minimisation se résout pour donner une forme explicite de \mathcal{I} . On choisit alors P_q comme étant le deuxième moment de cette intensité radiative sous-jacente \mathcal{I} . On arrive encore à obtenir une forme d'Eddington par groupe $P_q := \langle \Omega \otimes \Omega \mathcal{I} \rangle_q = E_q D_q$ où le tenseur d'Eddington du q^{eme} groupe est donné par :

$$D_q = \frac{1 - \chi_q}{2} I_d + \frac{3\chi_q - 1}{2} \frac{F_q \otimes F_q}{\|F_q\|^2}, \quad (1.57)$$

le facteur d'Eddington χ_q étant un scalaire déterminé de manière unique par les contraintes. L'un des avantages de ce choix de fermeture est que l'on dispose d'une forme explicite de l'intensité radiative sous-jacente \mathcal{I} . Celle-ci est d'ailleurs très similaire à celle utilisée par Levermore pour son modèle de diffusion à flux limité [92]. Notons également que d'autres formes de fermeture basées sur des principes de minimisation d'entropie existent dans la littérature [57, 89, 101]. Elles sont toutefois basées sur des simplifications ou d'autres entropies que h_R . Enfin, d'autres formes de fermeture ont également été développées : les modèles P_N basés sur une décomposition en harmoniques sphériques ou d'autres plus spécifiques comme dans [97].

Le modèle M_1 a été largement étudié et étendu au cours des dix dernières années (*c.f.*

[14, 60, 61, 69, 77, 108]). Il possède en effet des propriétés intéressantes qui lui permettent d'être un bon choix pour certaines applications, notamment en astrophysique (voir par exemple [98, 112]). Celles qui seront particulièrement utiles pour la suite sont résumées dans le théorème suivant :

Théorème 1.6. *Le système (1.54)-(1.55) avec fermeture M_1 est hyperbolique symétrisable.*

De plus :

- l'énergie totale est conservée,
- l'entropie totale est localement dissipée,
- il dégénère en temps long et quand $\sigma \rightarrow \infty$ vers l'équation de diffusion à l'équilibre (1.47) si σ est constante,
- il préserve les états physiquement admissibles (*i.e.* $E_q > 0$ et $\|F_q\| \leq cE_q$).

Autre aspect important du modèle M_1 , sa possibilité de définir de manière cohérente les moyennes d'opacité. En effet, celles-ci sont données par :

$$\sigma_q^e = \frac{\langle \sigma B(T) \rangle_q}{a\theta_q^4}, \quad (1.58)$$

$$\sigma_q^a = \frac{\langle \sigma I \rangle_q}{E_q}, \quad (1.59)$$

$$\sigma_q^f = \begin{pmatrix} \frac{\langle \sigma \Omega^x I \rangle_q}{F_q^x} & 0 \\ 0 & \frac{\langle \sigma \Omega^y I \rangle_q}{F_q^y} \end{pmatrix}. \quad (1.60)$$

La première d'entre elles est en fait tout simplement la moyenne de Planck et est donc facilement calculable. Certaines bases de données permettent d'ailleurs de l'obtenir directement. En revanche, les autres moyennes dépendent de l'intensité radiative qui n'est évidemment pas une variable du système. *A priori*, on ne peut donc pas les exprimer simplement en fonction de E_q et F_q . Il faut donc faire une hypothèse supplémentaire pour les définir, problème d'ailleurs inhérent à tous les modèles macroscopiques. Dans la plupart des applications, la moyenne de Planck est souvent simplement choisie pour les approcher. Ce choix, judicieux dans des régimes proches du transport (*i.e.* quand $\sigma \ll 1$) se révèle malheureux dans d'autres régimes.

Dans le cas du modèle M_1 cependant, on peut utiliser l'intensité radiative sous-jacente \mathcal{I} en choisissant :

$$\sigma_q^a = \frac{\langle \sigma \mathcal{I} \rangle_q}{E_q},$$

$$\sigma_q^f = \begin{pmatrix} \frac{\langle \sigma \Omega^x \mathcal{I} \rangle_q}{F_q^x} & 0 \\ 0 & \frac{\langle \sigma \Omega^y \mathcal{I} \rangle_q}{F_q^y} \end{pmatrix}.$$

Cette définition est cohérente dans la mesure où elle est basée sur la même hypothèse que celle qui définit la fermeture du système. Elle permet une précision largement accrue à nombre de groupes constant comme on peut le voir dans [13].

Précisons toutefois que, même avec ce choix, le modèle M_1 ne possède la bonne limite de diffusion que si σ est constante (en fréquence). En pratique, on retrouve une équation de la forme souhaitée (1.47) mais avec une mauvaise moyenne d'opacité. En utilisant les

moyennes relativement à \mathcal{I} , on obtient en effet une opacité moyenne limite qui n'est pas exactement la moyenne de Rossland (les erreurs sont de l'ordre de quelques pourcents sur des cas réalistes). On rappelle que l'on peut pallier ce défaut d'une manière peu avouable en réglant le schéma numérique de manière adéquate (*c.f.* section précédente). Par ailleurs, signalons qu'on peut obtenir un modèle à deux moments dégénérant correctement vers l'équation de diffusion à l'équilibre (avec une moyenne de Rossland de l'opacité) en utilisant un principe de fermeture basé sur la minimisation du taux de production de l'entropie [67]. Cependant, ni la fermeture, ni l'intensité radiative sous-jacente n'ont alors d'expression explicite, même dans le cas gris. Un tel modèle est donc difficilement envisageable dans notre contexte.

L'extension multigroupe du modèle M_1 permet finalement une grande souplesse au niveau fréquentiel. Son principal défaut est d'être incapable de gérer plus d'une direction principale de propagation. Pour certaines applications (calcul d'un écoulement sur l'avant du bouclier d'une sonde par exemple), ce défaut est négligeable. En revanche, il peut parfois être problématique : on peut penser à des cas où on fait se croiser des lasers. Dans ce cas, il existe des extensions utilisant des moments partiels en direction. En 1D, la méthode aux demi-moments [77] (et [14] pour l'extension multigroupe) répond totalement au problème. En revanche, en dimension supérieure [79], il peut encore subsister de nombreuses configurations qui mettent en défaut le modèle. On pourrait alors considérer des modèles avec plus de moments mais ceux-ci deviennent assez vite très complexes, même dans le cas gris.

Pour terminer cette brève présentation du modèle M_1 , soulignons qu'il peut être agréable de le considérer comme l'équivalent pour l'ETR de ce que le système d'Euler est pour l'équation de Boltzmann. Même s'il existe certaines différences fondamentales entre les deux physiques (comme le découplage des directions et des fréquences), ce parallèle permet tout de même de mieux appréhender les possibilités du modèle M_1 . Le modèle M_1 peut d'ailleurs se réécrire sous une forme intéressante rappelant les équations d'Euler (voir par exemple [62]).

Modèle hybride L'idée de ce modèle, développé dans [9], est de coupler en fréquence le modèle M_1 multigroupe et le modèle cinétique (1.50)-(1.51)-(1.52). En utilisant un découpage en fréquence de la forme (1.49), il est en effet possible de choisir d'utiliser le modèle cinétique dans les bandes étroites et le modèle M_1 ailleurs. Le seul prix à payer est l'introduction d'une variable de température auxiliaire \mathcal{T} qui représente *grosso modo* la part de la température matière concernée par les échanges d'énergie avec les bandes étroites. Le modèle complet devient :

$$\forall q = 1 \dots Q, \quad \partial_t E_q + \nabla_x \cdot F_q = c[\sigma_q^e a \theta_q^4 - \sigma_q^a E_q], \quad (1.61)$$

$$\partial_t F_q + c^2 \nabla_x P_q = -c \sigma_q^f F_q, \quad (1.62)$$

$$\forall (k, l) \in [1 \dots K] \times [1 \dots L], \quad \frac{1}{c} \partial_t J_{k,l} + \Omega_l \nabla_x J_{k,l} = \sigma_k [\mathcal{B}_k(T) - J_{k,l}], \quad (1.63)$$

$$\rho C_v \partial_t (T - \mathcal{T}) = \sum_{q=1}^Q c(\sigma_q^a E_q - \sigma_q^e a \theta_q^4) \quad (1.64)$$

$$\rho C_v \partial_t \mathcal{T} = \overline{c \sigma (J - \mathcal{B}(T))} > \quad (1.65)$$

$$P_q = \langle \Omega \otimes \Omega \mathcal{I} \rangle,$$

$$\mathcal{I} = \operatorname{argmin} \left\{ \sum_q \langle h(I) \rangle_q / \forall q = 1 \dots Q, \langle I \rangle_q = E_q \text{ et } \langle c\Omega I \rangle_q = F_q \right\} \quad (1.66)$$

$$\mathcal{B} = \operatorname{argmin} \left\{ \overline{\langle h_R(I) \rangle} / \overline{\langle I \rangle} = aT^4 - \sum_{q=1}^Q a\theta_q^4 \right\}. \quad (1.67)$$

Où $\mathcal{T} = \mathcal{T}(T)$ vérifie la relation :

$$\mathcal{T} = \left(\frac{\overline{\langle \mathcal{B}(T) \rangle}}{a} \right)^{1/4}. \quad (1.68)$$

Ce modèle hybride est une généralisation à la fois du modèle M_1 multigroupe et du modèle cinétique considéré plus haut : on retrouve bien chacun de ces deux modèles en choisissant un découpage de fréquences ne consistant qu'en des groupes ou qu'en des bandes étroites. C'est un compromis intéressant pour certaines applications physiques dans lesquelles les informations importantes sont contenues dans des intervalles de fréquence étroits et peu nombreux. Le cas extrême étant celui des lasers, qui émettent dans une seule longueur d'onde.

On peut par ailleurs montrer que ce modèle hybride préserve l'asymptotique en limite de diffusion et qu'il décroît localement l'entropie totale.

Théorème 1.7. *Si $(\overline{\mathcal{Q}})_k$ sont des bandes étroites, σ_ν est constante dans chaque groupe \mathcal{Q}_q et si la quadrature $\overline{\bullet}$ intègre exactement les polynômes de degré 2, alors le modèle (1.61) – (1.67) préserve l'asymptotique en régime de diffusion à l'équilibre i.e. quand $\sigma \rightarrow \infty$, il dégénère en l'équation (1.47).*

Par ailleurs, si $(\omega_k)_k$ sont choisis judicieusement, alors le modèle (1.61) – (1.67) décroît localement l'entropie totale :

$$\partial_t \left(\langle h \rangle + \rho C_v \mathcal{U} \right) + \nabla_x \langle c\Omega h \rangle \leq 0, \quad (1.69)$$

où $\mathcal{U} = \mathcal{U}(T)$ est une fonction convexe et h_R est donnée par :

$$h = \begin{cases} h_R & \text{si } \nu \in \cup \mathcal{Q}_q \\ h_d & \text{if } \nu \in \cup \overline{\mathcal{Q}}_k \end{cases}$$

1.3.2 Couplage fort en hydrodynamique radiative

Comme il a été mentionné dans l'introduction de ce chapitre, l'application représentant le plus gros défi concerne la rentrée atmosphérique superorbitale. Les régimes physiques considérés sont parfois si extrêmes que le rayonnement a un impact significatif sur l'écoulement. Dès lors, il n'est plus question de faire des calculs découplés (les grandeurs hydrodynamiques étant des paramètres pour le rayonnement), ni même un couplage faible (*i.e.* alterner les pas d'hydrodynamique et de rayonnement, même avec une approche de type splitting adaptée [107]). Le couplage fort est cependant très délicat à mettre en œuvre à plus d'un titre.

D'une part, les vitesses caractéristiques des deux phénomènes en jeu sont extrêmement différentes : vitesse de la lumière d'un côté contre Mach certes très élevé de l'autre. On ne peut donc pas envisager d'utiliser un solveur global qui serait beaucoup trop diffusif

ou extrêmement complexe.

D'autre part, il est nécessaire de gérer des configurations physiques très différentes d'un point du domaine de calcul à l'autre. On peut bien sûr penser à la préservation de l'asymptotique en régime de transport et de diffusion pour le transfert radiatif, mais on pourrait également mentionner les régimes chimiques, la prise en compte de déséquilibres thermiques, *etc.*

Le cahier des charges du code *haradrim* [19], que j'ai développé à partir de ma deuxième année de thèse, comprenait ainsi entre autres :

- Pour le rayonnement : le modèle M_1 multigroupe avec un schéma numérique préservant l'asymptotique, la gestion du calcul des opacités moyennes.
- Pour l'hydrodynamique : configurations multi-températures, cinétique chimique complexe, turbulence.
- Dans l'ensemble : couplage fort, méthodes d'ordre 2 en espace et en temps, géométries 2D plan ou axisymétrique, maillages curvilignes.

Ce code est basé sur des modules du code ARES du CEA. Outre l'implémentation de toute la partie rayonnement, y compris l'interface avec les bases de données spectroscopiques pour le calcul des opacités, la principale difficulté a été la mise en place du couplage fort. La solution retenue a été une méthode de type Newton-Krylov sans jacobienne (JFNK) afin d'obtenir un couplage fort au moyen d'un schéma implicite [26, 39]. Le caractère implicite est crucial puisque les conditions CFL des schémas explicites restreignent les pas de temps à des grandeurs réductrices. En pratique, la méthode peut se résumer simplement de la manière suivante.

Une fois les équations discrétisées en espace et en temps, la mise à jour du vecteur des inconnues U^{n+1} nécessite la résolution d'un système non-linéaire que l'on peut écrire :

$$\Phi(U^{n+1}) = 0,$$

où Φ est une fonction complexe de U^{n+1} contenant entre autres les discrétisations. On peut dès lors appliquer une méthode de Newton pour résoudre cette équation. En choisissant une valeur initiale *ad hoc*, par exemple $U_0 := U^n$, on itère sur k la résolution du système linéaire :

$$A(\mathcal{U}_k)(U_{k+1} - U_k) = -\Phi(U_k), \quad (1.70)$$

où $A(\mathcal{U}_k)$ est la jacobienne de Φ évaluée en U_k . Cette jacobienne possède deux inconvénients majeurs : non seulement c'est une matrice de grande taille qui prend beaucoup de place à stocker, mais surtout son expression est horriblement complexe. On a donc tout intérêt à utiliser un algorithme permettant de se passer de son calcul.

Or, si on utilise une méthode de Krylov pour résoudre le système linéaire (1.70), $A(\mathcal{U}_k)$ n'intervient qu'au travers de produits matrice/vecteur. On n'a alors besoin de connaître que l'action de $A(\mathcal{U}_k)$ sur un vecteur donné. Puisque $A(\mathcal{U}_k)$ est la jacobienne de Φ , on peut dire que :

$$A(\mathcal{U}_k)z = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\Phi(\mathcal{U}_k + \varepsilon z) - \Phi(\mathcal{U}_k)}{\varepsilon},$$

et utiliser une technique de type différences finies pour l'approcher :

$$A(\mathcal{U}_k)z \simeq \frac{\Phi(\mathcal{U}_k + \varepsilon z) - \Phi(\mathcal{U}_k)}{\varepsilon},$$

pour ε assez petit. Pour de petits maillages et une physique peu complexe (par exemple coupler le modèle M_1 gris avec les équations d'Euler) et en utilisant une méthode GMRes

comme solveur de Krylov, cette technique est relativement robuste. Des préconditionnements adaptés permettent de faire passer des cas-tests particulièrement complexes et d’obtenir ainsi un solveur extrêmement robuste, même avec des pas de temps gigantesques comparés à ceux fournis par la condition CFL du schéma explicite.

Le seul inconvénient de cette technique réside dans le choix de ε : trop petit et on peut se retrouver numériquement avec $\Phi(\mathcal{U}_k + \varepsilon z) - \Phi(\mathcal{U}_k) = 0$, trop grand et $\mathcal{U}_k + \varepsilon z$ peut sortir de l’espace des états admissibles. Ce choix reste heureusement possible sans trop de difficulté en pratique.

C’est grâce à cette technique JFNK que le code *haradrim* permet de réaliser un couplage fort entre hydrodynamique et transfert radiatif. Pionnier dans ce domaine, il a permis de montrer que le couplage fort était nécessaire pour obtenir un écoulement réaliste dans certains cas de rentrée atmosphérique superorbitale [35, 36, 39]. On peut par exemple voir sur la figure 1.6 les profils de température à l’avant de la sonde Pioneer en un point de sa trajectoire d’entrée dans l’atmosphère vénusienne. On constate immédiatement des différences notables entre les températures prédites par un calcul avec ou sans rayonnement. Dans cet exemple, près de la moitié de l’énergie est perdue par rayonnement.

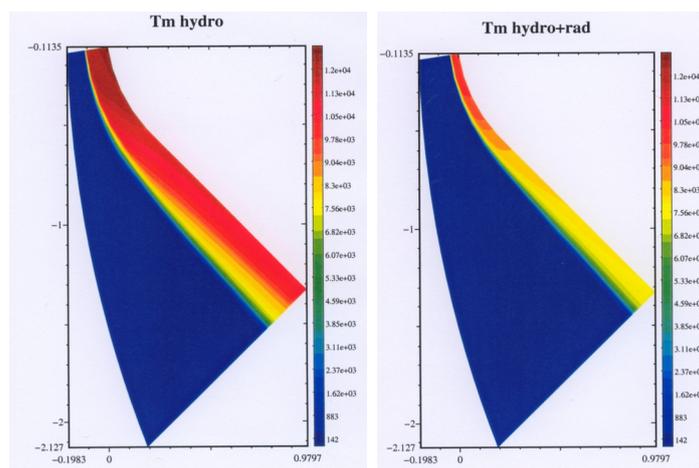


FIGURE 1.6 – Températures matière calculées : avec l’hydro seule (g), avec un couplage fort (d).

Depuis les premiers résultats fournis par le code, la méthode JFNK est devenue populaire. Elle a même été réutilisée avec succès dans un cadre de couplage hydrodynamique/rayonnement [95, 103].

1.3.3 Radiothérapie

La radiothérapie est une des applications essentielles du transfert radiatif. Son but est de détruire des cellules cancéreuses en les exposant à de fortes doses de rayonnement. Bien entendu, le principal défi est de préserver les cellules saines voisines de la tumeur cible. A cet effet, on positionne successivement le rayon selon différents angles bien choisis. Cette notion de ”bien choisi“ se repose sur un calcul basé sur des scanners du patient, ce calcul étant à l’heure actuelle basé sur des méthodes très simplifiées. L’objectif est donc de proposer un moyen d’obtenir des résultats plus précis tout en conservant un coût de calcul assez faible pour obtenir des résultats en temps réel *in situ*.

Le modèle M_1 semble donc être un choix adapté à ce problème. On pourra se référer à [78] pour une description détaillée de la manière dont il est construit dans ce cas et pour plus de détails sur la physique mise en jeu. Au final, il s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \partial_\varepsilon(\rho S \Psi^0) - \nabla \cdot \Psi^1 &= 0, \\ \partial_\varepsilon(\rho S \Psi^1) - \nabla \cdot D_\varepsilon\left(\frac{\Psi^1}{\Psi^0}\right) \Psi^0 &= \rho T \Psi^1, \end{aligned} \quad (1.71)$$

où l'ensemble des états admissible est :

$$\Omega = \{^t(\Psi^0, \Psi^1) \in \mathbb{R}^{d+1}, \Psi^0 > 0, \frac{\|\Psi^1\|}{\Psi^0} < 1\}. \quad (1.72)$$

Les fonctions $S(\mathbf{x}, \varepsilon)$ et $T(\mathbf{x}, \varepsilon)$ appelées *Stopping power* et coefficient de transport dépendent du milieu et du type de particules émises. Le tenseur d'Eddington D_ε n'est autre que :

$$D_\varepsilon(f) = \frac{1 - \chi(f)}{2} I_d + \frac{3\chi(f) - 1}{2} \frac{f}{\|f\|} \otimes \frac{f}{\|f\|}, \quad (1.73)$$

avec $f = \Psi^1/\Psi^0$ pour tout $^t(\Psi^0, \Psi^1)$ dans Ω . Enfin, le facteur d'Eddington du modèle M_1 gris $\chi(f)$ est toujours défini par :

$$\chi(f) = \frac{3 + 4\|f\|^2}{5 + 2\sqrt{4 - 3\|f\|^2}}. \quad (1.74)$$

On obtient ainsi un système de lois de conservation avec terme source qui possède deux particularités.

Tout d'abord, la variable ε représente l'énergie des particules mais on peut l'assimiler à un temps pour retrouver un cadre mathématiquement plus familier. Le problème de Cauchy est complété par la condition "initiale" suivante :

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \Psi^0(\mathbf{x}, \varepsilon) = 0, \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \Psi^1(\mathbf{x}, \varepsilon) = 0, \quad (1.75)$$

Il s'agit d'une condition à l'infini, le problème doit donc être résolu de manière rétrograde en ε .

Deuxième caractéristique importante de ce système, la densité ρ est une fonction de x obtenue grâce au scanner. C'est une donnée du problème discontinue et qui possède de grandes variations spatiales. En effet, elle est très faible dans l'air et voisine de 1 dans les tissus. Cette variation pose un problème du point de vue numérique : un schéma "usuel" appliqué directement à (1.71) sera très diffusif.

Un schéma numérique adapté est proposé dans [7]. Il se base sur un changement de variables dans l'espace des phases $(\mathbf{x}, \varepsilon)$ afin de contrer l'effet de distorsion introduit par ρ et S , responsable des difficultés numériques. A cette fin, on pose :

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}(\varepsilon) &= \int_0^\varepsilon \frac{1}{S(t)} dt, \\ \tilde{x}(x) &= \int_0^x \rho(t) dt.. \end{aligned}$$

Ces changements de variables sont bien définis car ρ et S sont positives. Dès lors, si on réécrit le système (1.71) dans les nouvelles variables $(\tilde{x}, \tilde{\varepsilon})$, on obtient :

$$\begin{aligned} \partial_{\tilde{\varepsilon}} \tilde{\Psi}^0(\tilde{x}, \tilde{\varepsilon}) - \partial_{\tilde{x}} \tilde{\Psi}^1(\tilde{x}, \tilde{\varepsilon}) &= 0, \\ \partial_{\tilde{\varepsilon}} \tilde{\Psi}^1(\tilde{x}, \tilde{\varepsilon}) - \partial_{\tilde{x}} \left(\tilde{\Psi}^0(\tilde{x}, \tilde{\varepsilon}) \chi\left(\frac{\tilde{\Psi}^1(\tilde{x}, \tilde{\varepsilon})}{\tilde{\Psi}^0(\tilde{x}, \tilde{\varepsilon})}\right) \right) &= \tilde{T}(\tilde{\varepsilon}) \tilde{\Psi}^1(\tilde{x}, \tilde{\varepsilon}), \end{aligned}$$

où $\tilde{\Psi}^{0,1}(\tilde{x}, \tilde{\varepsilon}) = S(\varepsilon)\Psi^{0,1}(x, \varepsilon)$ et $\tilde{T}(\tilde{\varepsilon}) = T(\varepsilon)$. Le système obtenu rentre alors aisément dans le formalisme (1.15) et on peut donc lui appliquer un schéma préservant l'asymptotique du type de ceux décrits plus haut sur un maillage uniforme. Le schéma obtenu étant parfaitement adapté aux distorsions induites par ρ et S , il donne d'excellents résultats et est totalement satisfaisant en 1D.

En dimension supérieure, le changement de variables en \tilde{x} n'est toutefois plus possible en général (sauf bien entendu si ρ ne dépend que d'une seule variable). On doit donc modifier le schéma 1D pour qu'il puisse s'étendre en 2D et 3D. Pour ce faire, on choisit deux maillages : l'un pour discrétiser l'espace en x (noté \mathcal{M}) et l'autre pour discrétiser l'espace en \tilde{x} (noté $\tilde{\mathcal{M}}$). Pour plus de simplicité on les choisit tous deux uniformes dans leurs variables respectives et comportant le même nombre de cellules. La mise à jour de la variable $\mathcal{U} = (\Psi^0, \Psi^1)^\top$ s'obtient alors de la manière suivante :

1. On projette la solution \mathcal{U}^{p+1} , constante par maille sur \mathcal{M} , afin d'obtenir une solution $\tilde{\mathcal{U}}^{p+1}$ constante par maille sur $\tilde{\mathcal{M}}$.
2. On applique le schéma numérique défini sur le système (1.3.3) pour obtenir une solution approchée constante par maille sur $\tilde{\mathcal{M}}$.
3. Cette solution $\tilde{\mathcal{U}}^p$ constante par maille sur $\tilde{\mathcal{M}}$ est alors reprojétée sur \mathcal{M} pour obtenir une solution constante par maille sur \mathcal{M} qui définit la mise à jour \mathcal{U}^p .

Le schéma numérique résultant de cette procédure donne évidemment des résultats légèrement moins précis que celui sans projection. En revanche, il peut s'étendre en dimension supérieure. Dans ce cas, le maillage étant cartésien -ce qui est naturel car les données des scanners sont elles-mêmes fournies sur des pixels/voxels-, on peut appliquer la procédure en alternant les directions x et y . Pour être plus précis, en 2D, on fait d'abord un changement de variables pour obtenir des \tilde{x} dans chaque colonne du maillage, on y applique le schéma 1D dans la direction des x , puis on fait un changement de variables en \tilde{y} dans chaque ligne et on y applique le schéma 1D dans la direction y .

On montre que ce schéma avec projections possède de bonnes propriétés et qu'il permet d'obtenir de bonnes approximations de la solution. On pourra se référer aux simulations effectuées dans [7], en particulier la comparaison avec une solution exacte sur un cas-test axisymétrique très raide.

La méthode remplit son objectif en donnant des résultats satisfaisants pour un temps de calcul faible à partir de données médicales. On peut voir un exemple sur la figure 1.7. Les comparaisons avec un code Monte-Carlo donnent des erreurs relatives de l'ordre de quelques pourcents, dues essentiellement aux hypothèses prises pour construire le modèle M_1 .

1.3.4 Rayonnement dans les nuages

Le rayonnement dans les nuages est l'une des sources d'erreur principale dans les prédictions climatiques. Or, les calculs utilisant un problème de Cauchy usuel pour l'équation du transfert radiatif donnent de mauvais résultats comparés à l'expérience. Il semble nécessaire de prendre en compte la structure du milieu *i.e.* de considérer que les gouttelettes se répartissent en amas plutôt que de manière uniforme. En faisant intervenir une variable de "mémoire" s représentant le libre parcours moyen, on obtient un modèle hyperbolique en considérant cette variable s comme un pseudo-temps. Celui-ci est complété par une condition initiale particulière dans le sens où elle fait intervenir une moyenne

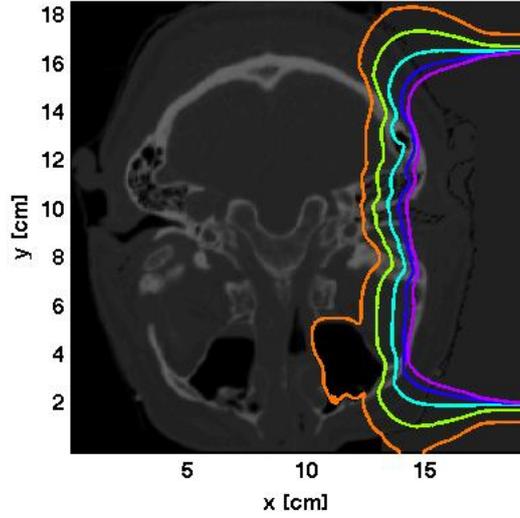


FIGURE 1.7 – Isovaleurs de la dose de radiations.

temporelle de la solution. Le modèle M_1 s'écrit alors [1] :

$$\begin{aligned} \partial_s E + \varepsilon \nabla F &= 0, & \partial_s F + \varepsilon \nabla \chi(E, F) E &= 0; \\ E(0, x) &= \varepsilon^2 \langle s \rangle Q(x) + (1 - \kappa \varepsilon^2) \int_0^\infty p(s) E(s, x) ds, & F(0, x) &= 0, \end{aligned}$$

où $Q = Q(x)$ est donnée, p est la probabilité de scattering et $\chi(E, F) = \chi(F/E)$ est le facteur d'Eddington M_1 habituel :

$$\chi(f) = \frac{3 + 4f^2}{5 + 2\sqrt{4 - 3f^2}}.$$

Quand $\varepsilon \rightarrow 0$, ce modèle dégénère vers l'équation limite physique, en l'occurrence (*c.f.* [80] pour des détails sur l'obtention de cette équation à partir de l'ETR) :

$$-\frac{1}{3} \left(\frac{\langle s^2 \rangle}{2} + \frac{\bar{\mu}_0}{1 - \bar{\mu}_0} \right) \Delta E + \kappa E = \langle s \rangle Q(x), \quad (1.76)$$

où $\langle s^k \rangle$ est le k^e moment de la fonction de probabilité p .

On propose dans [1] une technique numérique préservant l'asymptotique qui permet d'approcher les solutions de ce problème. Tout d'abord, on construit le schéma numérique suivant :

$$\begin{aligned} \frac{E_i^{n+1} - E_i^n}{\Delta s} + \varepsilon \frac{F_{i+1}^n - F_{i-1}^n}{2\Delta x} - \varepsilon^2 \frac{E_{i+1}^n - 2E_i^n + E_{i-1}^n}{2\Delta x} &= 0, \\ \frac{F_i^{n+1} - F_i^n}{\Delta s} + \varepsilon \frac{P_{i+1}^n - P_{i-1}^n}{2\Delta x} - \varepsilon^2 \frac{F_{i+1}^n - 2F_i^n + F_{i-1}^n}{2\Delta x} &= 0, \\ E_i^0 &= (1 - \kappa \varepsilon^2) \sum_n^\infty \omega_n p_n E_i^n \Delta s + \varepsilon^2 \langle s \rangle Q(x), & F_i^0 &= 0, \end{aligned} \quad (1.77)$$

On montre que ce schéma possède de bonnes propriétés :

Théorème 1.8. *Le schéma numérique (1.77) préserve l'asymptotique. De plus, il existe un pas de temps $\Delta t_0 > 0$ tel que si $\Delta t < \Delta t_0$ alors le schéma (1.77) préserve l'espace des états physiquement admissibles $\Omega = \{(E, F)/E > 0, \|\frac{F}{E}\| < 1\}$.*

Remarque 1.2. *L'expression du pas de temps Δt_0 "optimal" n'est pas explicite en général. On peut néanmoins le minorer assez facilement.*

Remarque 1.3. *Le schéma (1.77) coïncide avec le schéma HLL lorsque $\varepsilon = 1$. Au fur et à mesure que ε décroît vers 0 il possède de moins en moins de viscosité numérique et ne vérifie plus le principe du maximum pour ε assez petit. Cette propriété n'est cependant pas nécessaire à la limite puisque les solutions de l'équation limite (1.76) sont assez régulières pour éviter les oscillations parasites.*

On itère alors la résolution complète du système en utilisant une condition initiale recalculée à partir de l'itération précédente. Le procédé est d'ordre 1 mais peut être assez long si la prédiction initiale est très éloignée de la solution du problème. Pour initialiser efficacement cette itération externe, on choisit d'utiliser comme prédiction la solution donnée par le modèle $P1$. Grâce à la linéarité du modèle $P1$, celle-ci est en effet donnée par une EDO du second ordre simple.

A titre d'exemple, la figure 1.8 montre les valeurs de la dose d'énergie rayonnée dans un nuage. Cet exemple est tiré d'un benchmark du groupe de travail NASA I3RC (i3rc.gsfc.nasa.gov).

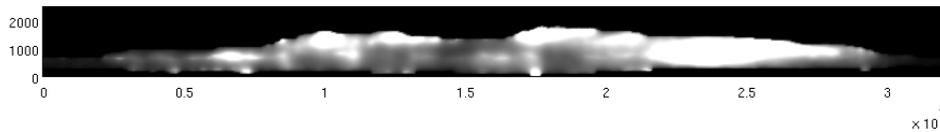


FIGURE 1.8 – Rayonnement dans les nuages - valeurs de $\Pi = \langle E \rangle$.

1.4 Un schéma numérique GRP espace-temps pour les systèmes hyperboliques linéaires

Les méthodes de type ordonnées discrètes ou décomposition en harmoniques sphériques appliquées à des équations cinétiques résultent en des systèmes linéaires de taille souvent non négligeable (pour des questions de précision). En transfert radiatif, les méthodes S_N sont souvent couplées avec des modèles de type bandes étroites qui rendent les systèmes associés de très grande taille.

Les modèles P_N , quant à eux, peuvent être utilisés dans des cadres de couplage avec la matière lorsque le contexte angulaire est complexe. Dans ce cas, il est nécessaire d'avoir un N assez grand pour conserver une représentation angulaire correcte, en particulier dans les régimes proches du transport (celui-ci n'est totalement pris en compte qu'à la limite $N \rightarrow \infty$). A titre d'exemple, dans [46] le modèle P_{15} est considéré comme raisonnable.

Dans ces deux cas, il est nécessaire de disposer de solveurs implicite d'ordre très élevé. En effet, on aimerait pouvoir réduire considérablement le temps de calcul en utilisant

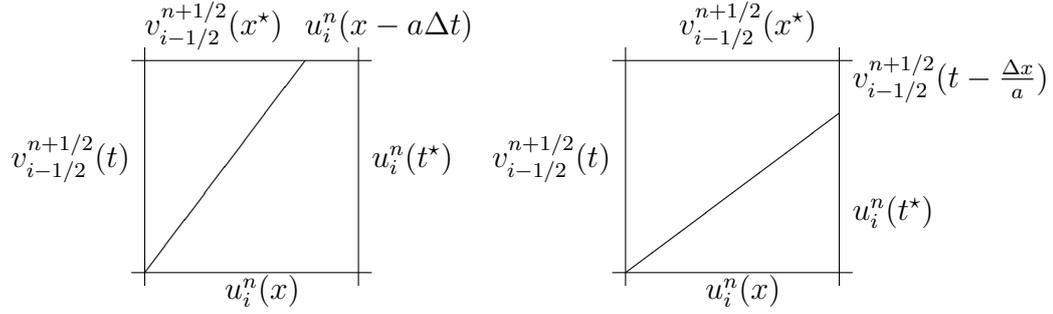


FIGURE 1.9 – Solutions exactes dans les cas $|a|\Delta t < \Delta x$ (g.) et $|a|\Delta t > \Delta x$ (d.) avec $x^* := t^{n+1} - \frac{x - x_{i-1/2}}{a}$ et $t^* := x_{i+1/2} - a(t - t^n)$.

des pas de temps largement supérieurs à la condition CFL standard. Or, s'il existe de nombreuses techniques explicites pour obtenir des schémas numériques d'ordre arbitrairement élevé : Galerkin discontinu, WENO, reconstructions MUSCL,... (voir par exemple [41–43, 68, 91]), le passage à l'implicite reste problématique (par exemple en nécessitant l'emploi de boucles de convergence externes comme dans [87]).

L'objet de l'article [2] est ainsi de construire de tels schémas d'ordre arbitrairement élevés sans limitation sur le pas de temps. Pour ce faire, on développe une extension espace/temps des schémas GRP. Ceux-ci ont été développés pour obtenir des schémas d'ordre 2 pour les équations d'Euler [50, 52] et largement étendus à d'autres cas depuis (pour plus de détails sur les schémas GRP, voir [51]). Ils consistent en une extension du schéma de Godunov obtenue en considérant à chaque interface du maillage les solutions de problèmes de Riemann étendus à des solutions initialement linéaires par morceaux (au lieu de constantes par morceaux pour Godunov).

L'aspect linéaire des problèmes qui nous intéressent ici permet de connaître l'évolution exacte de nos solutions approchées au cours d'un pas de temps, ce qui autorise la construction de schémas GRP étendus d'ordre arbitrairement élevé en espace. L'innovation de [2] par rapport aux schémas GRP usuels est de considérer à la fois une approximation polynomiale de degré k en espace dans chaque cellule aux temps t^n , mais également une seconde approximation polynomiale de degré k , en temps cette fois, associée aux interfaces du maillage pendant chaque pas de temps. On utilise alors un algorithme qui peut se résumer ainsi :

1. **approximation** On considère une approximation de la solution qui soit un polynôme de degré k en espace par maille aux temps $t^n = n\Delta t$. On considère également une approximation qui soit un polynôme de degré k en temps par intervalle de temps aux interfaces.
2. **évolution** On fait évoluer la solution ainsi approchée de manière exacte dans un volume de contrôle pendant un pas de temps (*c.f.* figure 1.9).
3. **moyenne** On projette sur nos espaces d'approximation pour obtenir les mises à jour.

Grâce à la linéarité des problèmes, la deuxième étape ne requiert que des arguments géométriques. Une fois déterminé le sens de parcours (par exemple en 1D de la gauche vers la droite si la vitesse est positive), il suffit de faire les évolutions maille par maille. La

troisième étape se résout assez simplement en utilisant les conditions de Petrov-Galerkin. Au final, on obtient un schéma qui requiert dans chaque maille la résolution d'un système linéaire de taille environ k^d entièrement défini par les données géométriques du problème et le pas de temps considéré. Si ce dernier respecte la condition $|a|\Delta t < \Delta x$, on retrouve en 1D le schéma de Dai et Woodward [71]. Ce dernier est toutefois basé sur des considérations différentes et ne s'étend pas au cas de pas de temps généraux (mais permet de prendre en compte des non-linéarités). L'avantage principal du schéma [2] est que les projections en temps permettent d'obtenir un schéma compact d'ordre k en espace et en temps quel que soit le pas de temps. La figure 1.10 montre deux résultats 1D obtenus avec en particulier une comparaison pour l'ordre 3 avec les méthodes WENO et Galerkin discontinu (méthodes limitées au cas explicite ou dont les extensions sont très complexes à coder). Même si le principe du maximum n'est bien entendu pas complètement respecté (contrairement à d'autres méthodes efficaces en temps court comme [74]), le schéma a un excellent comportement quel que soit le pas de temps, y compris en temps très long.

L'extension 2D générale est assez complexe, mais si on se restreint à des maillages composés exclusivement de triangles et qu'on utilise des formules de quadrature *ad hoc* pour calculer les intégrales, il se code sans difficulté majeure. Par ailleurs, les matrices des systèmes linéaires en jeu ne font intervenir que des données géométriques. Elles peuvent donc être construites et inversées une bonne fois pour toutes en début de code. La figure 1.11 montre les domaines de dépendance dans les cas une cible. Les appellations "implicite" et "explicites" sont utilisées abusivement par souci de simplicité, les mises à jour étant toujours explicitement connues quel que soit le pas de temps.

A titre d'exemple, la figure 1.12 présente les solutions obtenues par les schémas d'ordre 1,2 et 3 dans le cas de l'advection d'un cercle à vitesse $a = 5$ avec une condition CFL de 10 après un temps de 3,6s. On peut constater que la solution est parfaitement restituée pour $k = 2$. La diffusion numérique est légèrement plus importante dans la direction de l'advection et les coupes dans cette direction montrent des résultats comparables au cas 1D.

Ce schéma donne donc entière satisfaction. Il est bien entendu légèrement moins précis qu'une méthode GRP standard quand le pas de temps devient très grand à cause des multiples projections sur les interfaces. En revanche, il reste d'ordre arbitrairement élevé, très compact et permet de plus de prendre facilement en compte des conditions aux limites dépendant du temps. Pour plus d'exemples numériques, on pourra se référer à [2] où l'on montre que le terme source peut facilement être pris en compte en utilisant une méthode de splitting.

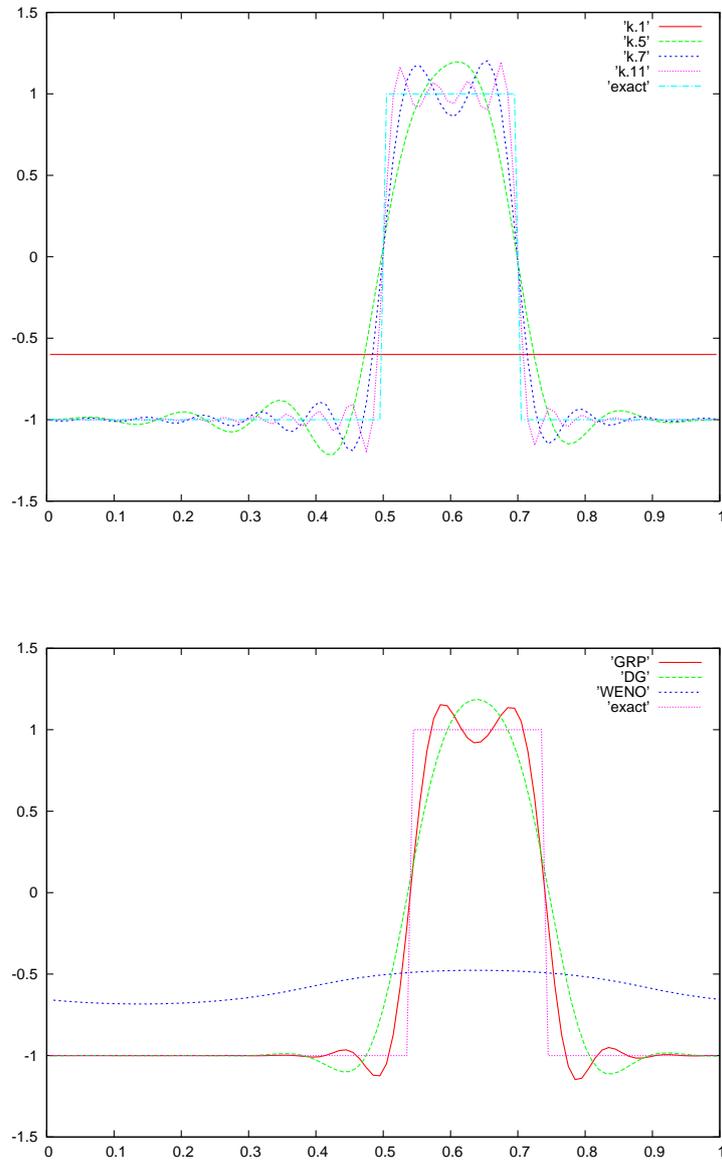


FIGURE 1.10 – Exemples 1D du schéma GRP espace-temps. Influence de l'ordre dans le cas $|a|\Delta t > \Delta x$ (g.) et comparaison avec WENO et Galerkin discontinu dans le cas $|a|\Delta t < \Delta x$ (d.).

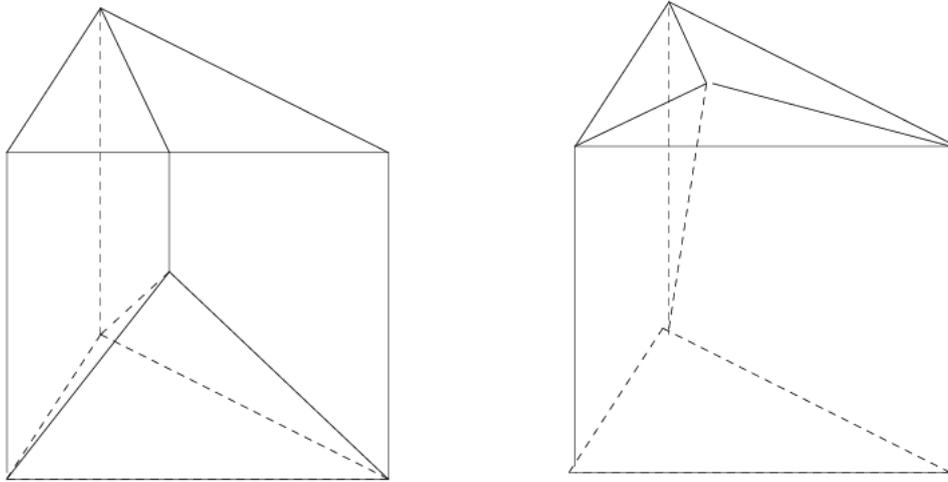


FIGURE 1.11 – Schéma GRP espace-temps en 2D : domaines de dépendance dans les cas une cible “implicite” (g) et “explicite” (d).

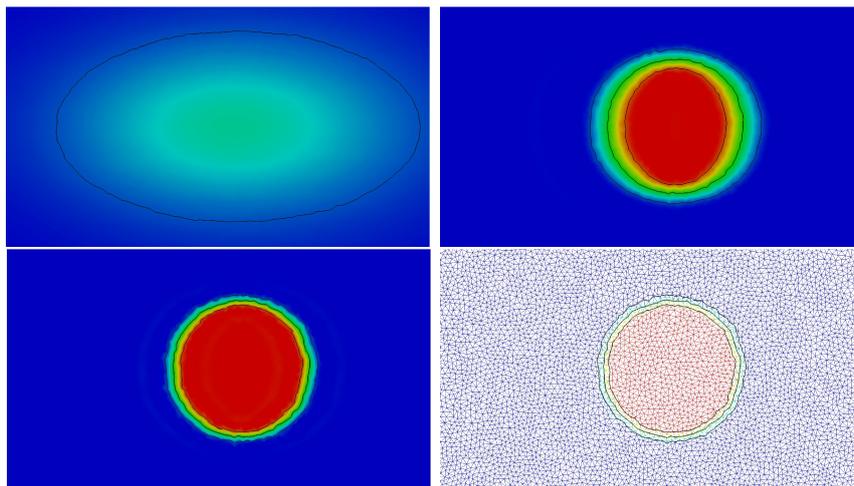


FIGURE 1.12 – Exemple 2D du schéma GRP espace-temps. Zoom de la solution obtenue avec les schémas d’ordre 1, 2 et 3 et maillage utilisé.

Chapitre 2

Électrocardiologie

Introduction

Ce chapitre est consacré à la simulation numérique de l'électrocardiogramme (ECG). Celui-ci est la conséquence directe de la propagation des signaux électriques dans le cœur. L'objectif de mes travaux en la matière est d'obtenir *in fine* un code de calcul capable de produire des simulations réalistes. Ce code [20] est essentiellement développé en collaboration avec Y. Coudière dans le cadre du projet MOMME.

Il existe déjà des codes permettant de simuler des ECG, mais les difficultés rencontrées lors de la création d'un tel code sont multiples de la modélisation jusqu'aux aspects de calcul scientifique. C'est pourquoi de nombreuses simplifications sont effectuées, certaines valides uniquement proches du fonctionnement normal. Notre but est de proposer un outil permettant d'étudier une large gamme de comportements pathologiques tout en garantissant la fiabilité des résultats et en réduisant au maximum le rapport précision/temps de calcul.

Après une présentation des modèles mettant en lumière les difficultés rencontrées, je détaille dans ce chapitre les trois principales nouveautés introduites dans [20] ou son ancêtre [21], développé pendant la thèse de C. Pierre : un schéma numérique adapté, un modèle de couplage muscle/réseau de conduction rapide et une méthode pour le calcul rapide d'ECG ou d'électrogrammes. Enfin, un dernier paragraphe présente un travail effectué en collaboration avec des biologistes et des médecins pour lesquels un code de calcul comme [20] s'avère d'une aide précieuse.

Notons que dans la suite, les effets mécaniques (contraction musculaire) ne seront pas pris en compte. Des modèles satisfaisants permettant de simuler ces effets mécaniques existent par ailleurs moyennant la connaissance de la concentration en ions Ca^{2+} dans le domaine. Un couplage entre ces modèles et un code comme [20] est donc tout à fait envisageable, moyennant un effort de codage conséquent.

2.1 Présentation

L'électrocardiogramme (ECG) est une mesure indirecte, à la surface du thorax, de l'activité électrique cardiaque. En effet, le thorax pouvant être considéré comme électriquement neutre, le signal électrique à la surface du cœur génère un champ électrique caractéristique

qui peut être mesuré et interprété par les médecins.

En fonctionnement normal, le signal électrique se propage dans le cœur comme indiqué sur la figure 2.1. Issu du nœud sinusal, il se propage d'abord dans les oreillettes puis atteint les ventricules en passant par un réseau de conduction rapide. En regardant de plus près cette même figure 2.1, on constate que chaque zone a un comportement différent.

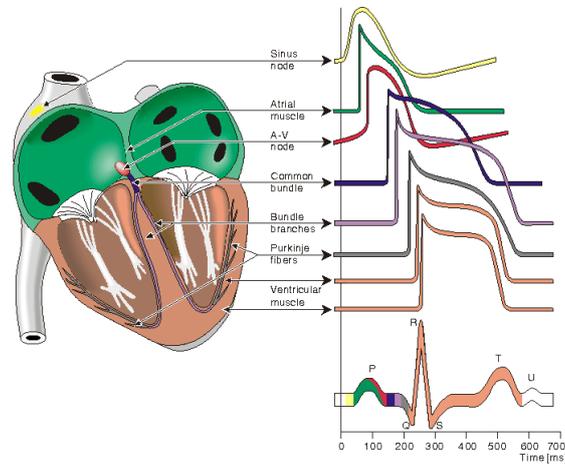


FIGURE 2.1 – Propagation du signal électrique dans le cœur.

2.1.1 Mécanismes cellulaires

Du point de vue de l'électrophysiologie, les phénomènes les plus importants à l'échelle microscopique se passent au niveau de la membrane cellulaire. Cette membrane est constituée de deux couches de phospholipides qui lui permettent d'isoler parfaitement les milieux intracellulaire - ou cytoplasme- et extracellulaires (*c.f.* figure 2.2).

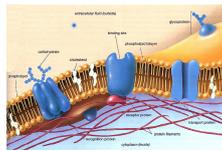


FIGURE 2.2 – La membrane cellulaire.

Les échanges entre ces deux milieux sont rendus possibles par la présence de protéines dans la membrane. Ce sont ces protéines qui différencient les cellules. Extrêmement nombreuses et diverses, elles permettent de transférer des ions d'un côté à l'autre de la membrane sous certaines conditions. A titre d'exemple, on voit sur la figure 2.3 une telle protéine dans deux états différents. Dans ce cas précis, sous l'action d'une différence de potentiel (ddp) assez importante, la protéine permet pendant un certain temps de laisser passer les ions Ca^{2+} .

Grâce aux protéines, des ions peuvent traverser la membrane, créant ainsi un courant. Pour un ion X donné, la loi d'Ohm donne :

$$i_X = g_X(V - E_X),$$

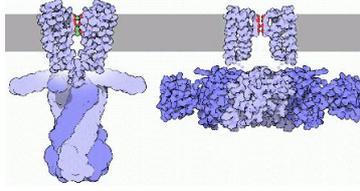


FIGURE 2.3 – Une protéine au repos (g) et en action (d).

où g_X est la conductance associée au passage de l'ion X grâce aux protéines considérées, V est la différence de potentiel transmembranaire et E_X est le potentiel d'équilibre de l'ion X donné par la loi de Nernst :

$$E_X = \frac{RT}{F} \ln \frac{[X]_i}{[X]_e}.$$

Ici, $[X]_{i,e}$ est la concentration intracellulaire (resp. extracellulaire) de l'ion X ; R , T et F sont la constante des gaz parfaits, la température et la constante de Faraday.

Au repos, les concentrations intra et extracellulaires des ions sont différentes. Il en résulte que la différence de potentiel transmembranaire $V = \phi_i - \phi_e$, où $\phi_{i,e}$ représentent respectivement les potentiels intra et extracellulaires, est non nulle.

La principale difficulté dans la modélisation provient de la conductance g_X . En effet, celle-ci évolue entre 0 et une valeur maximale $g_{m,X}$ de manière très différente selon les protéines considérées. Pour la décrire, on utilise le formalisme d'Hodgkin et Huxley :

$$i_X = g_{m,X} f(V, \dots) (V - E_X), \quad (2.1)$$

où $f(V, \dots)$ est une fonction comprise entre 0 et 1 qui est exprimée grâce à des variables dites de porte, elles-mêmes solutions d'équations différentielles. Par exemple, dans le cas du canal sodique, on peut écrire :

$$\begin{aligned} i_{Na} &= g_{Na} m^3 h j (V - E_X), \\ \frac{dm}{dt} &= \alpha_m m + \beta_m (1 - m), \\ \frac{dh}{dt} &= \alpha_h h + \beta_h (1 - h), \\ \frac{dj}{dt} &= \alpha_j j + \beta_j (1 - j), \end{aligned}$$

les paramètres α et β étant déterminés par l'expérience.

Le courant transmembranaire $I_{ion}(V, w)$, somme des courants associés à chaque type de protéine pris en considération, dépend donc de V ainsi que d'un vecteur w contenant les variables de porte, mais aussi d'autres variables déterminées par des EDO comme concentrations. Ce vecteur w est donc lui-même solution d'une EDO de la forme :

$$\frac{dw}{dt} + g(V, w) = 0. \quad (2.2)$$

2.1.2 Les modèles bidomaine et monodomaine

Le modèle bidomaine est le modèle de référence pour la propagation de signaux électriques dans des tissus (pour plus de précisions sur tous les modèles, voir [138]). Pour

l'obtenir, on commence par écrire la loi d'Ohm au niveau cellulaire avec hypothèse de quasistaticité pour exprimer les flux de courant intra et extracellulaires $j_{i,e}$:

$$\begin{aligned} j_i &= -\sigma_i \nabla \phi_i, \\ j_e &= -\sigma_e \nabla \phi_e, \end{aligned}$$

où $\sigma_{i,e}$ représentent les conductivités intra et extracellulaires. Le milieu étant isolé, on a $\text{div}(j_e) = -\text{div}(j_i)$ et donc :

$$\text{div}(\sigma_i \nabla \phi_i) = -\text{div}(\sigma_e \nabla \phi_e).$$

Par ailleurs, en écrivant le flux de courant transmembranaire, on obtient :

$$C \partial_t V + I_{ion} = \text{div}(\sigma_i \nabla \phi_i),$$

où C est la capacité de membrane.

Les équations au niveau de l'organe sont obtenues en effectuant une homogénéisation [140]. On considère que les deux milieux intra et extracellulaire recouvrent chacun la totalité du cœur. C'est pourquoi on parlera de modèle bidomaine. En utilisant le couple de variables (V, ϕ_e) au lieu de (ϕ_i, ϕ_e) , il s'écrit :

$$\text{div}(G_i \nabla V) = -\text{div}((G_i + G_e) \nabla \phi_e), \quad (2.3)$$

$$A(C \partial_t V + I_{ion}) = \text{div}(G_i \nabla (V + \phi_e)). \quad (2.4)$$

Le processus d'homogénéisation a eu pour effet d'une part l'introduction d'un paramètre A représentant le taux de surface de membrane par unité de volume, d'autre part la transformation des conductivités $\sigma_{i,e}$ en des tenseurs de conductivité $G_{i,e}$. Ceux-ci proviennent de la structure en fibre des muscles, notamment ventriculaires (voir figure 2.4). Ils sont très anisotropes et non colinéaires.

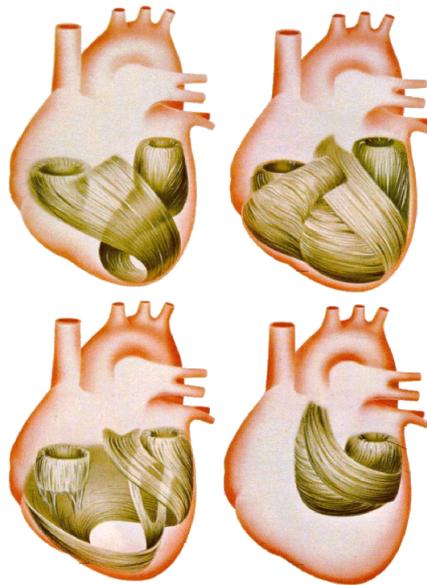


FIGURE 2.4 – Structure en fibres des ventricules.

Le modèle bidomaine représente de manière très fine l'évolution du potentiel transmembranaire. Il est admis depuis une quinzaine d'années qu'il possède la complexité nécessaire pour obtenir une propagation du potentiel d'action réaliste dans certains cas (voir [125–127]). De plus, il a récemment été prouvé qu'il était bien posé [120]. Il possède en revanche un coût numérique élevé puisqu'il faut à chaque pas de temps résoudre l'équation d'équilibre 2.3. Une simplification répandue consiste à considérer que les tenseurs G_i et G_e sont proportionnels. Dans ce cas, l'équation 2.3 permet d'isoler ϕ_e en fonction de V et on obtient le modèle dit monodomaine :

$$A(C\partial_t V + I_{ion}(V, w)) = \operatorname{div}(G\nabla V) \quad \text{in } \Omega, \quad (2.5)$$

où G est un tenseur de conductivité moyen. Le modèle monodomaine est assez souvent suffisant pour représenter la propagation de V (voir [135]). Par ailleurs, un choix judicieux de G permet d'améliorer sensiblement la qualité du modèle monodomaine (par exemple la moyenne harmonique de G_i et G_e , voir [121]).

Pour obtenir un ECG, il faut connaître le potentiel à la surface du thorax. Pour ce faire, on le considère comme électriquement neutre et on y résout une équation de Poisson. Les conditions aux limites cœur/thorax permettent de coupler cette équation de Poisson avec le modèle bidomaine. Une hypothèse raisonnable (mais pas forcément canonique) consiste à considérer que le potentiel dans le thorax prolonge le potentiel extracellulaire. Le modèle dit bidomaine couplé s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\sigma_i \nabla V) &= -\operatorname{div}\left((G_i + G_e)\nabla\phi_e\right) \text{ dans } H, \\ A\left(C\partial_t V + I_{ion}\right) &= \operatorname{div}(G_i \nabla(V + \phi_e)) \text{ dans } H, \\ \operatorname{div}(G_0 \nabla\phi_0) &= 0 \text{ dans } T, & (2.6) \\ G_0 \nabla\phi_0 \cdot n &= 0 \text{ sur } \partial T, & (2.7) \\ G_0 \nabla\phi_0 \cdot n &= -G_e \nabla\phi_e \cdot n \text{ sur } \partial T \cap \partial H. & (2.8) \end{aligned}$$

Il ne faut pas oublier que l'équation (2.4) contient le courant ionique I_{ion} qui est donné par des modèles faisant intervenir entre autres un certain nombre d'équations différentielles ordinaires (parfois plusieurs dizaines!). Chaque modèle étant *a priori* adapté à un type de tissu donné (et même à un animal donné), un calcul complet doit en faire intervenir plusieurs (oreillettes, ventricules, nœud sinusal, réseau de conduction rapide,...). Plusieurs difficultés proviennent de ce terme :

- Tout d'abord, ces modèles sont en général construits pour une cellule isolée. Certains phénomènes ne sont donc pas pris en compte au niveau du tissu.
- Par ailleurs, ces modèles ne sont pas toujours compatibles entre eux dans le sens où la juxtaposition de deux modèles donnés est problématique. Par exemple, l'équilibre n'est pas toujours conservé. La diffusion entraîne également fréquemment des problèmes pour coupler de tels modèles : une diffusion trop importante peut en effet empêcher V d'atteindre le seuil important pour le terme de réaction..
- Au niveau numérique, il est très difficile d'obtenir un schéma en temps d'ordre élevé à cause de la complexité de certains modèles (et surtout de leur dépendance en V).

Par ailleurs, les comportements cellulaires sont très différents d'une zone à l'autre. L'exemple le plus caractéristique provient du réseau de conduction rapide, qui permet de propager le signal électrique depuis le nœud atrioventriculaire jusqu'aux ventricules. Ce réseau, isolé du muscle sauf en ses extrémités, a de plus une structure d'arbre. Outre les

difficultés de juxtaposition de ces cellules avec celles des ventricules, le mailler finement est d'autant plus impensable que la localisation exacte des ses terminaisons n'est pas connue. On proposera donc dans le deuxième paragraphe un modèle 1D/3D le couplant efficacement avec le muscle.

Le premier paragraphe est consacré à un schéma numérique de type volumes finis à dualité discrète permettant de bien gérer les fortes anisotropies des tenseurs de conductivité. Enfin, on présente une méthode intégrale afin de calculer l'ECG sans avoir à résoudre l'équation de Poisson (2.6) dans le thorax, ce qui permet un gain de temps de calcul appréciable.

2.2 Un schéma DDFV pour l'électrocardiologie

Le modèle bidomaine est difficile à résoudre numériquement. L'une des difficultés provient du fait que les tenseurs de conductivité $G_{i,e}$ sont très anisotropes. Or, même en considérant l'hypothèse monodomaine $G_i = \lambda G_e$, l'enroulement des fibres cardiaques ne permet pas un changement de métrique approprié. On doit donc utiliser dans les simulations un schéma numérique capable de prendre correctement en compte ces anisotropies. A l'occasion des travaux de thèse de C. Pierre [142], nous avons proposé un schéma de type DDFV (pour *Discrete-Duality Finite Volumes*) adapté qui a été publié dans [11]. L'idée des schémas DDFV [114, 116, 123, 129, 132, 136] est d'utiliser deux (ou parfois trois) maillages afin d'obtenir une discrétisation des gradients qui soit affine par morceaux. Les gradients n'étant pas définis uniquement dans une seule direction, comme c'est par exemple le cas du schéma volumes finis "classique" VF4 [133], la présence d'anisotropies ne dégrade pas la qualité du schéma.

D'autres types de schémas permettent de prendre en compte les anisotropies : c'est le cas du schéma dit diamant [130], de schémas de types différences finies mimétiques (voir par ex. [119]) et d'autres schémas VF comme par exemple [134]. On peut trouver des comparaisons de l'efficacité de ces méthodes dans les comptes-rendus des conférences FVCA5 et FVCA6 où l'on s'aperçoit que les schémas DDFV sont parmi les plus compétitifs.

Ce paragraphe sera dévoué à la construction d'un schéma DDFV en 2 et 3 dimensions d'espace, tel qu'il est développé dans [11]. Par souci de simplicité de présentation, on cherchera à approcher les solutions de :

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}(G\nabla\varphi) &= f \text{ in } \Omega, \\ \varphi &= g \text{ on } \partial\Omega_D, \\ G\nabla\varphi \cdot \mathbf{n} &= h \text{ on } \partial\Omega_N, \end{aligned} \tag{2.9}$$

où $\partial\Omega = \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N$. Afin d'assurer l'unicité de la solution, on supposera $\partial\Omega_D$ de mesure non nulle. De plus, $G = G(x)$ est un tenseur anisotrope symétrique éventuellement discontinu.

Notations Avant de détailler la forme des opérateurs discrets, il est nécessaire de préciser les notations utilisées. Celles-ci sont en effet relativement lourdes.

On considère un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ où $d = 2$ ou 3 . On définit également les ensembles suivants :

- ★ \mathcal{M} est le maillage dit *primaire*. C'est un maillage volumes finis classique composé de polyèdres. Un polyèdre générique de \mathcal{M} sera noté K ou L dans la suite. Le centre de gravité de K sera noté x_K .
- ★ \mathcal{F} est l'ensemble des faces. Il est composé des interfaces entre les mailles primaires et des faces sur le bord :

$$\mathcal{F} = \{K \cap L / K, L \in \mathcal{M}\} \cup \{\partial\Omega \cap \partial K, K \in \mathcal{M}\}.$$

On notera dans la suite σ un élément générique de \mathcal{F} et x_σ son centre de gravité. Pour des questions de simplicité de définition, dans le cas $d = 3$, on supposera que \mathcal{F} n'est composé que de triangles ou de quadrilatères.

- ★ χ est l'ensemble des nœuds du maillage. Un nœud générique sera noté A .

A ces trois ensembles viennent s'ajouter pour des schémas DDFV :

- ★ \mathcal{D} est l'ensemble des polyèdres appelés *diamants*. Pour une cellule $K \in \mathcal{M}$ et une face $\sigma \in \mathcal{F}$ telle que $\sigma \in \partial K$, le diamant associé, noté $D_{\sigma,K}$, est le triangle (ou la pyramide si $d = 3$) de base σ et de sommet x_K .
- ★ ν est l'ensemble des cellules dites *secondaires*. Ces cellules, associées à chaque sommet sont construites de la manière suivante :
 - Si $d = 2$, la cellule secondaire associée au sommet A est la réunion des triangles de sommets (A, x_K, x_σ) pour toutes les faces dont A est un sommet et toutes les cellules primaires dont σ est une face.
 - Si $d = 3$, la cellule secondaire associée au sommet A est la réunion des polyèdres notés $T_{A,\sigma,K}$. Ces polyèdres sont la réunion des deux tétraèdres de sommets (A, x_σ, x_K, B) et (A, x_σ, x_K, C) où σ est une face de K dont B , A et C sont des sommets consécutifs (cf. figure 2.5).

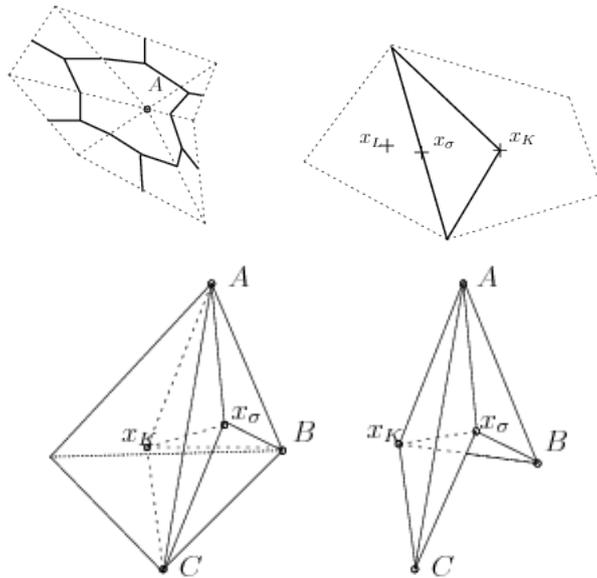


FIGURE 2.5 – (h) Définition des cellules secondaires (g) et diamants (d) en 2D. (b) Définition des cellules secondaires en 3D.

Remarque 2.1. Les termes primaire/secondaire ont été préférés à primal/dual. Quand $d = 2$, on aurait pu utiliser la seconde terminologie. En revanche, quand $d = 3$, le choix des mailles secondaires fait que l'ensemble de celles-ci recouvre deux fois le domaine Ω . On retrouvera d'ailleurs de ce fait un coefficient $d-1$ quand on devra mesurer les volumes. Notons qu'il existe également des schémas DDFV basés sur trois maillages quand $d = 3$ [117, 128].

Remarque 2.2. Les diamants définis ci-dessus permettent de considérer des discontinuités de G au niveau des interfaces. C'est pourquoi on n'utilise que la moitié des volumes généralement appelés diamants dans des cas où G est continu.

Remarque 2.3. Les différents maillages et les définitions d'opérateurs en 2D coïncident pour tous les schémas DDFV. On se retrouve alors dans le cadre des travaux pionniers d'Hermeline et Domelevo-Omnès [132, 136].

Remarque 2.4. Pour les cellules secondaires, la notation A représentera selon les cas soit la cellule elle-même, soit le nœud auquel elle est associée.

Les discrétisations des tenseurs et des vecteurs sont définies sur les diamants. Le tenseur de conductivité moyen sur un diamant $D_{\sigma,K}$ est naturellement donné par :

$$G_{\sigma,K} = \frac{1}{|D_{\sigma,K}|} \int_{D_{\sigma,K}} G(x) dx.$$

Les données vectorielles quant à elles appartiennent à l'espace noté Q des vecteurs constants par diamant et vérifiant la condition de conservativité du flux suivante : $q \in Q$ si :

$$\forall \sigma = K \cap L \in \mathcal{F}, G_{\sigma,K} q_{\sigma,K} \cdot \mathbf{n}_\sigma = G_{\sigma,L} q_{\sigma,L} \cdot \mathbf{n}_\sigma,$$

où \mathbf{n}_σ est une normale unitaire à σ . On définit le produit scalaire suivant sur Q :

$$\forall q^1, q^2 \in Q, (q^1, q^2)_Q = \int_{\Omega} q^1 \cdot q^2 dx = \sum_{D \in \mathcal{D}} q_D^1 \cdot q_D^2 |D|.$$

Les données scalaires sont définies sur l'ensemble noté \mathcal{U} des éléments ayant une valeur (réelle constante) sur chaque cellule primaire et sur chaque cellule secondaire. Pour $\varphi \in \mathcal{U}$, on notera φ_K la valeur de φ associée à une cellule primaire $K \in \mathcal{M}$ et φ_A la valeur de φ associée à une cellule secondaire $A \in \nu$. On définit alors sur \mathcal{U} le produit scalaire suivant :

$$\forall \varphi^1, \varphi^2 \in \mathcal{U} : (\varphi^1, \varphi^2)_\mathcal{U} = \frac{1}{d} \left(\sum_{K \in \mathcal{M}} \varphi_K^1 \varphi_K^2 |K| + \sum_{A \in \nu} \varphi_A^1 \varphi_A^2 |A| \right).$$

On peut remarquer que si $d = 3$, la contribution des cellules secondaires à ce produit scalaire est deux fois plus importante que celle des cellules primaires (puisqu'elles recouvrent deux fois le domaine). Dans tous les cas, on a bien $(1, 1)_\mathcal{U} = |\Omega|$. Toutes ces définitions précisées, on peut maintenant décrire notre choix de construction du schéma.

Le schéma et ses propriétés L'important pour un schéma DDFV est de bien construire les opérateurs discrets. Ces schémas sont faits pour que la définition des gradients soit naturelle. Il reste ensuite à être attentif sur la construction de la divergence, ce qui permet d'obtenir une formule de Green discrète de laquelle ces schémas tirent leur nom.

Le premier opérateur à construire est donc le gradient discret $\nabla_h : \mathcal{U} \mapsto Q$, c'est-à-dire qu'on construit un gradient constant par diamant à partir de valeurs associées à chaque cellule primaire et secondaire. Pour cela, on divise le maillage, pour $d = 2$ en triangles de sommets (x_K, x_σ, A) où A est un sommet de σ et pour $d = 3$ en tétraèdres de sommets (x_K, x_σ, A, B) où A et B sont des sommets de σ . A partir de $\varphi \in \mathcal{U}$, on définit alors la fonction $\bar{\varphi}$ comme étant l'unique fonction affine par morceaux sur cette subdivision du maillage qui interpole φ en tous les sommets de ces triangles (tétraèdres). Dès lors, le gradient discret est défini sur chaque diamant $D_{\sigma,K}$ par :

$$(\nabla_h \varphi)_{\sigma,K} = \frac{1}{|D_{\sigma,K}|} \int_{D_{\sigma,K}} \nabla \bar{\varphi} dx.$$

Grâce à la condition de conservativité du flux imposé à chaque élément de Q , on est en mesure d'exprimer les variables auxiliaires φ_σ et donc de calculer explicitement l'expression de ce gradient discret en fonction des valeurs de φ et des données géométriques.

Proposition 2.1. *Pour $K \in \mathcal{M}$ et $\sigma \in \mathcal{F}$, on note $(A_i)_{i=1,m}$ les sommets de σ . L'expression du gradient discret associé au diamant $D_{\sigma,K}$ correspondant est alors donnée par :*

Si $\mathbf{d}=2$ en notant \cdot^\top la rotation d'angle $\pi/2$:

$$(\nabla_h \varphi)_{\sigma,K} = \frac{1}{2|D_{\sigma,K}|} (\varphi_\sigma - \varphi_K) \mathbf{N}_{\sigma,K} + \frac{1}{2|D_{\sigma,K}|} (\varphi_{A_2} - \varphi_{A_1}) \mathbf{N}_{1,2},$$

avec :

$$\mathbf{N}_{\sigma,K} = -(A_2 - A_1)^\top, \quad \mathbf{N}_{1,2} = (x_\sigma - x_K)^\top.$$

Si $\mathbf{d}=3$ en prenant la convention que $i + m = 1$ et que les nœuds A_i sont notés de manière consécutive :

$$(\nabla_h \varphi)_{\sigma,K} = \frac{1}{3|D_{\sigma,K}|} (\varphi_\sigma - \varphi_K) \mathbf{N}_{\sigma,K} + \frac{1}{3|D_{\sigma,K}|} \sum_{i=1}^m \varphi_i (\mathbf{N}_{i-1} - \mathbf{N}_{i+1}),$$

avec :

$$\begin{aligned} \mathbf{N}_{\sigma,K} &= \int_\sigma \mathbf{n}_{\sigma,K} ds = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (A_i - x_\sigma) \wedge (A_{i-1} - x_\sigma) \\ \mathbf{N}_i &= \frac{1}{2} (x_K - x_\sigma) \wedge (A_i - x_\sigma). \end{aligned}$$

On montre que cette expression du gradient est injective au sens où si $\varphi = 0$ sur $\partial\Omega_D$ alors :

$$\nabla_h \varphi = 0 \Rightarrow \varphi = 0.$$

Les expressions obtenues pour les gradients discrets sont finalement assez naturelles *a posteriori*. Les principales difficultés au niveau du codage résident dans la construction et la gestion de toutes les données géométriques.

Maintenant que l'on a défini le gradient discret, il reste à construire la divergence discrète de façon à ce qu'un équivalent discret du théorème de Green soit disponible. La divergence

discrète est un opérateur $Q \mapsto \mathcal{U}$. Elle est simplement définie en se basant sur la formule de Stokes, pour $q \in Q$, par :

$$\begin{aligned} \forall K \in \mathcal{M}, \operatorname{div}_K q &= \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \mathcal{F}_K} q_{\sigma,K} \cdot \mathbf{N}_{\sigma,K}, \\ \forall A \in \nu, \operatorname{div}_A q &= \frac{1}{|A|} \sum_{D_{\sigma,K} \ni A} q_{\sigma,K} \cdot \mathbf{N}_{A\sigma,K}, \end{aligned}$$

où $\mathbf{N}_{A\sigma,K}$ est la normale unitaire à ∂A extérieure à A dans $D_{\sigma,K}$.

Ces choix du gradient et de la divergence discrets permettent bien d'obtenir une formule de Green discrète :

Théorème 2.1. *Étant données des valeurs discrètes du gradient et de la divergence définies ci-dessus, on a :*

$$\forall \varphi \in \mathcal{U}, \forall q \in Q, (q, \nabla_h \varphi)_Q + (\operatorname{div}_h q, \varphi)_\nu = \langle \varphi, q \cdot \mathbf{n} \rangle_{h,\partial\Omega},$$

où la trace discrète est définie par :

$$\langle \varphi, q \cdot \mathbf{n} \rangle_{h,\partial\Omega} = \int_{\partial\Omega} \bar{\varphi}(q \cdot \mathbf{n}) ds,$$

et φ est la fonction affine par morceaux définie plus haut.

Remarque 2.5. *La trace discrète s'exprime également en fonction de q , φ et des données géométriques du problème. Son expression n'est pas précisée ici mais figure dans [11].*

Une fois ces opérateurs discrets définis, le schéma numérique pour l'équation (2.9) s'écrit de manière compacte sous la forme :

$$-\operatorname{div}_h(G_h \nabla_h u) = f_h.$$

Cette écriture, ainsi que la formule de Green discrète permettent de prolonger au niveau discret de nombreuses propriétés du problème continu. Les démonstrations sont alors souvent des adaptations directes des preuves en continu (voir par exemple [115]).

Ce schéma, qui fut le premier de type DDFV à être étendu en 3D, possède un bon comportement général (commun à toutes les variantes DDFV). En particulier, on a super-convergence dans des configurations de maillages raisonnables. La contrainte étant que les diagonales du polygone obtenu en réunissant les deux diamants associés à une même interface σ se coupent en leur milieu. Numériquement, on constate une convergence légèrement meilleure qu'avec des éléments finis P_1 ayant autant d'inconnues.

Le code [21] utilise ce schéma pour résoudre le modèle bidomaine couplé en 2D et 3D. La bonne prise en compte des anisotropies permet entre autres d'avoir une bonne approximation des flux sur l'épicaarde et donc d'obtenir des ECG plus précis.

La figure 2.6 montre quelques exemples de calculs en 2D et 3D, ainsi que d'électrocardiogrammes.

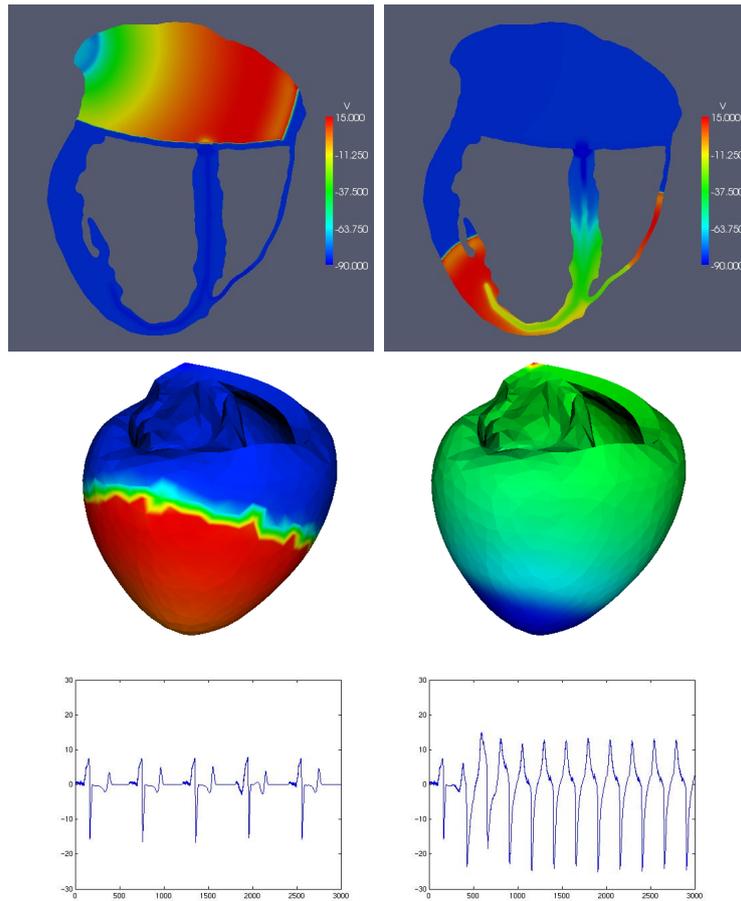


FIGURE 2.6 – Quelques exemples de calculs avec le schéma DDFV. (h) : cas 2D à partir d'une image segmentée, (m) : cas 3D (cœur isolé) sur un maillage des ventricules, (b) : exemples d'ECG - cas normal et tachycardie.

2.3 Modélisation du réseau de conduction rapide

Le réseau de conduction rapide se compose du nœud atrioventriculaire (AV), du faisceau de His et des fibres de Purkinje. Son importance est capitale. Il permet le passage du courant des oreillettes vers les ventricules. Structuré en forme d'arbre -le tronc représenté par le faisceau de His et les branches par les fibres de Purkinje-, il est isolé des tissus qui l'environnent sauf en ses extrémités : le nœud AV d'une part et les jonctions Purkinje-muscle (PMJ) d'autre part. Grâce à lui, le signal électrique arrive de manière presque synchrone sur une large part des ventricules assurant ainsi, au travers de la contraction cardiaque, les battements caractéristiques du cœur.

Il est donc capital de modéliser correctement ce réseau de conduction rapide. Plusieurs obstacles doivent cependant être surmontés pour le faire correctement. Tout d'abord, à l'échelle de l'organe, sa structure est essentiellement 1D et il est très difficile de le mailler de manière satisfaisante. Par ailleurs, les terminaisons des fibres de Purkinje ne sont pas clairement identifiables que ce soit par imagerie ou même par chirurgie. Au niveau de celles-ci semble se trouver des zones où coexistent, à l'instar du nœud sinusal, des cellules de plusieurs types (muscle/Purkinje). Enfin, le comportement électrique de cet arbre est très spécifique : isolé du muscle sur toute sa longueur et permettant le passage du courant uniquement aux extrémités.

Ces obstacles ont été un frein au développement de modèles satisfaisants décrivant non seulement le faisceau de conduction rapide, mais aussi son interaction avec le muscle. On trouvera une revue récente de tels modèles dans [146]. Beaucoup d'entre eux utilisent des automates cellulaires qui sont basés sur des hypothèses simplificatrices et phénoménologiques sur le couplage entre les cellules. Quelques modèles considèrent un couplage entre des modèles monodomaine 1D pour le faisceau de conduction rapide et 3D pour le muscle [124, 147]. Le couplage y est alors réalisé en considérant certains nœuds du maillage comme des cellules individuelles et les PMJ comme des conductances entre ces nœuds et les terminaisons de l'arbre de Purkinje. De telles procédures ne permettent pas de prendre en compte des effets importants comme l'effet d'échelle entre le courant 1D sortant des fibres de Purkinje et le courant 3D dans le muscle.

Une nouvelle approche a été proposée dans [5]. Elle est basée sur l'utilisation du modèle monodomaine à la fois en 3D dans le muscle et en 1D dans le faisceau de conduction rapide. Les PMJ y sont vues comme un volume contenant une certaine surface de cellules de type Purkinje. Ce modèle ne fait intervenir que deux paramètres pour décrire les PMJ : la surface de cellules de type Purkinje par unité de volume (à rapprocher du facteur A dans (2.5)) et la conductance par unité de surface des PMJ. Il est décrit de manière détaillée dans les paragraphes suivants.

2.3.1 Modèle monodomaine sur un réseau 1D

Le réseau de conduction rapide est défini par un arbre noté $H = (V, E)$ dont les $n + 1$ nœuds appartiennent à $V = \{x_i, i = 0 \dots x_n\} \subset \mathbf{R}^d$ ($d = 2, 3$) et les arêtes à $E \subset \{(x, y) \in V \times V\}$. Cet arbre peut aussi être défini comme un ensemble de segments reliant deux nœuds de V :

$$H = \bigcup_{e=(x,y) \in E} \{tx + (1-t)y, t \in (0, 1)\}.$$

Bien que l'on considère des segments par souci de simplicité, notons que l'on pourrait choisir n'importe quels chemins réguliers. L'arbre H possède $p + 1$ sommets que l'on numérotera x_0 (nœud AV) et $\{x_1, \dots, x_p\}$ (terminaisons des fibres de Purkinje) : *c.f.* figure 2.7(b). On a évidemment $0 < p \leq n$.

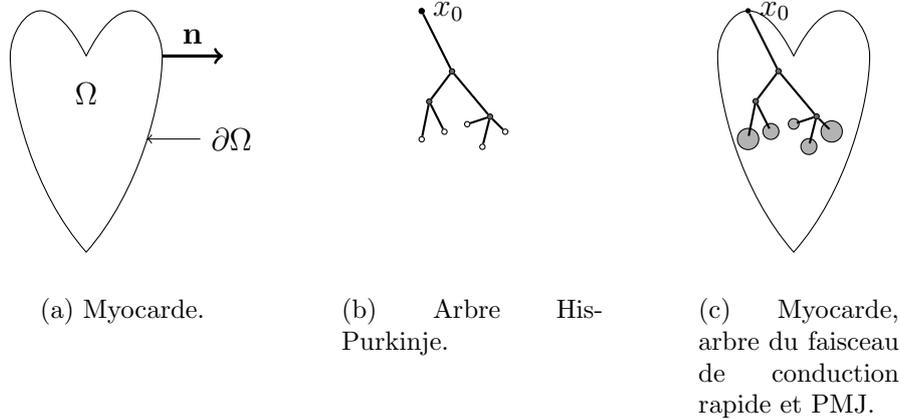


FIGURE 2.7 – Les différents niveaux de modélisation.

Sur H , on suppose que la propagation du potentiel d'action le long d'une arête $e = (x, y)$ de E peut être modélisée par le modèle monodomaine (2.5) avec un modèle ionique (2.2) *ad hoc* (par exemple le modèle de DiFrancesco et Noble [131]). Au niveau de chaque nœud de H , la conservation des charges dans le domaine isolé H implique l'utilisation de la loi de Kirchoff.

L'inconnue sur l'arbre H est notée (V^H, w^H) . C'est une suite de fonctions inconnues 1D $V^H = (V_e)_{e \in E}$ et $w^H = (w_e)_{e \in E}$. Ces fonctions sont donc solution des équations (2.5) et (2.2) sur chaque arête de E et de la loi de Kirchoff à chaque nœud de H :

$$\forall x \in V, \quad \sum_{e \in E(x)} G_e(x) \nabla V_e(x) \cdot \mathbf{n}_e = 0 \quad (2.10)$$

où $E(x)$ est l'ensemble des arêtes $e = (x, y)$ dont x est un sommet et $\mathbf{n}_e = (x - y)/|x - y|$ est le vecteur unitaire colinéaire à e et sortant de e au point considéré (*c.f.* figure 2.8(a)).

Aux extrémités de l'arbre $\partial H = \{x_1, \dots, x_p\}$ ainsi qu'en x_0 , $E(x)$ contient une unique arête et la condition (2.10) devient une condition aux limites de type Neumann.

De même, le coefficient de conductivité $G^H = (G_e)_{e \in E}$ est une suite de fonctions 1D définies sur les arêtes $e \in E$. Notons qu'il peut être discontinu. Les autres paramètres du modèle monodomaine sont également des suites de paramètres définis sur les nœuds $e \in E$: $A^H = (A_e)_e$, $C^H = (C_e)$, $I_{\text{ion}}^H = (I_{\text{ion},e})$, $g^H = (g_e)$.

Pour finir, on suppose l'existence de solutions $V^H = (V_e)_{e \in E}$ et $w^H = (w_e)_{e \in E}$ qui sont continues à chaque sommet $x \in V$ de telle sorte que l'on puisse définir un potentiel $V^H(x)$ pour chaque nœud $x \in V$.

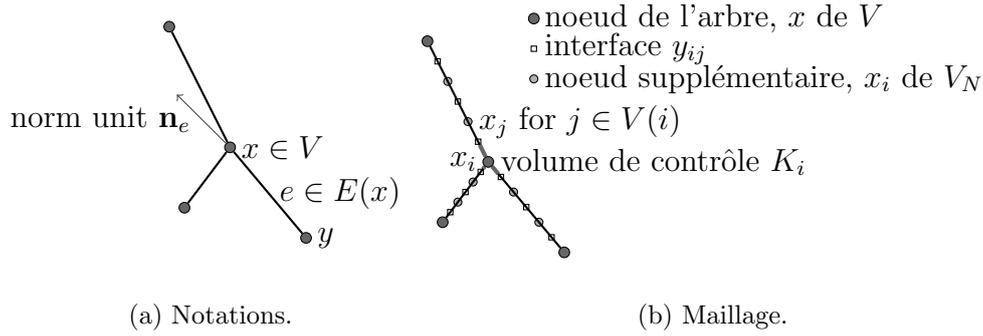


FIGURE 2.8 – L'arbre His-Purkinje.

2.3.2 Les jonctions Purkinje-Muscle (PMJ)

Grâce au modèle défini au paragraphe précédent, on peut calculer la propagation du potentiel d'action dans le muscle et dans le réseau de conduction rapide en utilisant un modèle monodomaine 1D d'une part et 3D de l'autre. Il reste maintenant à modéliser l'interaction entre ces deux modèles.

Pour ce faire, on suppose que le couplage a uniquement lieu *via* des jonctions Purkinje-Muscle (PMJ), localisées autour des extrémités $x_1, \dots, x_p \in \partial H$ de l'arbre His-Purkinje. Cette hypothèse représente raisonnablement la physiologie du cœur humain (pour certains petits mammifères, le faisceau de His n'est pas isolé du muscle). On rappelle par ailleurs que la microstructure des terminaisons des fibres de Purkinje est difficile à décrire précisément (*c.f.* [118, 124, 146]). On suppose qu'elles sont réparties de manière homogène dans des régions autour des nœuds $x_i \in \partial H$. On associe par conséquent à chacun de ces points x_i une région PMJ notée $\Omega_i \subset \Omega$, de volume $|\Omega_i| > 0$, représentant le volume dans lequel les dernières cellules de Purkinje s'étendent dans le muscle autour du point x_i (*c.f.* figure 2.7(c)). On note S_i la surface de fibres de Purkinje dans une telle jonction et e l'arête de E dont x_i est un sommet. Le courant sortant de H en x_i est alors donné par :

$$J_i = S_i (G_e(x_i) \nabla V_e(x_i) \cdot \mathbf{n}_i). \quad (2.11)$$

Ici, $V_e(x_i)$ est le potentiel transmembranaire moyen des cellules de Purkinje dans la région Ω_i .

Par ailleurs, le potentiel transmembranaire moyen des cellules cardiaques dans la région Ω_i est donné par :

$$\langle V \rangle_i = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} V(x) dx. \quad (2.12)$$

En supposant que les PMJ se comportent comme une conductance (comme dans [124, 146]), la relation de couplage dans la région Ω_i s'écrit :

$$J_i = g_i (\langle V \rangle_i - V_e(x_i)) \quad (2.13)$$

où g_i est la conductance de la i ème PMJ. Cette équation est une condition aux limites pour le modèle monodomaine dans H .

Enfin, la conservation des charges implique l'ajout d'un terme source volumétrique s_i

dans les équations du monodomaine dans le muscle Ω . Il s'écrit :

$$s_i(x) = \begin{cases} s_i := \frac{S_i}{|\Omega_i|} G_e(x_i) \nabla V_e(x_i) \cdot \mathbf{n}_i & \text{si } x \in \Omega_i, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.14)$$

Remarque 2.6. Puisque $\frac{S_i}{|\Omega_i|}$ est le taux de surface de la PMJ par unité de volume, il joue un rôle similaire au coefficient A de l'équation (2.5).

Le modèle complet d'un muscle 2D/3D Ω couplé à un arbre His-Purkinje 1D s'écrit finalement :

$$A(C\partial_t V + I_{\text{ion}}(V, w)) + \sum_{i=1}^p s_i = \text{div}(G\nabla V) \quad \text{dans } \Omega, \quad (2.15)$$

$$\partial_t w + g(V, w) = 0 \quad \text{dans } \Omega, \quad (2.16)$$

$$G\nabla V \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega, \quad (2.17)$$

$$A_e(C_e\partial_t V_e + I_{\text{ion},e}(V_e, w_e)) = \text{div}(G_e\nabla V_e) \quad \text{sur } e, \forall e \in E, \quad (2.18)$$

$$\partial_t w_e + g_e(V_e, w_e) = 0 \quad \text{sur } e, \forall e \in E, \quad (2.19)$$

$$\sum_{e \in E(x)} G_e(x) \nabla V_e(x) \cdot \mathbf{n}_e = 0 \quad \forall x \in V \setminus \partial H, \quad (2.20)$$

$$G_e(x_i) \nabla V_e(x_i) \cdot \mathbf{n}_i = \frac{g_i}{S_i} (\langle V \rangle_i - V_e(x_i)) \quad i \in \{1, \dots, p\} \quad (2.21)$$

avec s_i donné par l'équation (2.14). On remarque donc que le couplage est alors entièrement décrit par deux paramètres : la conductance par unité de surface de la PMJ $\frac{g_i}{S_i}$ et le taux de surface de membrane des cellules Purkinje par unité de volume $\frac{S_i}{|\Omega_i|}$.

2.3.3 Résultats numériques

Ce modèle de PMJ permet assez naturellement de construire un code de couplage muscle/réseau de conduction rapide. En pratique, il suffit de rajouter le terme source de couplage pour les équations dans les ventricules, puis un schéma numérique pour la partie conduction rapide. On peut ainsi envisager d'utiliser des méthodes numériques différentes dans ces deux zones. Dans [5], on propose par exemple un schéma basé sur un code éléments finis dans le ventricule et volumes finis dans les fibres de Purkinje. La figure 2.9 montre des exemples sur une géométrie simplifiée dans un cas normal et pour un bloc de branche à gauche (la conductivité de la partie gauche de l'arbre His/Purkinje est nulle). Le modèle donne des résultats satisfaisants en permettant notamment de parfaitement gérer les propagations que ce soit antérogrades ou rétrogrades. La seule difficulté est l'estimation des paramètres $\frac{g_i}{S_i}$ et $\frac{S_i}{|\Omega_i|}$. Pour les calculs présentés sur la figure 2.9, on a utilisé respectivement 300 mS.cm^{-1} et 500 cm^{-1} , valeurs qui semblent raisonnables à la fois *a priori* et *a posteriori* mais qui devront être évaluées par l'expérience pour réaliser des simulations réalistes d'un point de vue physiologique.

Notons enfin que la rapidité et la stabilité du code a permis par exemple d'effectuer des simulations d'optimisation de placement d'électrodes pour pallier un comportement pathologique, l'algorithme d'optimisation nécessitant de résoudre plusieurs fois le problème avec différentes configurations.

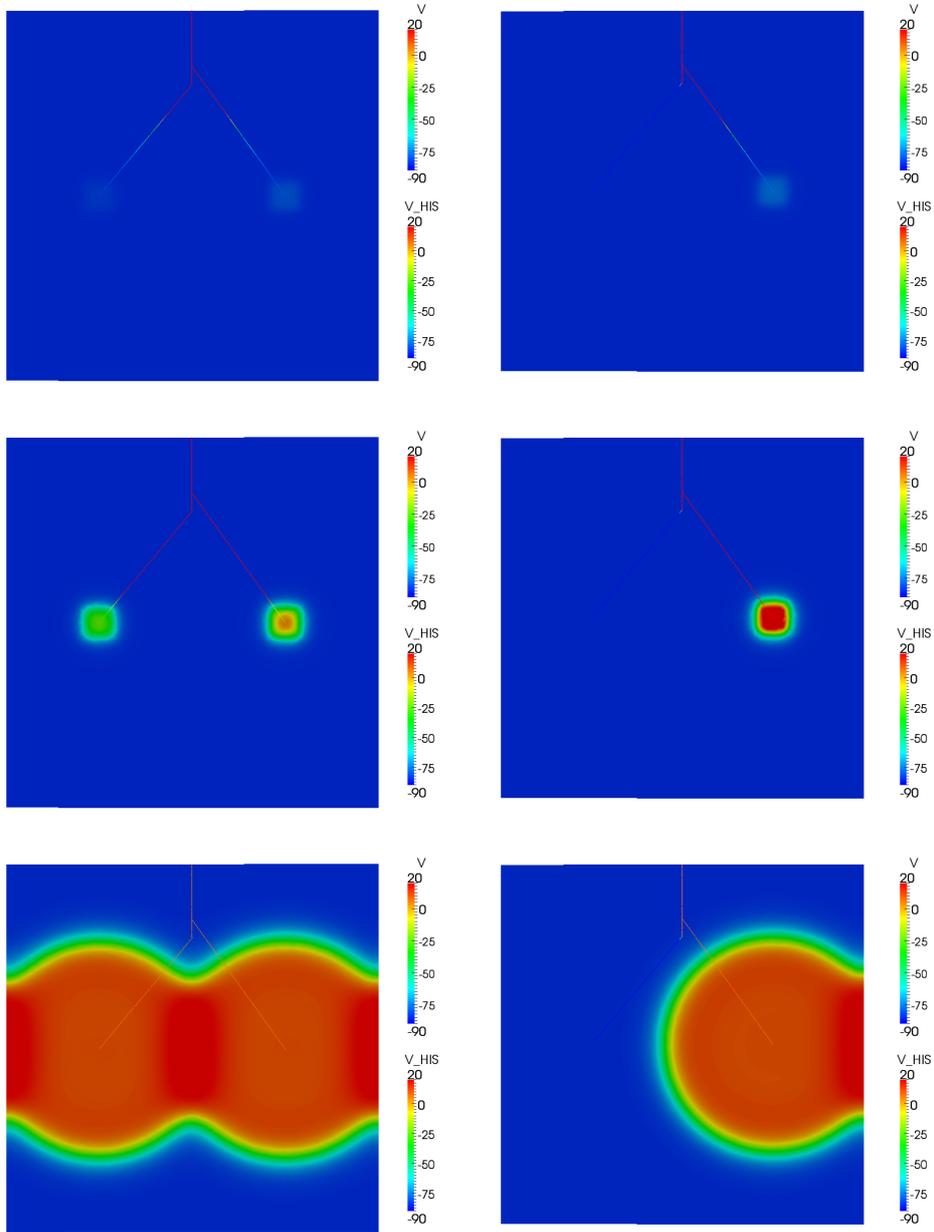


FIGURE 2.9 – Exemples de propagation sur une géométrie simplifiée. Fonctionnement normal (g.) et bloc de branche gauche (d.).

2.4 Modèles pour le calcul d'électrogrammes

La résolution du système bidomaine est très coûteuse numériquement. En effet, les phénomènes d'échec de propagation imposent un maillage du cœur très fin et l'on se retrouve quelle que soit la méthode numérique considérée à résoudre à chaque pas de temps un système linéaire très mal conditionné provenant de la discrétisation de (2.3). Or, en pratique, la connaissance du potentiel extracardiaque n'est nécessaire que très ponctuellement (à l'emplacement des électrodes pour mesurer l'ECG ou à la surface du cœur pour des électrogrammes). Par ailleurs, dans la plupart des cas physiologiques le modèle monodomaine fournit une approximation satisfaisante de la ddp transmembranaire V . On s'attachera donc dans ce paragraphe à obtenir des modèles permettant un calcul simple d'électrogrammes en se basant sur le modèle monodomaine (2.5) (*c.f.* [18]). Notons que le modèle dit monodomaine/bidomaine [141] est une première alternative permettant d'obtenir un potentiel cardiaque sous-échantillonné par rapport à V pour un temps de calcul environ trois fois supérieur au modèle monodomaine.

Monodomaine et équation algébrique

On considère donc le modèle monodomaine isolé (2.5). Il peut s'obtenir à partir du modèle bidomaine en faisant l'hypothèse que les tenseurs de conductivité sont proportionnels *i.e.* qu'il existe $\lambda > 0$ tel que $G_i = \lambda G_e$. En utilisant cette hypothèse dans l'équation d'équilibre (2.3) et les conditions aux limites de type Neumann homogène, on obtient une relation entre V et ϕ_e :

$$\forall t > 0, \text{ p.p. } x \in \Omega, \quad (1 + \lambda)\phi_e(x, t) + \lambda V(x, t) = f(t), \quad (2.22)$$

où f est une fonction de t . Par ailleurs, l'équation (2.3) devient l'équation du modèle monodomaine (2.5) avec :

$$G = (G_i^{-1} + G_e^{-1})^{-1} = \frac{1}{1 + \lambda} G_i = \frac{\lambda}{1 + \lambda} G_e.$$

Par conséquent, le potentiel ϕ_e à moyenne nulle peut être simplement obtenu à partir du modèle monodomaine standard grâce à la relation :

$$\begin{aligned} \forall t > 0, \quad \phi_e(x, t) &= \frac{\lambda}{1 + \lambda} \left(\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} V(x, t) dx - V(x, t) \right) \\ &= \frac{\lambda}{1 + \lambda} \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (V(y, t) - V(x, t)) dy. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Cette formulation très simple, qui donne de bons résultats en pratique, n'a étrangement été introduite que très récemment [18].

Monodomaine étendu et équation intégrale

Le modèle monodomaine étendu, utilisé dans [127, 144], est basé sur le modèle monodomaine pour le calcul de V sans supposer toutefois que les tenseurs de conductivité sont proportionnels (voir [120]). Le potentiel extracellulaire peut encore être retrouvé à partir de V grâce à l'équation (2.3). Toutefois, contrairement au modèle précédent, son expression n'est plus explicite en général.

Étant donné que l'on recherche ici uniquement les valeurs de ϕ_e sur $\Sigma = \partial\Omega$, on peut utiliser une formulation intégrale pour l'obtenir. En notant $\Phi = \phi_e|_{\Sigma}$, elle s'écrit :

$$\lambda(x)\Phi(x) + \int_{\Sigma} \Phi(y)\partial_n\Psi(x, y)dy = \int_H \left(\operatorname{div}(G\nabla V(y)) \right) \Psi(x, y)dy, \quad (2.24)$$

où $\lambda(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\partial B_\varepsilon} G_\varepsilon \nabla \Psi(x, y) \cdot \mathbf{n} dy$ et Ψ est la solution fondamentale associée à l'opérateur de Laplace anisotrope $\operatorname{div}(G_\varepsilon \nabla \Psi(x, y)) = \delta(x, y)$. Quand G_ε est constant, Ψ est donnée par (voir [143]) :

$$\Psi(x, y) = \left((x - y)^\top G_\varepsilon (x - y) \right)^{-1/2}.$$

On peut utiliser une technique classique d'éléments finis frontière (BEM) pour résoudre numériquement l'équation (2.24) (voir par exemple [139]). On obtient alors un système linéaire avec une matrice pleine à inverser à chaque pas de temps, mais il est de taille très inférieure à celui qui proviendrait du modèle bidomaine. Soulignons par ailleurs qu'à cause du manque de régularité de la solution fondamentale Ψ , le second membre de (2.24) ne peut pas être reformulé en utilisant le théorème de la divergence. Numériquement, on ne peut donc pas utiliser des éléments finis de type P1-Lagrange dont les dérivées secondes sont nulles. En pratique, les éléments finis P3-Hermite semblent un bon choix.

Si l'on veut comparer les résultats donnés par ces deux modèles, il reste à normaliser la solution Φ de l'équation (2.24). La solution à moyenne nulle dans Ω s'écrit $\Phi + c$ où c est une constante qui peut être déterminée de la manière suivante. Pour $\varphi \in H^2(\Omega)$, on écrit la formulation variationnelle de (2.3), puis on utilise la formule de Green pour obtenir :

$$- \int_{\Omega} \phi_e \operatorname{div}((G_i + G_e)\nabla \varphi) = \int_{\Omega} \varphi \operatorname{div}(G_i \nabla V) - \int_{\Sigma} \Phi(G_i + G_e)\nabla \varphi \cdot \mathbf{n}.$$

On choisit alors par exemple $\varphi = \frac{1}{6}x^\top(G_i + G_e)^{-1}x$ de telle sorte que $\operatorname{div}((G_i + G_e)\nabla \varphi) = 1$ dans Ω . La constante c est alors donnée par :

$$c := - \int_{\Omega} \phi_e \operatorname{div}((G_i + G_e)\nabla \varphi) = \int_{\Omega} \varphi \operatorname{div}(G_i \nabla V) - \int_{\Sigma} \Phi(G_i + G_e)\nabla \varphi \cdot \mathbf{n}.$$

Enfin, remarquons que lorsque le tenseur de conductivité G_e dépend de l'espace, l'expression de la solution fondamentale Ψ devient (voir [143] p 317) :

$$\Psi(x, y) = w^y(x, y) + \int_{\Omega} w^z(x, z)\theta(z, y) dz,$$

où $w^y(x, y) = \left((x - y)^\top G_e(y)(x - y) \right)^{-1/2}$ et θ est un potentiel vérifiant une équation de Fredholm. Il est difficile de calculer θ en général. Pour ce faire, il faut en effet résoudre une équation intégrale à chaque point de la frontière. Cependant, ces équations ne dépendent que de la géométrie du problème et leurs solutions peuvent être précalculées. On peut aussi négliger θ , en particulier si les variations de G_e sont faibles. L'hypothèse que G_e est constant est donc surtout faite pour conserver la simplicité de la méthode. Son impact doit donc être établi, tout comme ce fut le cas pour l'hypothèse de proportionnalité des tenseurs de conductivité.

2.5 Une application médicale

Le code Momme [20] inclut des modèles physiologiques complexes, en particulier au niveau des modèles ioniques. Il permet ainsi de faire des simulations réalistes comme celles effectuées dans le cadre d'une collaboration avec les biologistes de l'Institut du Thorax (UMR Inserm 915).

Le sujet de cette collaboration, publiée dans [17, 33], concerne une pathologie génétique détectée cliniquement. Cette pathologie a pour effet de provoquer des arythmies cardiaques chez les patients pour des fréquences de battements très particulières (typiquement 60 bpm). On peut voir ce comportement pathologique sur la figure 2.10 : à 60 bpm, le potentiel d'action présente une forme tout à fait caractéristique de la mutation en cause dans laquelle la moitié des battements est vraiment effective. En revanche, à 120 bpm, le fonctionnement est tout à fait normal.

Les biologistes ont réussi à décrire l'effet de l'anomalie génétique en cause au niveau

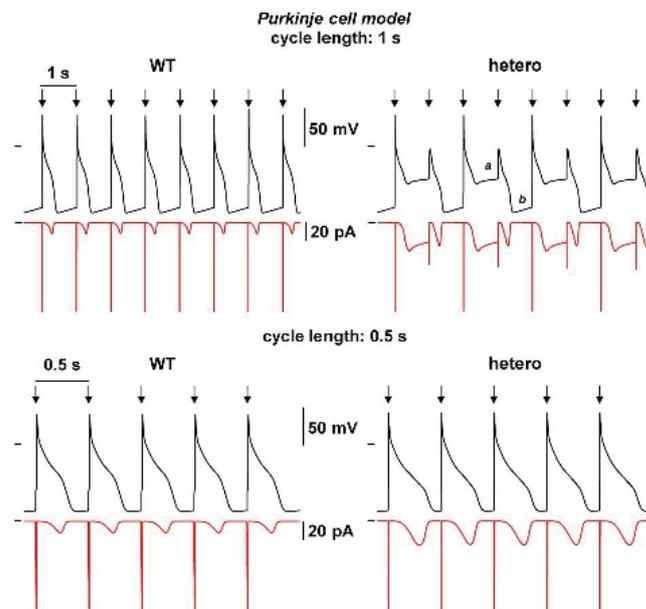


FIGURE 2.10 – Comportement pathologique observé : potentiel d'action normal (g.) et muté (d.) avec des rythmes de 60 bpm (haut) et 120 bpm (bas).

cellulaire, mais il était évidemment crucial de valider leurs théories à l'échelle du tissu. L'apport de la simulation numérique se situe à deux niveaux : tout d'abord pour valider l'approche cellulaire sans recourir à des méthodes invasives pour le patient, mais ensuite de permettre de simuler les effets de certains médicaments. Dans le cas considéré, il a ainsi été montré qu'un traitement à la quinidine (antiarythmique agissant principalement sur le courant sodique rapide) permettait de restaurer un comportement normal (voir figure 2.11).

Les figures 2.10 et 2.11 présentent des résultats de simulations numériques effectuées avec [20]. Le modèle ionique choisi dans le ventricule (Iyer, Mazhari, Winslow [137]) est particulièrement complexe (près de 70 variables dans w !) et possède d'importantes raideurs numériques. Le pas de temps doit donc être choisi plus faible qu'avec d'autres modèles (TenTusscher, Noble, Noble, Panfilov [145] par exemple). Le maillage devant

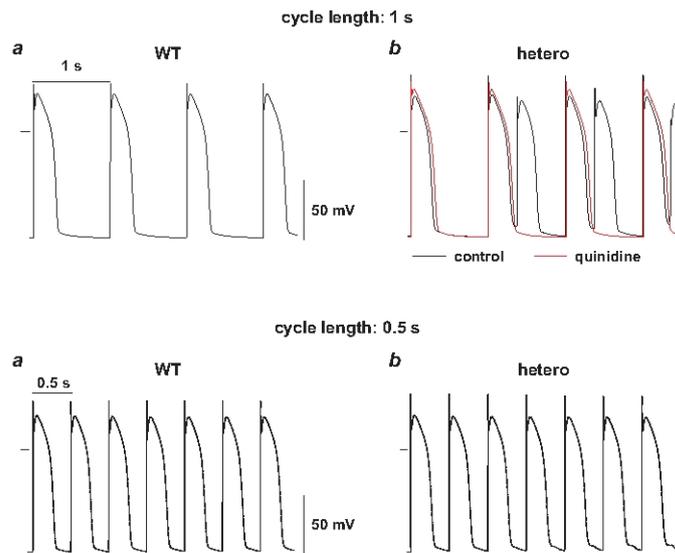


FIGURE 2.11 – Effet de la quinidine sur la pathologie.

également être assez fin pour éviter les phénomènes d'échec de propagation, chaque simulation d'une période de 6s sur le domaine considéré demande environ une journée de calcul.

Les résultats ont permis de valider les dosages optimaux de quinidine nécessaires pour retrouver un comportement normal chez les patients.

Travaux de l'auteur

Articles dans des revues avec comité de relecture

- [1] C. Berthon, M. Frank, K. Krycki, and R. Turpault, *Asymptotic preserving numerical schemes for a non-classical radiation transport model for atmospheric clouds*, M2AS (2013).
- [2] C. Berthon, C. Sarazin, and R. Turpault, *Space-time GRP solvers of order k for linear advection with unrestricted time step*, Journal of Scientific Computing, DOI 10.1007/s10915-012-9632-5, (to appear in print).
- [3] C. Berthon, C. Chalons, and R. Turpault, *Asymptotic-preserving Godunov-type numerical schemes for hyperbolic systems with stiff and non-stiff relaxation terms*, Numerical Methods for Partial Differential Equations (2012).
- [4] C. Berthon, P.G. LeFloch, and R. Turpault, *Late-time/stiff relaxation asymptotic-preserving approximations of hyperbolic equations*, Math. of Comp. (2012).
- [5] A. Azzouzi, Y. Coudière, R. Turpault, and N. Zenzemi, *A mathematical model of Purkinje-Muscle Junctions*, Math. Bio. Eng. **8** (2011), no. 4, 915-930.
- [6] C. Berthon, F. Marche, and R. Turpault, *A numerical scheme for Shallow Water Equations with friction*, Computer and Fluids **48** (2011), no. 1, 192-201.
- [7] C. Berthon, M. Frank, C. Sarazin, and R. Turpault, *Numerical methods for balance laws with space dependent flux : application to radiotherapy dose calculation*, Comm. Comput. Phys. **10** (2011), no. 5, 1184-1210.
- [8] C. Berthon and R. Turpault, *Asymptotic preserving HLL schemes*, Numerical Methods for Partial Differential Equations, **27** (2011), no. 6, 1396-1422.
- [9] R. Turpault, *Properties and frequential hybridisation of the multigroup $M1$ model for radiative transfer*, Nonlinear Analysis : Real-World Applications **11** (2010), no. 4, 2514-2528.
- [10] C. Berthon, J Dubois, B. Dubroca, T.-H. Nguyen-Bui, and R. Turpault, *A free streaming contact preserving scheme for the M_1 model*, Adv. Appl. Math. Mech. **2** (2010), no. 3, 259-285.
- [11] Y. Coudière, C. Pierre, O. Rousseau, and R. Turpault, *A 2D/3D Discrete Duality Finite Volume Scheme. Application to ECG simulation*, Int. J. Fin. Vol. **6** (2009), no. 1.
- [12] C. Berthon, J. Dubois, and R. Turpault, *Numerical Approximation of the $M1$ model*, SMF Panoramas et Synthèses **28** (2009), 55-86.
- [13] R. Turpault, *A consistant multigroup model for radiative transfer and its underlying mean opacities*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **94** (2005), no. 3-4, 357-371.
- [14] R. Turpault, M. Frank, B. Dubroca, and A. Klar, *Multigroup Half Space Moment Approximations to the Radiative Heat Transfer Equations*, J. Comp. Phys. **198** (2004), 364-371.

Notes et article multidisciplinaire

- [15] C. Berthon and R. Turpault, *A numerical correction of the $M1$ -model in the diffusive limit*, Discrete and Continuous Dynamical Systems-S **5** (2012), no. 2, 245-255.
- [16] R. Turpault, *Construction d'un modèle $M1$ -multigroupe pour les équations du transfert radiatif*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I **334** (2002), 1-6.

- [17] G. Laurent, S. Saal, M. Amarouch, D. Beziau, R. Marsman, L. Faivre, J. Barc, C. Dina, G. Bertaux, O. Barthez, C. Thauvin-Robinet, P. Charron, V. Fressart, A. Maltret, E. Villain, E. Baron, J. Mérot, R. Turpault, Y. Coudière, F. Charpentier, J. Schott, G. Loussouarn, A. Wilde, J. Wolf, I. Baro, F. Kyndt, and V. Probst, *Multifocal Ectopic Purkinje-related Premature Contractions : a new SCN5A-related cardiac channelopathy*, J. Amer. College of Cardiology **60** (2012), no. 2.
- [18] M. Chhay, Y. Coudière, and R. Turpault, *How to compute the extracellular potential in electrocardiology from an extended monodomain model*, hal-00683386 (2012).

Codes de calcul

- [19] R. Turpault, *Haradrim*, 2003.
- [20] Y. Coudière and R. Turpault, *Momme*, 2007.
- [21] C. Pierre, R. Turpault, and Y. Coudière, *Coeur*, 2006.

Actes de congrès internationaux avec comité de relecture - mathématiques

- [22] C. Berthon and R. Turpault, *Finite Volumes Asymptotic Preserving Schemes for systems of conservation laws with stiff source terms*, Finite Volumes for Complex Applications VI (2011), 107-116.
- [23] A. Azzouzi, Y. Coudière, and R. Turpault, *A mathematical model of the ventricular conduction system*, International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics, Vol. 1281 (2010), 403-406.
- [24] Y. Coudière, C. Pierre, and R. Turpault, *A 2D/3D finite volume method used to solve the bidomain equations of electrocardiology*, Algoritmy, Conference on Scientific Computing (2009).
- [25] ———, *A DDFV scheme for anisotropic and heterogeneous elliptic equations, application to a bi-mathematics problem : electrocardiogram simulation*, Finite volumes for complex applications V. Problems and perspectives (2008).
- [26] P. Charrier, B. Dubroca, G. Duffa, and R. Turpault, *An implicit preconditionned JFNK method for fully coupled radiating flows. Application to superorbital re-entry simulations*, Computational Fluid Dynamics (2006).
- [27] Y. Coudière, C. Pierre, and R. Turpault, *A finite volume method for the coupled heart-torso bidomain model in electrocardiology*, 3rd MIT conference on Computational Fluid and Solid Mechanics (2005).
- [28] ———, *Stability and convergence of a finite volume method for a reaction-diffusion system of equations in electro-cardiology*, Finite Volumes for Complex Applications IV (2005).
- [29] R. Turpault, *A Multigroup M1 Model for Radiation Hydrodynamics and Applications*, 23rd international symposium on rarefied gas dynamics (2004).
- [30] P. Charrier, B. Dubroca, L. Mieussens, and R. Turpault, *Discrete-velocity models for numerical simulations in transitional regime for rarefied flows and radiative transfer*, IMA 135 (2004), 85-.
- [31] R. Turpault, *Numerical Solution of Radiative Transfer Problems with Finite Volumes*, Finite Volumes for Complex Applications III (2002).

Actes de congrès internationaux avec comité de relecture - physique et biologie

- [32] C. Berthon, C. Sarazin, and R. Turpault, *Numerical approximations of asymptotic regimes*, 3rd International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry (2010).
- [33] G. Laurent, S. Saal, M. Amarouch, L. Faivre, C. Thauvin-Robinet, P. Charron, P. Richard, V. Probst, E. Baron, I. Baro, J. Barc, J. Schott, J. Mérot, R. Turpault, Y. Coudière, G. Loussouarn, F. Kyndt, and J. Wolf, *Multifocal Ectopic Purkinje Tachycardia : A New Familial Syndrome*, Circulation (2010).

- [34] P. Charrier, B. Dubroca, G. Duffa, M. Frank, A. Klar, and R. Turpault, *Nonlocal transport modelling and numerical simulation for radiative transfer*, 31st European Physical Society Conference on Plasmas Physics (2005).
- [35] P. Charrier, B. Dubroca, G. Duffa, and R. Turpault, *Implicit method for coupled multigroup radiating flows*, 34th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit (2004), 2637-.
- [36] ———, *Multigroup model for radiating flows during atmospheric hypersonic re-entry*, International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry (2003), 103-110.

Autres

- [37] C. Berthon, Y. Coudière, and R. Turpault, *Têtes chercheuses, 15*. Simuler, vite et bien, 2010.
- [38] Y. Coudière and R. Turpault, *MATAPLI. Modèles et Méthodes Mathématiques en Électrocardiologie*, 2008.
- [39] R. Turpault, *Modélisation, approximation numérique et applications du transfert radiatif en déséquilibre spectral couplé avec l'hydrodynamique*, Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 2003.
- [40] ———, *Un modèle cinétique en transfert radiatif*, Université Bordeaux I, 2000.

Références

Sources de la première partie

- [41] R. Abgrall, *On essentially non-oscillatory schemes on unstructured meshes : Analysis and implementation*, J. Comput. Phys. **114** (1994), no. 1, 45-58.
- [42] R. Abgrall, N. Andreianov, and M. Mezine, *Towards very high-order accurate schemes for unsteady convection problems on unstructured meshes*, Int. J. Numer. Methods Fluids **47** (2005), no. 8-9, 679-691.
- [43] R. Abgrall and M. Mezine, *Construction of second order accurate monotone and stable residual distribution schemes for unsteady flow problems*, J. Comput. Phys. **188** (2003), no. 1, 16-55.
- [44] A.M. Anile, A.M. Blokhin, and Y.L. Trakhinin, *Investigation of a mathematical model for radiation hydrodynamics*, Z. angew. Math. Phys. **50** (1999), 677-697.
- [45] D. Aregba-Driollet and R. Natalini, *Convergence of relaxation schemes for conservation laws*, Appl. Anal. **61** (1996), no. 1-2, 163-193.
- [46] V. Arslan, P. Carribault, C. Enaux, H. Jourdain, and M. Pérache, *Calcul haute performance en transfert radiatif*, Chocs avancées (2009), 38-39.
- [47] E. Audusse, F. Bouchut, M.O. Bristeau, R. Klein, and B. Perthame, *A fast and stable well-balanced scheme with hydrostatic reconstruction for shallow water flows*, SIAM J.Sci.Comp. **25** (2004), 2050-2065.
- [48] C. Bardos, F. Golse, B. Perthame, and R. Sentis, *The nonaccretive radiative transfer equations : Existence of solutions and Rosseland approximation*, Journal of Functional Analysis **77** (1988), 434-460.
- [49] R. Belaouar, N. Crouseilles, P. Degond, and E. Sonnendrücker, *An asymptotically stable semi-lagrangian scheme in the quasi-neutral limit*, Journal of Scientific Computing **41** (2009), 341-365.
- [50] M. Ben Artzi, *The generalized Riemann problem for reactive flows*, J. Comp. Phys. **81** (1989), no. 1, 70-101.
- [51] M. Ben Artzi and J. Falcovitz, *Generalized Riemann Problems in Computational Fluid Dynamics* (Cambridge University Press, ed.), 2003.
- [52] ———, *A second-order Godunov-type scheme for compressible fluid dynamics*, J. Comp. Phys. **55** (1984), no. 1, 1-32.
- [53] C. Berthon, *Numerical approximations of the 10-moment Gaussian closure*, Math. of Comp. **75** (2006), 1809-1831.
- [54] C. Berthon, P. Charrier, and B. Dubroca, *An HLLC scheme to solve the M1 Model of radiative transfer in two space dimensions*, J. Sci. Comput. **31** (2007), no. 3, 347-389.
- [55] F. Bouchut, *Nonlinear stability of finite volume methods for hyperbolic conservation laws, and well-balanced schemes for sources* (Birkhäuser Frontiers in Mathematics series, ed.), 2004.
- [56] F. Bouchut, H. Ounaissa, and B. Perthame, *Upwinding of the source term at interfaces for Euler equations with high friction*, J. Comput. Math. Appl. **53** (2007), no. 3-4, 361-375.
- [57] T.A. Bruner and Holloway J.P., *One-dimensional Riemann solvers and the maximum entropy closure*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **69** (2001), 543-566.
- [58] C. Buet and S. Cordier, *Asymptotic preserving scheme and numerical methods for radiative hydrodynamic models*, C. R., Math., Acad. Sci. Paris **338** (2004), 951-956.

- [59] ———, *An asymptotic preserving scheme for hydrodynamics radiative transfer models*, Numerische Mathematik **108** (2007), no. 2, 199-221.
- [60] C. Buet and B. Desprès, *Asymptotic analysis of fluid models for the coupling of radiation and hydrodynamics*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **85** (2004), no. 3-4, 385-418.
- [61] ———, *Asymptotic preserving and positive schemes for radiation hydrodynamics*, J. Compt. Phys. **215** (2006), 717-740.
- [62] ———, *Grey radiative hydrodynamics - Hierarchy of models and numerical approximation*, SMF Panoramas et Synthèses **28** (2009), 1-33.
- [63] C. Chainais-Hillairet and F. Filbet, *Asymptotic behavior of a finite volume scheme for the transient drift-diffusion model*, IMA Journal of Numerical Analysis **27** (2007), 689-716.
- [64] C. Chalons, F. Coquel, E. Godlewski, P.A. Raviart, and N. Seguin, *Godunov-type schemes for hyperbolic systems with parameter dependent source. The case of Euler system with friction*, Mathematical Models and Methods in Applied Sciences **20** (2010), no. 11, 2109-2166.
- [65] C. Chalons and J.F. Coulombel, *Relaxation approximation of the Euler equations*, J. Math. Anal. Appl. **348** (2008), no. 2, 872-893.
- [66] G.Q. Chen, C.D. Levermore, and T.P. Liu, *Hyperbolic Conservation Laws with Stiff Relaxation Terms and Entropy*, Comm. Pure Appl. Math. **47** (1995), 787-830.
- [67] T. Christen and F. Kassubek, *Minimum entropy production closure of the photo-hydrodynamic equations for radiative heat transfer*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **110** (2009), no. 8, 452-463.
- [68] F. Coquel and P. LeFloc, *An entropy satisfying MUSCL scheme for systems of conservation laws*, Num. Math. **74** (1996), 1-33.
- [69] J.F. Coulombel, F. Golse, and T. Goudon, *Diffusion approximation and entropy-based moment closure for kinetic equations*, Asymptotic Analysis **45** (2005), no. 1-2, 1-39.
- [70] J.F. Coulombel, T. Goudon, P. Laffitte, and C. Lin, *Analysis of large amplitude shock profiles for non-equilibrium radiative hydrodynamics : formation of Zeldovich spikes*, HAL **hal-00593491** (2011).
- [71] Dai and P.R. Woodward, *A Simple Riemann Solver and High-Order Godunov Schemes for Hyperbolic Systems of Conservation Laws*, J. Comp. Phys. **121** (2002), no. 1, 51-65.
- [72] P. Degond, F. Deluzet, A. Sangam, and M.H. Vignal, *An asymptotic preserving scheme for the Euler equations in a strong magnetic field*, J. Comput. Phys. **228** (2009), 3540-3558.
- [73] P. Degond and A. Klar, *A relaxation approximation for transport equations in the diffusive limit*, Appl. Math. Lett. **15** (2002), 131-135.
- [74] B. Desprès, F. Lagoutière, E. Labourasse, and I. Marmajou, *An antidissipative transport scheme on unstructured meshes for multicomponent flows*, Int. J. Finite Vol. **7** (2010), no. 1.
- [75] D. Donatelli and P. Marcati, *Convergence of Singular Limits for Multi-D Semilinear Hyperbolic Systems to Parabolic Systems*, Trans. of the AMS **356** (2004), no. 5, 2093-2121.
- [76] B. Dubroca and J.L. Feugeas, *Entropic Moment Closure Hierarchy for the Radiative Transfer Equation*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I **329** (1999), 915-920.
- [77] B. Dubroca and A. Klar, *Half Moment closure for radiative transfer equations*, J. Comp. Phys. **180** (2002), 1-13.
- [78] R. Duclous, B. Dubroca, and M. Frank, *Deterministic Partial Differential Equation Model for Dose Calculation in Electron Radiotherapy*, Phys. Med. Biol. **55** (2010), 3843-3857.
- [79] M. Frank, B. Dubroca, and A. Klar, *Partial moment entropy approximation to radiative heat transfer*, Journal of Computational Physics **218** (2006), no. 1, 1-18.
- [80] M. Frank and T. Goudon, *On a generalized Boltzmann equation for non-classical particle transport*, Kinet. Relat. Models **3** (2010), no. 395-407.
- [81] L. Gosse and G. Toscani, *Asymptotic-preserving well-balanced scheme for the hyperbolic heat equations*, C. R., Math., Acad. Sci. Paris **334** (2002), 337-342.
- [82] J.M. Greenberg and A.Y. LeRoux, *A well-balanced scheme for the numerical processing of source terms in hyperbolic equations*, SIAM J. Numer. Anal. **33** (1996), 1-16.

- [83] A. Harten, P.D. Lax, and B. Van Leer, *On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws*, SIAM Review **25** (1983), no. 1, 35-61.
- [84] S. Jin and D. Levermore, *Numerical Schemes for Hyperbolic Conservation Laws with Stiff Relaxation Terms*, J. Comput. Phys. **126** (1996), 449-467.
- [85] S. Jin, G.J. Liu, and L. Wang, *A domain decomposition method for semilinear hyperbolic systems with two-scale relaxations*, Math. of Comp. (2012).
- [86] S. Jin and Z. Xin, *The Relaxation Scheme for Systems of Conservation Laws in Arbitrary Space Dimension*, Comm. Pure Appl. Math. **45** (1995), 235-276.
- [87] C. Klaij, J.J.W. van der Vegt, and H. van der Ven, *Space-time discontinuous Galerkin method for the compressible Navier-Stokes equations*, J. Comput. Phys. **217** (2006), 589-611.
- [88] A.A. Larcis and V. Oinas, *A description of the Correlated K-Distribution Method*, J. Geophysical Research **96** (1991), 9027-9064.
- [89] W. Larecki and Z. Banach, *Entropic derivation of the spectral Eddington factors*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **112** (2011), no. 15, 2486-2506.
- [90] E.W. Larsen, Pomraning G.C., and V.C. Badham, *Asymptotic analysis of radiative transfer problems*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **29** (1983), 285-310.
- [91] P. LeFloch, J.M. Mercier, and C. Rohde, *Fully discrete entropy conservative schemes of arbitrary order*, SIAM J. Numer. Anal. **40** (2002), 1968-1992.
- [92] D. Levermore, *Relating Eddington Factors to Flux Limiters*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **31** (1984).
- [93] ———, *Moment Closure Hierarchies for Kinetic Theories*, J. Stat. Phys. **83** (1996), 1021-1065.
- [94] T.P. Liu, *Hyperbolic conservation laws with relaxation*, Comm. Math. Phys. **108** (1987), 153-175.
- [95] Lowrie R.B., Morel J.E., and Hittinger J.A., *Coupling radiation and hydrodynamics*, Astrophysical Journal **521** (1999), 432-450.
- [96] P. Marcati and B. Rubino, *Hyperbolic to Parabolic Relaxation Theory for Quasilinear First Order Systems*, J. Diff. Eq. **162** (2000), 359-399.
- [97] R.G. McClarren and R.P. Drake, *Anti-diffusive radiation flow in the cooling layer of a radiating shock*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **111** (2010), no. 14, 2095-2105.
- [98] C. Michaux, H.C. Nguyen, and L. DiMenza, *Computational radiation hydrodynamics*, Astrophysics and Space Science.
- [99] L. Mieussens, *Discrete velocity models and numerical schemes for the Boltzmann-BGK equation in plane and axisymmetric geometries*, J. Comput. Phys. **162** (2001), 429-466.
- [100] D. Mihalas and B. Weibel-Mihalas, *Fundations of Radiation Hydrodynamics* (Dover Publications, ed.), 1999.
- [101] G.N. Minerbo, *Maximum entropy Eddington Factors*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **20** (1978), 541-545.
- [102] M.J. Modest, *Radiative Heat Transfer* (Academic Press, ed.), 2003.
- [103] J.E. Morel, B.T.Y. Yang, and J.S Warsa, *Linear multifrequency-grey acceleration recast for preconditioned Krylov iterations*, Journal of Computational Physics **227** (2007), no. 1, 244-263.
- [104] K. Nishihara, *Asymptotic behavior of solutions of quasilinear hyperbolic equations with linear damping*, J. Diff. Eq. **137** (1997), 384-395.
- [105] G.L. Olson, L. Auer, and M. Hall, *Diffusion, P1, and other approximate forms of radiation transport*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **64** (2000), no. 6, 619-634.
- [106] G.C. Pomraning, *The Equations of Radiation Hydrodynamics* (Pergamon Press, ed.), 1973.
- [107] J.F. Ripoll, *Modélisation mathématique et numérique du couplage hydrodynamique-transfert radiatif. Application aux feux.*, Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 2001.
- [108] J.F. Ripoll and A.A. Wray, *A 3-D multiband closure for radiation and neutron transfer moment models*, J. Comp. Physics **227** (2008), 2212-2237.
- [109] C. Rohde and W.A. Yong, *The nonrelativistic limit in radiation hydrodynamics : I. Weak entropy solutions for a model problem*, Journal of Differential Equations **234** (2007), no. 1, 91-109.
- [110] I. Suliciu, *On modelling phase transitions by means of rate-type constitutive equations, shock wave structure*, Int. J. Engrg. Sci. **28** (1990), 829-841.

- [111] B. Su and G.L. Olson, *An analytical benchmark for non-equilibrium radiative transfer in an isotropically scattering medium*, Ann Nucl Energy **13** (1997), no. 24, 1035-1055.
- [112] N. Vaytet, E. Audit, and B. Dubroca, *A Numerical Model for Multigroup Radiation Hydrodynamics*, Numerical Modeling of Space Plasma Flows (2010), 160.
- [113] Y.B. Zel'dovitch and Y.P. Raiser, *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena* (Academic Press, ed.), 1966.

Sources de la seconde partie

- [114] B. Andreianov, M. Bendhamane, and K. Karlsen, *Discrete duality finite volume schemes for doubly nonlinear degenerate hyperbolic-parabolic equations*, J. Hyperbolic Diff. Equ. **7** (2010), no. 1, 1-67.
- [115] B. Andreianov, M. Bendhamane, K. Karlsen, and C. Pierre, *Convergence of discrete duality finite volume schemes for the cardiac bidomain model*, Networks and Heterogeneous Media **6** (2011), no. 2.
- [116] B. Andreianov, F. Boyer, and F. Hubert, *Discrete duality finite volume schemes for Leray-Lions-type elliptic problems on general 2d meshes*, Num. Meth. for PDEs **23** (2007), no. 1, 145-195.
- [117] B. Andreianov, F. Hubert, and S. Krell, *A version of the DDFV scheme with cell/vertex unknowns on general meshes*, Finite Volumes for Complex Applications VI (2011), 137-148.
- [118] A.V. Aslanidi, P. Stewart, M.R. Boyett, and H. Zhang, *Optimal velocity and safety of discontinuous conduction through the heterogeneous purkinje-ventricular junction*, Biophysical Journal (2009).
- [119] L. Beirão da Veiga, K. Lipnikov, and G. Manzini, *Arbitrary-order nodal mimetic discretizations of elliptic problems on polygonal meshes*, SIAM Journal on Numerical Analysis **49** (2011), no. 5, 1737-1760.
- [120] Y. Bourgault, Y. Coudière, and C. Pierre, *Existence and uniqueness of the solution for the bidomain model used in cardiac electrophysiology*, Nonlinear Analysis : Real World Applications **10** (2009), no. 1, 458-482.
- [121] Y. Bourgault, Y. Coudière, and M. Rioux, *Optimal monodomain approximations of the bidomain equations for the isolated heart*, hal-00644257.
- [122] Y. Bourgault and C. Pierre, *Comparing the bidomain and monodomain models in electro-cardiology through convergence analysis*, hal-00545888.
- [123] F. Boyer and F. Hubert, *Finite volume method for 2D linear and nonlinear elliptic problems with discontinuities*, SIAM J. Numer. Anal. **46** (2008), no. 6, 3032-3070.
- [124] P.M. Boyle, M. Deo, G. Plank, and Vigmond E.J., *Purkinje-mediated effects in response of quiescent ventricles to defibrillation shocks*, Annals of Biomedical Engineering (2009).
- [125] P. Colli-Franzone, L. Guerri, M. Pennacchio, and L. Taccardi, *Spread of excitation in 3D models of the anisotropic cardiac tissue. II. Effects of fiber architecture and ventricular geometry*, Math. Biosciences **147** (1998), no. 2, 131-171.
- [126] P. Colli-Franzone and L. Pavarino, *A parallel solver for reaction-diffusion systems in computational electrocardiology*, Math. Mod. Meth. in Applied Sci. **14** (2004), no. 6, 883-911.
- [127] P. Colli-Franzone, L. Pavarino, and L. Taccardi, *Simulating patterns of excitation, repolarization and action potential duration with cardiac Bidomain and Monodomain models*, Math. Biosciences **197** (2005), no. 1, 35-66.
- [128] Y. Coudière, F. Hubert, and G. Manzini, *CeVeFE-DDFV, a discrete duality scheme with cell/vertex/face+edge unknowns*, Finite Volumes for Complex Applications VI (2011), 177-084.
- [129] Y. Coudière and G. Manzini, *The discrete duality finite volume method for convection-diffusion problems*, SIAM J. Numer. Anal. **47** (2010), no. 6, 4163-4192.
- [130] Y. Coudière, J.P. Vila, and P. Villedieu, *Convergence rate of a finite volume scheme for a two dimensional diffusion convection problem*, Math. Model. Numer. Anal. **33** (1999), no. 3, 493-516.
- [131] D. DiFrancesco and D. Noble, *A model of cardiac electrical activity incorporating ionic pumps and concentration changes*, Phil. Trans. R. Soc. Lond. **307** (1985), 353-398.
- [132] K. Domelevo and P. Omnes, *A finite volume method for the Laplace equation on almost arbitrary two-dimensional grids*, M2AN Math. Model. Numer. Anal. **39** (2005), no. 6, 1203-1249.

- [133] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin, *Finite Volume Methods*, Handbook of Numerical Analysis, Vol. VII, 2000.
- [134] ———, *Discretisation of heterogeneous and anisotropic diffusion problems on general non-conforming meshes. SUSHI : a scheme using stabilisation and hybrid interfaces*, IMA J. Numer. Anal. Advance Access **30** (2009), no. 4, 1009-1043.
- [135] C.S. Henriquez, A.L. Muzikant, and C.K. Smoak, *Anisotropy, fiber curvature, and bath loading effects on activation in thin and thick cardiac tissue preparations : simulations in a three-dimensional bidomain model*, Journal of Cardiovascular Electrophysiology **7** (1996), no. 5, 424-444.
- [136] F. Hermeline, *Approximation of diffusion operators with discontinuous tensor coefficients on distorted meshes*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. **192** (2003), 1939-1959.
- [137] V. Iyer, R. Mazhari, and R. Winslow, *A computational model of the human left-ventricular epicardial myocyte*, Biophysical Journal **87** (2004), 1507-1525.
- [138] J. Keener and J. Sneyd, *Mathematical Physiology* (Springer (New York), ed.), 1998.
- [139] J.C. Nédélec, *Approximation des équations intégrales en mécanique et en physique* (École Polytechnique Centre de mathématiques appliquées Palaiseau, ed.), 1977.
- [140] J.C. Neu and W. Krassowska, *Homogenization of syncytal tissues*, Crit. Rev. Biomed. Eng. **37** (1990), no. 12, 1173-1185.
- [141] C. Pierre, *Preconditioning the bidomain model with almost linear complexity*, J. Compt. Phys. **231** (2012), 82-97.
- [142] ———, *Modelling and Simulating the electrical Activity of the Heart embedded in the Torso, Numerical Analysis and Finite Volumes Methods*, Thèse de doctorat, Université de Nantes, 2005.
- [143] W. Pogorzelski, *Integral equations and their applications*, Vol. Pergamon Press, 1966.
- [144] M. Potse, B. Dube, J. Richer, A. Vinet, and R.M. Gulrajani, *A Comparison of Monodomain and Bidomain Reaction-Diffusion*, IEEE Transactions on Biomedical Engineering **53** (2006), 2425-2435.
- [145] K.H.W.J Ten Tusscher, D. Noble, P.J. Noble, and A.V Panfilov, *A model for human ventricular tissue*, American Journal of Physiology **286** (2004), 1573-1589.
- [146] K.H.W.J Ten Tusscher and A.V Panfilov, *Modelling of the ventricular conduction system*, Progress in Biophysics and Molecular Biology (2008).
- [147] E.J. Vigmond and C. Clements, *Construction of a computer model to investigate the sawtooth effect in the Purkinje system*, IEEE Transaction on Biomedical Engineering **54** (2007), no. 3.