



HAL
open science

**Méthodes de Boltzmann sur réseau pour la simulation
numérique de certains systèmes
d'advection-réactiondiffusion provenant de la physique et
de la biologie, et analyse mathématique et numérique de
problèmes issus du domaine biomédical cardio-vasculaire**

Samuel Corre

► **To cite this version:**

Samuel Corre. Méthodes de Boltzmann sur réseau pour la simulation numérique de certains systèmes d'advection-réactiondiffusion provenant de la physique et de la biologie, et analyse mathématique et numérique de problèmes issus du domaine biomédical cardio-vasculaire. Analyse numérique [math.NA]. INSA de Rennes, 2018. Français. NNT : 2018ISAR0022 . tel-02297404

HAL Id: tel-02297404

<https://theses.hal.science/tel-02297404v1>

Submitted on 26 Sep 2019

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.

THESE DE DOCTORAT DE

L'INSA RENNES

COMUE UNIVERSITE BRETAGNE LOIRE

ECOLE DOCTORALE N° 601

*Mathématiques et Sciences et Technologies
de l'Information et de la Communication*

Spécialité : Mathématiques et leurs Interactions

Par

Samuel CORRE

Méthodes de Boltzmann sur réseau pour la simulation numérique de certains systèmes d'advection-réaction-diffusion provenant de la physique et de la biologie, et analyse mathématique et numérique de problèmes issus du domaine biomédical cardio-vasculaire.

Thèse présentée et soutenue à l'INSA-Rennes le 19 octobre 2018

Unité de recherche : UMR 6625, IRMAR

Thèse N° : 18ISAR 20 / D18 - 20

Rapporteurs avant soutenance :

Yves Coudière, HDR Professeur à l'Université de Bordeaux

Benjamin Graille, HDR Maître de Conférences à l'Université
Paris-Sud

Composition du Jury :

Stéphanie Salmon, HDR Professeur à l'Université de
Reims/présidente de jury

Yves Coudière, HDR Professeur à l'Université de
Bordeaux/rapporteur

Benjamin Graille, HDR Maître de Conférences à l'Université
Paris-Sud/rapporteur

Zakaria Belhachmi, HDR Professeur à l'Université de
Mulhouse/examineur

Jocelyne Erhel, HDR Directrice de Recherche Inria,
Rennes/examinatrice

Olivier Ley, HDR Professeur à l'INSA de
Rennes/examineur

Aziz Belmiloudi, HDR Maître de Conférences à l'INSA de
Rennes/directeur de thèse

Intitulé de la thèse :

Méthodes de Boltzmann sur réseau pour la simulation numérique de certains systèmes d'advection-réaction-diffusion provenant de la physique et de la biologie, et analyse mathématique et numérique de problèmes issus du domaine biomédical cardio-vasculaire

Samuel CORRE

En partenariat avec :



Document protégé par les droits d'auteur

Remerciements

Je suis reconnaissant envers beaucoup de personnes, mais je n'ai pas beaucoup d'aisance dans son expression, j'espère n'oublier personne...!

Je tiens en premier lieu et tout naturellement à remercier Aziz Belmiloudi pour tout ce qu'il a pu m'apporter tout au long de cette thèse, pour ses conseils avisés, pour son investissement, et pour l'ensemble des bons moments que nous avons passés à travailler ou à discuter.

Je suis également très reconnaissant envers Yves Coudière et Benjamin Graille pour avoir accepté d'être rapporteurs, j'ai conscience du temps que cela peut prendre, et j'imagine combien cela peut être un travail difficile. Merci aussi à Stephanie Salmon, présidente du jury, et aux autres membres du jury, Zakaria Belhachmi, Jocelyne Erhel et Olivier Ley pour avoir accepté de faire partie du jury. Je suis très honoré que toutes ces personnes aient apporté leur contribution à cette thèse.

Je remercie également l'ensemble des membres du labo à l'INSA, ce fut un cadre idéal pour faire une thèse, dont je garderai de nombreux bons souvenirs, notamment à travers les restaurants, les pique-niques, les barbecues qui rythmaient l'année, ou encore la semaine passée au CIRM à Luminy. Je souhaite un bon courage aux doctorants qui n'ont pas encore terminé, et plein de bonnes choses à celles et ceux que j'ai pu côtoyer.

Je tiens également à remercier chaleureusement toute l'équipe du master de Modélisation de Rennes 1 pour m'avoir donné l'envie de continuer dans cette voie, et en particulier Fabrice Mahé et Loïc Le Marrec qui ont encadré mes stages et avec qui ce fut un plaisir d'étudier et de travailler.

Même si leurs contributions n'ont pour la plupart pas grand chose à voir avec les mathématiques ou la recherche (excepté Vincent pour les relectures) j'ai envie de remercier les ami.e.s grâce à qui la vie est belle. Merci aux gens de l'association Jongle&Rit et aux potes rennais.es en général. Merci aux membres de l'Apogée, et à tou.te.s les ami.e.s brestois.es (et alentours) grâce à qui c'est toujours Byzance. Merci au sens plus large aux Irreductibles, au collectif des Bras croisés d'Aurillac, et aux jongleur.euse.s d'un peu partout. Merci enfin aux colocataires et collaboratrice qui ont partagé mon quotidien tout au long des études, Mélo, Flo, Tof, Jerem, Ludo, Alex, Ki, Etienne, Simon, et ceux/celles qui passent!

Je terminerai par la base en remerciant toute ma famille, et en particulier mes parents et ma soeur, Evelyne, Jean-Yvon et Lilou, pour leur soutien, leur confiance, et pour tous les bons moments!

Sommaire

1	Introduction	7
1	Introduction générale	7
2	Etude de la méthode de Boltzmann sur réseau	8
3	Analyse de problèmes en électrophysiologie cardio-vasculaire	11
I	Méthode de Boltzmann sur réseau	13
2	Equation de Boltzmann continue	15
1	Histoire	15
2	Propriétés de l'équation de Boltzmann continue	18
2.1	Opérateur de collision binaire	18
3	Invariants de collision et équations de conservation	20
4	Théorème \mathcal{H} et fonction de répartition d'équilibre	21
5	Opérateur de collision BGK	22
3	Equation de Boltzmann sur réseau	23
1	Discrétisation	23
2	Modèles DdQn	24
3	Modèle D2Q9	27
4	Méthode des caractéristiques	28
5	Algorithme	32
4	Developpement de Chapman-Enskog	35
1	Adimensionnement	36
2	Principe	37
3	Développement d'ordre 2	41
5	Traitement des conditions aux bords	45
1	Méthode d'interpolation de la partie perturbée	47
2	Méthode auto-corrective.	51
3	Traitement de bords quelconques en dimension 2	51
4	Traitement des conditions initiales	52

II	Simulation et analyse de LBM pour des problèmes issus du monde réel.	53
6	LBM pour des équations de réaction-diffusion	57
1	Définition du problème	57
2	Définition de la méthode	58
3	Applications	64
3.1	Benchmark et estimation numérique de l'erreur	64
3.2	Equation de Burger-Fisher	65
3.3	Equation de conduction de la chaleur non-linéaire	68
3.4	Écoulements dans un milieu poreux	72
7	LBM pour des équations elliptiques.	77
1	Définition du problème	77
2	Définition de la méthode	78
3	Applications	81
3.1	Benchmarks et estimation numérique de l'erreur	81
3.2	Équation de Helmholtz homogène	84
8	LBM pour des systèmes d'EDPs couplées.	89
1	Définition du problème	89
2	Définition de la méthode	90
3	Initialisation des fonctions de répartition	95
4	Application au modèle de Patlak-Keller-Segel	96
4.1	Benchmarks et estimation numérique de l'erreur	96
4.2	Application à un problème réel	99
9	LBM pour des EDPs à valeurs complexes.	105
1	Définition du problème	105
2	Définition de la méthode	106
3	Application à l'équation de Schrödinger non-linéaire	110
III	Modélisation et analyse mathématique et numérique de problèmes réalistes en électrophysiologie	117
10	Coupled LBM for bidomain type models.	121
1	Introduction	121
2	The bidomain Model	122
3	Numerical method and algorithm	124
3.1	LBM for coupled parabolic and elliptic equations	124
3.2	Treatment of ODE	126
4	Numerical simulation and applications	127
4.1	Benchmark problem and validation	128
4.2	Problem with realistic data	128

5	Conclusion	130
11	LBM for coupled heart and torso bidomain system.	131
1	Introduction	132
2	The bidomain Model	133
3	Numerical method and algorithm	136
3.1	LBM for coupled parabolic and elliptic equations	137
3.2	Treatment of ODE	154
3.3	Algorithm	154
4	Numerical simulation and applications	155
4.1	Benchmark problem and validation	157
4.2	Study of an action potential in heart and torso	159
5	Conclusion and commentary	162
6	Appendix	166
6.1	Nondimensional model	166
6.2	Implementation and Algorithm	167
7	Application pour un domaine à géométrie quelconque	168
12	Time-varying delays bidomain models	173
1	Introduction	173
2	Time-delays bidomain Model	174
3	Well-Posedness of the State System	177
3.1	Assumptions, weak formulation and preliminary results	177
4	Numerical applications	187
4.1	FitzHugh-Nagumo ionic model	190
4.2	Mitchell-Schaeffer ionic model	192
5	Conclusion and commentary	195
13	LBM for bidomain type models with time-delays.	197
1	Introduction	197
2	Time delay bidomain Model	199
3	Numerical method and algorithm	201
3.1	LBM for coupled parabolic and elliptic equations	201
3.2	Treatment of ODE	205
3.3	Numerical Algorithm	206
4	Numerical simulation and applications	207
4.1	Benchmark problem and validation	208
4.2	Influence of some parameters on electrical wave propagation	211
5	Conclusion and commentary	217
14	Conclusion	225

1 Introduction

1 Introduction générale

Au cours des dernières décennies, les mathématiques appliquées et en particulier la modélisation et la simulation numérique se sont développées à une vitesse impressionnante, notamment grâce à l'arrivée de moyens informatiques de plus en plus performants et à une compréhension des phénomènes physiques de plus en plus fine. Les enjeux et les perspectives restent cependant très vastes. En effet, des méthodes numériques stables, robustes et efficaces sont nécessaires dans des domaines très variés. On peut notamment citer la mécanique des fluides, où l'approximation de solutions des équations de Navier-Stokes permet de mieux apprécier et anticiper des phénomènes météorologiques ou océanographiques, la dynamique des populations (modèle de type Lotka-Volterra) pour, par exemple, prévoir et prévenir des extinctions ou des proliférations d'espèces animales ou végétales, des phénomènes biologiques, biomédicaux ou écologiques, souvent modélisés par des systèmes d'advection-réaction-diffusion, pour comprendre des processus inhérents à ces systèmes et par exemple améliorer le traitement de la cancérologie, contrôler la propagation d'une épidémie, optimiser des outils d'aide à la décision, ou encore réduire la consommation énergétique, ou bien encore des phénomènes électromagnétique ou optique, basés sur les équations de Schrödinger, Maxwell ou Boltzmann à l'échelle des particules. Dans tous ces cas, le choix du modèle mathématique est déterminant pour mieux approcher et analyser le problème considéré. Il faut en effet tenir compte de chaque variable impactant le système, négliger celles qui peuvent l'être, et exprimer avec précision des comportements aussi proches que possible de la réalité. Il est également indispensable de développer des méthodes numériques adaptées au modèle choisi, efficaces, tout en restant simples à mettre en œuvre. Pour cela, il faut analyser la convergence et la stabilité de ces méthodes, les valider sur des benchmarks, avant de les appliquer à des cas réalistes.

Dans cette thèse, nous nous intéressons au développement de techniques numériques basées sur la méthode de Boltzmann sur réseau pour résoudre des systèmes de type advection-réaction-diffusion appliqués à l'électrophysiologie cardiaque. La LBM a été définie dans les années 90 [101, 79, 7] et est basée sur la résolution de l'équation continue de Boltzmann, permettant d'étudier le comportement de champs de particules. Chaque problème réel (physique, chimique ou biologique) peut se ramener à un problème à l'échelle des particules, dite échelle mésoscopique. Les techniques ainsi développées nous permettent d'approcher numériquement la solution de ces problèmes en recomposant les quantités macroscopiques ou moyennées (comme des densités, des vitesses, de l'énergie, etc...). A notre connaissance, aucune méthode de Boltzmann appliquée au système permettant d'étudier les changements de potentiels électriques dans le cœur n'a à ce jour

été proposée, et il nous semble pertinent d'établir une méthode adaptée à ce type de problème. Notre objectif est de proposer une nouvelle méthode permettant de reproduire des comportements électriques réalistes et de servir de base à l'élaboration de méthodes plus sophistiquées pour le traitement de problèmes aux données réalistes.

Le travail de cette thèse est décomposé en deux parties principales. Dans la première (Part II à III), nous présentons les bases théoriques nécessaires à la définition d'une méthode de Boltzmann et nous présentons des méthodes inspirées de LBM existantes (voir [38, 122, 123, 132, 133]). Cette première grande partie a pour objectif de définir une méthode générale, permettant de résoudre des types de problèmes variés, et facilement adaptable. Ainsi, nous nous sommes tour à tour intéressés à la résolution d'équations aux dérivées partielles non-linéaires de type paraboliques, elliptiques, ou couplées, et à variables réelles ou complexes, avec des applications à des problèmes provenant de la physique et de la biologie. Chacune de ces méthodes fait l'objet d'une étude particulière concernant la stabilité, la convergence, et est appliquée à plusieurs exemples. La principale difficulté rencontrée dans la définition d'une méthode de Boltzmann réside dans la transposition des opérateurs différentiels à échelle mésoscopique au sein de la LBM (LBM pour *Lattice Boltzmann Method*). Nous utilisons pour cela le développement de Chapman-Enskog, basé sur la séparation de chaque fonction et opérateur selon plusieurs échelles de perturbation, pour assurer le lien entre les solutions approchées obtenues et les solutions des équations traitées à l'échelle macroscopique.

Dans la seconde partie (Part IV), on définit une nouvelle méthode de Boltzmann pour la résolution d'un problème d'électrophysiologie cardiaque, modélisé par un système d'équations de type bidomaine, constitué d'équations paraboliques et elliptiques non-linéaires couplées, et d'une EDO. Ce modèle permet d'étudier la propagation d'ondes électriques dans les tissus musculaires du cœur (le myocarde), en tenant compte des phénomènes ioniques. Nous traitons des exemples simples permettant de retrouver des comportements électriques classiques. Puis, nous introduisons des opérateurs permettant de tenir compte des phénomènes de retards. Après une analyse mathématique du système obtenu, nous étudions l'impact de ces opérateurs sur le comportement électrique. Le but est à terme d'obtenir une méthode pouvant servir de base à l'élaboration de LBM appliquées à des problèmes plus complexes et aux données plus réalistes.

Les méthodes proposées sont implémentés sous Matlab dans le cadre de cette thèse. Les bibliothèques proposées, l'efficacité des calculs matriciels et de la manipulation de vecteurs ainsi que les possibilités d'affichages ont motivé ce choix. La réduction du temps de calcul, la définition de maillages non-structurés ou encore l'amélioration des performances de calculs feront l'objet d'un travail ultérieur, avec notamment un portage du code en langage C++ afin de pouvoir être intégré à un logiciel de calcul complet.

2 Etude de la méthode de Boltzmann sur réseau

Dans les parties II et III de cette thèse, on s'intéresse à la méthode de Boltzmann sur réseau (LBM pour *Lattice Boltzmann Method*), et on propose divers modèles permettant de l'appliquer à la résolution de problèmes variés. Dans la partie II, on introduit la LBM. On revient tout d'abord sur les bases théoriques sur lesquelles la méthode repose. On détaille ensuite les éléments nous permettant de définir une LBM adaptée à la résolution d'équations aux dérivées partielles

non-linéaires. Les méthodes obtenues sont analysées et validées sur des benchmarks, puis étudiées pour des applications à des problèmes réalistes de physiques (écoulement dans un milieu poreux, conduction de la chaleur), de chimie (problème de chimiotaxie), ou d'optique (recherche de modes propres dans l'équation de d'Alembert et étude de phénomène dit de *self-trapping* avec l'équation de Schrödinger).

Pour ce faire, on commence dans le Chapitre 2 par dresser l'état de l'art concernant la LBM. Après avoir retracé l'histoire de la méthode, on termine par faire un tour d'horizon des méthodes de Boltzmann telles que nous les utilisons aujourd'hui. Cette histoire débute par l'introduction de l'équation de Boltzmann continue pour l'étude des gaz parfaits. Celle-ci a été proposée et étudiée par Boltzmann et Maxwell, et est utilisée en théorie cinétique et en physique statistique. La seconde grande étape est l'arrivée des automates cellulaires dans la première moitié du XX^{me} siècle, que l'on peut imputer à l'arrivée des premiers outils informatique et aux travaux de Von Neumann sur les automates. Le lien est ensuite fait entre l'équation de Boltzmann continue et les équations de Navier-Stokes (voir [56]), ouvrant les portes aux premières véritables LBM. En utilisant la même démarche que pour l'élaboration d'automates cellulaires, les premières méthodes de Boltzmann sur réseau sont appliquées à des problèmes de mécanique des fluides. Ce n'est qu'au cours de ces vingt dernières années que des méthodes de Boltzmann sont introduites pour résoudre des problèmes plus variés. La méthode est alors adaptée pour traiter d'autres type de problèmes. Ces adaptations s'appuient sur l'utilisation d'ansatz (méthode de Chapman-Enskog) permettant de mettre en relation une forme discrétisée de l'équation de Boltzmann continue, appelée équation de Boltzmann sur réseau (LBE pour *Lattice Boltzmann Equation*), avec un développement de Taylor.

Pour introduire les LBM, toujours dans le Chapitre 2, on part de l'équation de Boltzmann telle qu'elle est formulée en 1872. Elle est constituée d'un opérateur de collision, d'un opérateur de transport, et tient compte du champ moyen créé par des forces extérieures exercées sur le nuage de particules traité. On associe des fonctions de répartitions particulières à chaque direction selon lesquelles les particules sont transportées entre deux instants. Ces fonctions de répartitions sont des densités de probabilité traduisant la quantité de particules susceptibles d'être transportées selon la vitesse associée. On s'intéresse en particulier à la modélisation de l'opérateur de collision, qui demeure encore aujourd'hui un sujet de recherche ouvert. On détermine du même coup les propriétés que doit nécessairement respecter celui-ci au sein de la LBM afin d'obtenir un comportement particulaire réaliste malgré les simplifications faites.

Dans le Chapitre 3, on explique comment passer de l'équation de Boltzmann continue à l'équation de Boltzmann sur réseau. On discrétise dans un premier temps l'équation de Boltzmann en temps, en espace, et selon l'espace des vitesses pour obtenir l'équation de Boltzmann à vitesses discrètes. Les choix de discrétisations effectués permettent de classer les différentes LBM selon plusieurs grandes familles, notées $DdQn$, en fonction de la dimension en espace d , et en fonction du nombre de vitesses choisies n . Une fois cette discrétisation définie, on utilise la méthode des caractéristiques pour passer de l'équation de Boltzmann dans sa forme discrétisée à la LBE. Quel que soit le modèle choisi, la LBE peut se séparer en deux phases distinctes à chaque pas de temps: une phase de collision entre les particules, et une phase de transport durant laquelle les particules vont migrer d'un noeud à l'autre du maillage recouvrant le domaine d'étude. C'est cette séparation en deux phases distinctes qui rend cette méthode si intéressante. Elle garantit

d'une part une implémentation simple et légère, économe en nombre d'opérations par itération, et elle ouvre d'autre part la voie à des possibilités de parallélisation des codes très efficaces pour des problèmes complexes ou des maillages très fins. En effet, la phase de collision est strictement locale en espace, et s'effectue sur chaque noeud de manière totalement indépendante. La phase de transport est quant à elle effectuée selon chaque vélocité, menant les particules d'un noeud à l'autre. Il n'y a donc pas de dépendance entre les noeuds ou les directions lors de ces phases. Ainsi, selon le problème traité, il est possible d'obtenir des méthodes de Boltzmann légères en terme d'implémentation et de mémoire pour une précision équivalente à d'autres méthodes (différences finies, éléments ou volumes finis, etc).

Une fois la LBM définie, on détaille comment on parvient à résoudre une équation aux dérivées partielles (portant sur des quantités macroscopiques) en résolvant la LBE (portant sur des quantités mésoscopiques). On utilise pour cela le développement de Chapman-Enskog que l'on définit dans le Chapitre 4. Ce développement est un ansatz permettant de séparer les fonctions de répartitions particulières, les termes sources, et les opérateurs différentiels selon différentes échelles de perturbation associées au nombre de Knudsen. Ce nombre est un ratio entre la longueur moyenne parcouru par une particule entre deux collisions, et une longueur caractéristique associée au domaine. En séparant selon ces échelles de perturbation, et en mettant en relation la LBE et le développement de Taylor, on parvient à l'aide de sommation à recomposer les quantités macroscopiques et les opérateurs différentiels constituant l'équation aux dérivées partielles à retrouver.

Enfin, dans le Chapitre 5, on explique comment traiter les conditions aux bords relatifs aux équations différentielles macroscopiques en terme de répartitions particulières à échelle mésoscopique. Ce traitement est sans doute l'un des aspects les plus délicats de la LBM. En effet, selon le problème traité, la LBM définie, et la méthode de traitement des conditions aux bords choisie, des instabilités numériques peuvent survenir et la convergence de la méthode vers la solution est alors impossible. Lors des phases de transport, nous n'avons a priori aucune information concernant la répartition des particules entrantes dans le domaine. On présente les principales méthodes classiques permettant de compenser ce manque d'informations, que ce soit à l'aide d'interpolation à partir des noeuds voisins, ou à partir de transposition directe de comportements macroscopiques en terme de répartitions particulières. On détaille plus particulièrement un compromis que l'on fait entre ces approches classiques pour définir la méthode d'interpolation dont nous nous servons dans la Partie III.

La Partie III concerne les adaptations de la LBM que l'on définit pour étudier des problèmes variés. Les problèmes que l'on traite proviennent de problèmes réalistes inhérents à la physique, la biologie, la médecine, la chimie ou la géologie. Notre but est d'obtenir à terme des LBM applicables à des systèmes d'équations différentielles non-linéaires provenant de la physique, de la biologie ou de la chimie. On propose dans un premier temps dans le Chapitre 6 des LBM permettant de résoudre différents types d'équations aux dérivées partielles non-linéaires. Tout d'abord, on s'intéresse à des équations aux dérivées partielles paraboliques non-linéaires de type réaction-diffusion. Ce type d'équations est utilisé pour décrire la dynamique de phénomènes naturels en chimie, biologie, écologie, géologie, ou dans des cadres plus abstraits comme en sciences économiques ou en dynamique des populations. Plus particulièrement, on s'intéresse à l'équation de Burger-Fisher et à l'équation de conduction de la chaleur non-linéaire. Puis, dans le Chapitre 7 on apporte une alternative à cette première méthode afin de pouvoir résoudre des équations

elliptiques. Pour appliquer cette nouvelle méthode, on choisit de traiter l'équation de Helmholtz, utilisée notamment pour calculer les modes propres de l'équation de d'Alembert. Cette dernière est utilisée pour étudier des phénomènes ondulatoires. On traite ensuite dans le Chapitre 8 des systèmes d'équations couplées paraboliques et/ou elliptiques. On définit donc une LBM que l'on utilise pour la résolution d'un système de Keller-Segel pour la chimiotaxie. Enfin, dans le Chapitre 9, on propose une LBM pour des problèmes à variables complexes afin de pouvoir traiter, par exemple, l'équation de Shrödinger non-linéaire que l'on utilise notamment dans des problèmes d'optique pour étudier des phénomènes de *self-trapping*.

L'ensemble de ces méthodes de Boltzmann, définies à partir de modèles existants, nous permettent de définir une méthode de Boltzmann adaptée au problème d'électrophysiologie cardio-vasculaire que l'on étudie par la suite.

3 Analyse mathématique et numérique de problèmes en électrophysiologie cardio-vasculaire

L'étude des problèmes d'électrophysiologie cardio-vasculaire, et notamment du comportement des potentiels électriques dans le cœur, est un des enjeux sanitaires majeurs de ces prochaines années. En effet, les troubles du rythme cardiaque peuvent entraîner des accidents vasculaires cérébraux, des crises ou insuffisances cardiaques, ou d'autres complications. Des facteurs comme le vieillissement de la population, l'évolution des habitudes alimentaires ou des modes de vie en général favorisent le développement de ces troubles, et on assiste d'année en année à une augmentation du nombre de cas d'arythmies. Certains traitements contre ces troubles passent par l'installation de défibrillateurs automatiques implantables. La défibrillation ou les électrochocs sont aussi utilisée dans le cadre d'urgences cardiaques (arrêt cardiaque, crise cardiaque, malaise, etc.), et il est essentiel d'adapter le stimulus exercé en fonction du métabolisme du patient et de la situation.

Nous développons dans cette partie un modèle bidomaine permettant d'étudier la propagation d'ondes électriques dans les tissus musculaires du cœur (le myocarde), en tenant compte de l'activité ionique et en introduisant des opérateurs de retard pour obtenir des comportements plus réalistes. Pour cela, on procède en plusieurs étapes. Dans un premier temps, dans le Chapitre 10, on développe notre méthode de Boltzmann sur un système bidomaine sans retard (voir [46]). Ce système est le couplage d'une équation différentielle parabolique non-linéaire, d'une équation elliptique non-linéaire, et une équation différentielle ordinaire. Dans le Chapitre 11, pour élargir ces résultats, on ajoute un couplage avec le thorax (voir [48]). On a ainsi un domaine plus réaliste, approchant mieux le corps humain, car il prend en compte la diffusion du potentiel électrique à travers le thorax avant d'atteindre le myocarde. Dans le Chapitre 12, on introduit dans le système bidomaine des opérateurs de retard. Nous reprenons alors la démarche suivie dans l'article [17] pour démontrer l'existence et l'unicité de la solution d'un tel système. Une fois ce résultat démontré et illustré par quelques applications, nous étudions numériquement dans le chapitre 13 l'impact de ces opérateurs de retard sur le système, en comparant les résultats «sans retard» et «avec retard» dans le cas de données réalistes : dans le cas avec retard, on retrouve bien les phénomènes d'auto-excitations attendus. En effet, en tenant compte des retards, on obtient des potentiels d'actions réguliers. Ce résultat correspond aux battements supposés réguliers du cœur, engendrés par les cycles de potentiels d'actions et par les fermetures et ouvertures régulières des

canaux ioniques.

On obtient finalement un modèle mathématique complet permettant de résoudre des problèmes réalistes d'électrophysiologie, adaptable à des domaines variés. La méthode obtenue peut être complétée par la suite, en y introduisant par exemple des maillages adaptatifs, ou en utilisant des techniques de parallélisation (voir [35, 116, 118]), ou adaptée à des problèmes en $3D$ afin de simuler des problèmes plus complexes et plus réalistes.

Part I

Méthode de Boltzmann sur réseau

2 Equation de Boltzmann continue : histoire, définitions et propriétés

Nous nous intéressons dans ce chapitre à l'équation de Boltzmann continue, son histoire, les propriétés inhérentes à l'opérateur de collision, et nous introduisons quelques définitions dont nous nous servirons pour définir des méthodes de Boltzmann sur réseau. Pour étudier cette équation et établir les propriétés essentielles de l'opérateur de collision, nous nous appuyons principalement sur les notes [68] et [22].

1 Histoire

La méthode de Boltzmann sur réseau (ou *Lattice Boltzmann Method*, notée LBM) a été introduite pour la première fois dans les années 1980. Cependant, il faut remonter jusqu'au XIX^{ème} siècle et aux premières recherches en physique statistique pour trouver les origines de cette méthode. Entre les travaux de Maxwell et Boltzmann, la formulation de l'équation de Boltzmann continue en 1872, et les LBM proposées de nos jours, il y a eu plusieurs étapes clefs, dont l'arrivée de moyens informatiques et des premiers automates cellulaires élaborés au cours du XX^{ème} siècle.

La physique statistique a pour but d'étudier les comportements de champs de particules. En se plaçant à cette échelle, le but est d'étudier le comportement cinétique des gaz, non pas sous forme macroscopique (par le biais de quantités moyennées comme des densités, des vitesses, des températures ou des pressions), mais en se penchant directement sur les interactions qui ont lieu à l'échelle microscopique. Bien que séduisante sur le plan théorique, cette démarche se heurte aux problèmes d'échelles. En effet, même avec les moyens dont nous disposons actuellement il est impossible de représenter fidèlement les comportements de molécules en trop grande quantité au sein d'un champs de particules. Ainsi, en 1872, Boltzmann proposa un compromis à l'échelle des particules (échelle mésoscopique). Il propose d'étudier les mouvements de particules à travers l'évolution d'une fonction de distribution particulaire $f = f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})$ à un instant $t \in [0, T]$, en un point $\mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d \geq 1$) et soumise à une vitesse $\mathbf{e} \in \mathbb{R}^d$. Autrement dit, $f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})$ exprime la probabilité que les particules situées au point \mathbf{x} se déplacent dans la direction de \mathbf{e} après l'instant t (en tant que densité de probabilité, cette fonction est positive i.e: $f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) > 0$, $\forall (\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) \in \Omega \times (0, T) \times \mathbb{R}^d$). L'équation de Boltzmann (voir [24], [36]) exprime l'évolution de cette quantité, et est définie par (pour tout $(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{Q} = \Omega \times (0, T)$, et $\mathbf{e} \in \mathbb{R}^d$),

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e} \cdot \nabla \right) f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) + \frac{F}{m} \nabla_{\mathbf{e}} f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) = Q(f)(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}), \quad (2.1)$$

où le terme $\frac{F}{m}\nabla_{\mathbf{e}}f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})$ représente le champ moyen créé par les forces extérieures exercées sur le champs de particules en fonction des particules évoluant selon la vitesse \mathbf{e} , m est la masse associée à la distribution particulière $f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})$, ∇ est la dérivée selon la variable d'espace \mathbf{x} et $\nabla_{\mathbf{e}}$ est la dérivée selon le vecteur des vitesses \mathbf{e} . L'opérateur $(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e} \cdot \nabla)$ correspond au transport libre selon les vitesses décrites par le vecteur \mathbf{e} . En ajoutant à cet opérateur de transport libre la prise en compte des forces extérieures, nous obtenons l'opérateur de Liouville non relativiste $\mathcal{L} = (\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e} \cdot \nabla + \frac{F}{m}\nabla_{\mathbf{e}})$. L'équation $\mathcal{L}(f) = 0$ est appelée équation de Liouville à une particule et ne permet pas de tenir compte des collisions particulières. Celles-ci sont modélisées par l'opérateur de collision particulière Q . Cet opérateur traduit l'ensemble des collisions qui ont lieu entre les particules au voisinage du point \mathbf{x} . La principale difficulté dans le cadre de l'étude de cette équation est de modéliser fidèlement cet opérateur de collisions (voir [52]). A l'origine, Boltzmann propose plusieurs modèles pour le cas de collisions de deux particules, mais ces résultats montrent certaines limites et ne sont validés pour des cas simples qu'après sa mort en 1906.

Par la suite, dans les années 1920, Sydney Chapman et David Enskog [39] vérifient, en s'appuyant sur la loi de distribution des vitesses de Maxwell, la validité du modèle de Boltzmann. Cette preuve repose sur une succession de développements basés sur la séparation de chaque fonction et opérateur selon plusieurs échelles de perturbation, liées au nombre de Knudsen ε . Cette échelle est un ratio entre la distance parcourue en moyenne par chaque particule entre deux collisions et la longueur caractéristique du domaine d'étude Ω . Ces développements, ou *ansatz*, mettent notamment en valeur les liens très étroits entre l'équation de Boltzmann et les équations de Navier-Stokes. Depuis, cette démarche a été largement utilisée pour faire le lien entre l'équation de Boltzmann et d'autres types d'équations aux dérivées partielles, et est la méthode la plus utilisée pour définir la méthode de Boltzmann sur réseau.

Toutes ces démonstrations réalisées au début du XX^{ime} siècle reposent sur une formulation de l'opérateur de collision extrêmement spécifique et très difficile à appliquer à des cas réalistes. Cette complexité les rend notamment inutilisable d'un point de vue numérique, et il est donc nécessaire d'utiliser des modèles simplifiés. On peut séparer les modèles d'opérateurs de collision en deux grandes familles. La première englobe les opérateurs à temps de relaxation multiple de type MRT (*Multiple Relaxation Time*), introduits en 1992 par D. d'Humièrre [78], ou des opérateurs à temps de relaxation simple (dits SRT, *Single Relaxation Time*), dont le modèle le plus répandu est l'opérateur BGK que nous utilisons dans cette thèse. Il existe par ailleurs des modèles plus complexes, cherchant à se rapprocher plus fidèlement de la forme générale de l'opérateur Q (voir par exemple [90], [108]).

L'opérateur BGK classique, proposé en 1954 par Bhatnagar, Gross et Krook [19], est défini par:

$$Q_{BGK}(f)(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) = -\frac{1}{\tau}(f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) - f^{eq}(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})). \quad (2.2)$$

Cette représentation fait le lien entre une fonction de répartition d'équilibre f^{eq} , également liée à la loi de distribution des vitesses de Maxwell, et un taux de relaxation τ . Par la suite, nous utilisons uniquement cet opérateur de collision, et nous le notons simplement Q .

Après ces avancées en terme de modélisation, il faut attendre l'arrivée de l'informatique, du calcul binaire, et de la simulation numérique quelques années plus tard pour que J. von Neumann

propose les premiers automates cellulaires [107]. La discrétisation en temps et en espace des domaines d'étude, des vitesse \mathbf{e} , et l'approche booléenne ouvrent la voie à des méthodes simples à implémenter et extrêmement proches de la nature booléenne des collisions. Les premiers modèles d'automates cellulaires pour la simulation de problèmes de mécanique des fluides ou pour l'étude des gaz (appelés *Lattice gas automata* ou *Lattice gas cellular automata*) sont proposés entre 1973 [70] et 1976 [71] par J. Hardy, O. de Pazzis et Y. Pomeaux. Des méthodes basées sur les automates cellulaires continuent à se développer jusqu'à la fin des années 1980 malgré plusieurs handicaps comme l'utilisation de valeurs booléennes, et une forte sensibilité numérique. L'idée principale de ces automates est de discrétiser l'espace sous forme de réseau à mailles carrées de pas $\Delta \mathbf{x} = 1$ et d'associer à chaque site des particules qui sont amenées à se déplacer et à entrer en collision à travers le temps. On associe donc à chaque arête du réseau une valeur binaire: 1 si une particule se déplace sur l'arête, 0 sinon. Puis, pour chaque pas de temps $\Delta t = 1$, on modélise le comportement des particules en deux étapes distinctes: une phase de collision locale ne modifiant que la trajectoire des particules, et une phase de transport selon chaque direction de chaque noeud, lors de laquelle les particules vont se déplacer selon la direction associée.

Le premier pas liant la méthode de Boltzmann sur réseau et les automates cellulaires est fait pour la première fois en 1988 par G. McNamara et G. Zanetti [101]. Ce travail reprend notamment la méthode proposée par D. D'Humière et P. Lallemand [79], et celle proposée par K. Balasubramanian, F. Hayot, et W. F. Saam [7]. L'approche est ici la même que dans le cadre des automates cellulaires utilisant des variables booléennes, mais celles-ci sont remplacées par des densités de probabilité à travers les fonctions de distribution particulaire discrètes f_j associées aux vitesses discrètes \mathbf{e}_j . L'introduction de ces fonctions permet de palier à la quantité de ressources trop importante dont avait besoin les anciens modèles pour être stables et utilisables. Par la suite, les relations fortes entre les équations de Navier-Stokes et l'équation de Boltzmann continue ouvrent la voie à de nouvelles applications. En effet, He & Lu [73] montrent que le schéma de Boltzmann sur réseau appliqué aux équations de Navier-Stokes peut être directement dérivé de l'équation de Boltzmann continue. Ainsi, de nombreuses méthodes de Boltzmann sur réseau sont proposées pour la simulation en mécanique des fluides. On trouve les origines de ces méthodes en 1992 par le biais d'une méthode fortement inspiré des automates cellulaires et proposée par F.J. Alexander [3].

Les méthodes de Boltzmann adaptées à d'autres types d'équations apparaissent également dans les années 90. Les premiers modèles traitant des équations de réaction-diffusion sont proposés en 1992 par S. Ponce Dawson, S. Chen, et G. D. Dool [112], en s'inspirant là encore, de modèles de gaz cellulaire proposés peu avant [29] [81]. Ces modèles serviront plus tard de base aux modèles proposés par Xiang X. [132], inspiré du travail de Shi B. [123], sur lequel nous nous appuyons à notre tour. Ce modèle plus général peut à nouveau être modifié afin de résoudre des équations elliptiques, dépourvues de dérivées en temps (voir [38]). On peut également adapter ces méthodes pour résoudre des systèmes d'équations couplées plus généraux que dans le cadre de la résolution des équations de Navier-Stokes (voir [133] ou [135]). Enfin, l'idée mise en oeuvre pour la résolution d'équations couplées peut s'adapter afin de résoudre des équations à valeurs complexes, en séparant les parties réelles et imaginaires des fonctions, comme notamment proposé par B. Shi [122]. Ainsi, à l'aide de ces différentes méthodes, nous pouvons aujourd'hui construire des méthodes de Boltzmann variées et adaptées à de nombreux types de problèmes.

Nota bene: Nous considérons par la suite un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ (i.e., $d = 3$).

2 Propriétés de l'équation de Boltzmann continue

On considère un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ de bord $\partial\Omega$, au sein duquel évolue un nuage de particules formant un gaz peu dense durant un intervalle de temps $(0, T)$.

Les fonctions de répartition particulaire $f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})$, solutions de (13.14), décrivent les particules à l'échelle mésoscopique, mais il est possible de faire le lien avec des quantités macroscopiques en les intégrant selon l'ensemble des vitesses \mathbf{e} auxquelles elles sont associées dans \mathbb{R}^3 . On peut ainsi recomposer la masse volumique ρ , la quantité de mouvement $\rho\mathbf{u}$ ou encore l'énergie cinétique E par intégration, telles que:

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{x}, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) d\mathbf{e}, \\ \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{e}f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) d\mathbf{e}, \\ \rho(\mathbf{x}, t)E(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{2}\rho(\mathbf{x}, t)|\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)|^2 &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{e}|^2 f(t, \mathbf{x}; \mathbf{e}) d\mathbf{e}.\end{aligned}\tag{2.3}$$

Ces grandeurs définies par intégration selon les vitesses \mathbf{e} à partir de la fonction de distribution particulaire $f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})$ sont appelées des moments. D'autres moments d'ordres plus élevés peuvent également être étudiés (voir [40]), mais nous n'étudions pas de problèmes nécessitant de prendre en compte des moments d'ordres plus élevés dans cette thèse.

2.1 Opérateur de collision binaire

On suppose que les collisions sont binaires, c'est-à-dire transforment un couple de vitesses $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ (pré-collision) en un couple $(\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2)$ (post-collision) et que les vitesses de deux particules de gaz qui entrent en collision sont a priori décorrélatées (hypothèse du chaos moléculaire). Les vitesses $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}'_1$ et \mathbf{e}'_2 respectent les égalités :

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 &= \mathbf{e}'_1 + \mathbf{e}'_2, \\ |\mathbf{e}_1|^2 + |\mathbf{e}_2|^2 &= |\mathbf{e}'_1|^2 + |\mathbf{e}'_2|^2.\end{aligned}\tag{2.4}$$

Cette hypothèse revient à supposer qu'il n'y a pas de corrélation entre les vitesses des particules entrant en collision, et que ces collisions ne dépendent pas non plus de l'espace. Autrement dit, trouver une particule au voisinage d'un point \mathbf{x}_1 se déplaçant selon une vitesse \mathbf{e}_1 ne donnera aucune information sur la probabilité de trouver une particule au voisinage d'un point \mathbf{x}_2 se déplaçant selon une vitesse \mathbf{e}_2 . De plus, on considère les particules comme des sphères dures possédant des masses ponctuelles. Cela revient à considérer que les collisions entre les particules sont de même type que des collisions que l'on peut observer entre deux billes, et à considérer que la masse d'une particule est concentrée en son centre de gravité. Ces deux hypothèses garantissent des collisions élastiques. Ainsi, cf Figure 2.1, deux particules se déplaçant selon des vitesses \mathbf{e}_1 et \mathbf{e}_2 avant collision se déplacent selon des vitesses \mathbf{e}'_1 et \mathbf{e}'_2 après collision, comme nous l'avons

défini à travers la propriété (2.4).

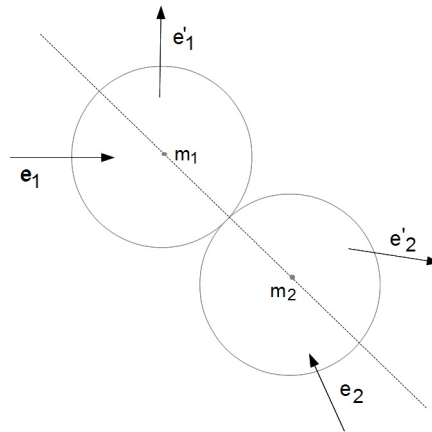


Figure 2.1: Schéma d'une collision binaire entre deux particules de vitesses \mathbf{e}_1 et \mathbf{e}_2 et de centre de gravité m_1 et m_2 .

On peut définir maintenant les opérateurs de collision binaire.

Définition 2.1 : Opérateur de collision.

Un opérateur de collision binaire Q est un opérateur permettant de modéliser les collisions binaires entre particules de même masse en fonction de leur fonction de distribution f . Sous les hypothèses précédentes, Q peut s'écrire sous la forme

$$Q(f)(\mathbf{e}_1) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathcal{S}^2} \sigma_{\mathbb{R}^3}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{w}) (f(\mathbf{e}'_1)f(\mathbf{e}'_2) - f(\mathbf{e}_1)f(\mathbf{e}_2)) d\mathbf{w}d\mathbf{e}_2, \quad (2.5)$$

où \mathcal{S}^2 est la sphère unité, $\sigma_{\mathbb{R}^3}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{w}) > 0$ pour tout $\mathbf{e}_1 \neq \mathbf{e}_2$, représente la section différentielle de collision, ou noyau de collision. Ce noyau de collision décrit la probabilité qu'une particule se déplaçant selon une vitesse \mathbf{e}_1 entre en collision avec une particule se déplaçant selon une vitesse \mathbf{e}_2 et soit déviée selon une direction $\mathbf{w} = (\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}'_1)/|\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}'_1|$. Les fonctions $f(\mathbf{e}'_1) = f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}'_1)$ et $f(\mathbf{e}'_2) = f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}'_2)$ sont les distributions particulières post-collision associées respectivement aux distributions $f(\mathbf{e}_1) = f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}_1)$ et $f(\mathbf{e}_2) = f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}_2)$. \square

La section de collision $\sigma_{\mathbb{R}^3}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{w})$ traduit une autre hypothèse nécessaire à la définition de l'opérateur de collision Q , à savoir l'hypothèse de masse ponctuelle.

Pour finir cette section, on énonce la proposition suivante dont la preuve est donnée dans [68]:

Propriété 2.1 .

Soit f une fonction de distribution particulière continue à support compact et φ une fonction continue quelconque. Alors l'opérateur de collision binaire Q satisfait la relation suivante

$$\int_{\mathbb{R}^3} Q(f)(\mathbf{e}_1)\varphi(\mathbf{e}_1)d\mathbf{e}_1 = \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathcal{S}^2} \sigma_{\mathbb{R}^3}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{w}) (f(\mathbf{e}'_1)f(\mathbf{e}'_2) - f(\mathbf{e}_1)f(\mathbf{e}_2)) (\varphi(\mathbf{e}'_1) + \varphi(\mathbf{e}'_2) - (\varphi(\mathbf{e}_1) + \varphi(\mathbf{e}_2))) d\mathbf{w}d\mathbf{e}_2d\mathbf{e}_1. \quad (2.6)$$

D'après l'expression (2.6) de la proposition (2.1), comme la fonction \ln est une fonction croissante, on en déduit que l'opérateur de collision binaire Q satisfait l'inégalité suivante (car $\sigma_{\mathbb{R}^3}$ est une fonction positive)

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathbb{R}^3} Q(f)(\mathbf{e}_1) \ln(f) d\mathbf{e}_1 \\
&= \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} \sigma_{\mathbb{R}^3}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{w}) (f(\mathbf{e}'_1) f(\mathbf{e}'_2) - f(\mathbf{e}_1) f(\mathbf{e}_2)) \\
&\quad (\ln f(\mathbf{e}_1) + \ln f(\mathbf{e}_2) - (\ln f(\mathbf{e}'_1) + \ln f(\mathbf{e}'_2))) d\mathbf{w} d\mathbf{e}_2 d\mathbf{e}_1 \\
&= \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} \sigma_{\mathbb{R}^3}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{w}) \\
&\quad (f(\mathbf{e}'_1) f(\mathbf{e}'_2) - f(\mathbf{e}_1) f(\mathbf{e}_2)) (\ln(f(\mathbf{e}_1) f(\mathbf{e}_2)) - \ln(f(\mathbf{e}'_1) f(\mathbf{e}'_2))) d\mathbf{w} d\mathbf{e}_2 d\mathbf{e}_1 \\
&\leq 0.
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Sous l'hypothèse d'élasticité des collisions, on peut prouver aussi que les opérateurs de collision possèdent des propriétés conservatives dites invariants de collision.

3 Invariants de collision et équations de conservation

L'élasticité des collisions assure la conservation de quantités comme la masse, la quantité de mouvement ou encore l'énergie cinétique. Elle induit du même coup une conservation de ces quantités avant et après la collision. L'opérateur de collision Q ne change en définitive que les orientations selon lesquelles se déplacent les particules, et donc la répartition globale des particules situées en \mathbf{x} . Leur conservation fait le lien entre les distributions particulières f et des grandeurs macroscopiques données par les équations (2.3).

On définit les invariants de collision en introduisant une fonction $\phi(\mathbf{e})$ selon la définition suivante:

Définition 2.2 : Invariants de collision.

Soit ϕ une fonction continue. On dit que ϕ est un invariant de collision si:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \phi(\mathbf{e}) Q(f)(\mathbf{e}) d\mathbf{e} = 0. \tag{2.8}$$

Par conséquent pour des opérateurs de collision binaire, on a par exemple les invariants de collision suivants :

$$\int_{\mathbb{R}^3} \phi_k(\mathbf{e}) Q(f)(\mathbf{e}) d\mathbf{e} = 0, \tag{2.9}$$

avec $\phi_0(\mathbf{e}) = 1$, $\phi_1(\mathbf{e}) = \mathbf{e}$ et $\phi_2(\mathbf{e}) = |\mathbf{e}|^2$.

On parle de moments conservés d'ordre $k = 0, 1, 2$. Ces moments conservés correspondent à la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie avant et après collision particulière. De plus, l'invariant général de collision ϕ peut s'écrire sous la forme d'une combinaison linéaire des ϕ_k i.e.,

$$\phi = \sum_{k=0}^2 \alpha_k \phi_k. \tag{2.10}$$

4 Théorème \mathcal{H} et fonction de répartition d'équilibre

Après avoir défini les invariants par collision, nous souhaitons définir la forme des fonctions de distribution f en l'absence de collision i.e., les fonctions f qui annulent l'opérateur de collision Q pour toute vélocité \mathbf{e} . Ces fonctions sont appelées fonctions de distributions à l'équilibre. Avant de les définir, nous introduisons une fonction \mathcal{H} et le théorème \mathcal{H} de Boltzmann (cf [24]), aussi appelé *Théorème η de Boltzmann*, relatif à l'entropie.

Théorème 2.1 : Théorème \mathcal{H} de Boltzmann.

Soit f une fonction de distribution particulière solution de l'équation de Boltzmann (13.14) sans application de forces extérieures et soit la quantité \mathcal{H} appelée entropie cinétique, définie par

$$\mathcal{H}(f)(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) \ln(f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})) d\mathbf{e}. \quad (2.11)$$

Alors, la fonction \mathcal{H} est bornée par rapport à $(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{Q}$, et est décroissante par rapport au temps i.e., $\forall (\mathbf{x}, t) \in \mathcal{Q}$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{H}(f) \leq 0. \quad (2.12)$$

Cette propriété est appelée le principe de dissipation de l'entropie.

Ce théorème découle des travaux de Boltzmann réalisés dans les années 1870, où il démontre qu'un gaz hors de son état d'équilibre se relaxe et se rapproche peu à peu de cet état d'équilibre. Cette idée est matérialisée à travers la fonction \mathcal{H} relative à l'entropie.

L'état d'équilibre est atteint par les fonctions de répartition d'équilibre particulière f^{eq} , que nous définissons par:

Définition 2.3 : fonctions de répartition d'équilibre.

Une fonction de répartition à l'équilibre f^{eq} est une fonction solution de

$$Q(f^{eq}) = 0, \quad (2.13)$$

et telle que la fonction f^{eq} réalise l'état d'équilibre entropique décrit par $\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{H}(f^{eq}) = 0$.

Ainsi une fonction d'équilibre f^{eq} satisfait l'égalité $f(\mathbf{e}'_1)f(\mathbf{e}'_2) = f(\mathbf{e}_1)f(\mathbf{e}_2)$ et on a

$$\ln(f(\mathbf{e}'_1)) + \ln(f(\mathbf{e}'_2)) - (\ln(f(\mathbf{e}_1)) + \ln(f(\mathbf{e}_2))) = 0.$$

D'après la proposition 2.1, on en déduit que $\ln(f^{eq})$ est un invariant de collision et par conséquent (d'après (2.10)), il existe trois valeurs b_k , pour $k = 0, 1, 2$ (indépendantes de \mathbf{e}) tels que

$$\ln(f^{eq}) = \sum_{k=0}^2 b_k \phi_k.$$

En tant que fonction de répartition d'équilibre, cette fonction f^{eq} décrit l'organisation des particules à l'équilibre autour d'un point $\mathbf{x} \in \Omega$; la quantité de matière, associée à la variable

macroscopique ρ (équation (2.3)), n'est donc pas modifiée par rapport à la fonction de répartition f décrivant le champs de particule étudié. Ainsi, on a, pour tout $(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{Q}$

$$\int_{\mathbb{R}^3} f^{eq}(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) d\mathbf{e} = \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) d\mathbf{e} = \rho(\mathbf{x}, t). \quad (2.14)$$

5 Opérateur de collision BGK

Nous voulons à présent définir une approximation de l'opérateur de collision défini par (2.5). En effet, la nature intégrale de celui-ci, et l'introduction du noyau de collision le rendent inutilisable d'un point de vue numérique. Nous choisissons donc d'utiliser l'opérateur de collision BGK [19], Q_{BGK} , que nous noterons par la suite Q , défini par:

$$Q(f)(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) = -\frac{1}{\tau}(f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) - f^{eq}(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})), \quad (2.15)$$

où τ est un taux de relaxation et f^{eq} est une fonction de répartition d'équilibre respectant la Définition 2.3. Cette approximation consiste à faire l'hypothèse que les collisions ont pour effet de faire converger f vers un état d'équilibre f^{eq} en un temps caractéristique τ (car il est bien connu que les solutions d'une EDO de la forme $z'(t) = \frac{1}{\tau}(\alpha - z(t))$ convergent vers la solution stationnaire $z_s = \alpha$). On montre facilement que Q satisfait les conditions d'invariance.

Remarque 2.1 .

L'autre grande famille de modèles couramment utilisés pour modéliser l'opérateur de collision est la famille des opérateurs de type MRT, proposée initialement par D'Humière D. en 1992 [78]. Ce modèle, dit à taux de relaxation multiple, prend en compte les propriétés conservatrices de l'opérateur de collision, et permet dans le même temps de relaxer les moments non conservés (température, et moments d'ordres plus élevés). Numériquement, ce modèle permet de considérer des taux de relaxation variables au sein de la grille et de remédier à des problèmes de stabilité numérique. Comme nous le voyons par la suite, dans les modèles que nous traitons, nous n'avons pas ce type de problème (rencontré en mécanique des fluides pour un nombre de Reynolds élevé $Re \gg 5000$), et il est également possible de définir un taux de relaxation variable $\tau = \tau(\mathbf{x})$ avec des modèles BGK modifiés.

Remarque 2.2 .

Comme nous le verrons dans la Partie II et la Partie III, il est possible de rencontrer des fonctions de distribution f à valeurs négatives lorsque la grandeur macroscopique ρ est associée à une grandeur homogène à une densité pouvant être négative. Ce sera par exemple le cas dans la Partie III lorsque ρ représente un potentiel électrique.

3 Equation de Boltzmann sur réseau

1 Discrétisation

Nous nous intéressons à présent à la résolution numérique de l'équation de Boltzmann (13.14). Pour cela, nous utilisons l'équation de Boltzmann sur réseau, obtenue à partir de l'équation de Boltzmann à vitesses discrètes. Nous définissons cette dernière à partir du choix de discrétisation en espace, en temps, et selon les vitesses \mathbf{e} . Dans un premier temps, nous approchons le domaine Ω par un maillage Ω_H à N noeuds. A chacun de ces noeuds, nous définissons n fonctions de distributions $f_j(\mathbf{x}, t)$, $j = 0, \dots, n-1$, associées à n vitesses \mathbf{e}_j , $j = 0, \dots, n-1$, avec $\mathbf{e}_0 = 0$, telles que $f_j(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}_j)$. Chaque noeud \mathbf{x} de ce réseau a $n-1$ noeuds $(\mathbf{x}_i)_{i=1, \dots, n-1}$ adjacents tels que:

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{x} + \Delta t \mathbf{e}_i, \quad i = 1, \dots, n-1,$$

avec Δt le pas en temps permettant de subdiviser l'intervalle $(0, T)$. Ce pas de temps représente la durée entre deux collisions particulières, tel qu'en M_T collisions nous ayons $M_T \Delta t = T$. On définit également un pas d'espace Δx , correspondant à la distance minimale séparant deux noeuds adjacents du réseau.

Ainsi, durant un laps de temps Δt séparant deux étapes de collisions, les particules se déplacent d'un noeud \mathbf{x}_i vers le noeud adjacents \mathbf{x}_j selon la vitesse \mathbf{e}_j . Nous définissons la vitesse $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$. Cette vitesse est appelée *vitesse de grille* et intervient dans la définition des \mathbf{e}_j pour $j > 0$. Elle correspond à la vitesse à laquelle une particule doit se déplacer pour rejoindre le noeud adjacent en un temps Δt . Cette vitesse est également liée à la célérité du son sur la grille C_s par la relation $c = \alpha_c C_s$, avec α_c une constante dépendant du choix des vitesses \mathbf{e}_j .

Maintenant que nous avons défini une discrétisation en espace et en temps, nous définissons l'équation de Boltzmann à vitesses discrètes telle que:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_j(\mathbf{x}, t) + \mathbf{e}_j \cdot \nabla f_j(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} (f_j(\mathbf{x}, t) - f_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) + H_j(\mathbf{x}, t), \quad (3.1)$$

où H_j est le second membre discrétisé défini par:

$$H_j(\mathbf{x}, t) = -\frac{F}{m} \nabla_{\mathbf{e}_j} f(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}_j). \quad (3.2)$$

2 Modèles DdQn

On appelle une "méthode *DdQn*" une méthode de Boltzmann sur réseau en dimension $d \geq 1$ définie par n vitesses \mathbf{e}_j et par n poids w_j , $j = 0, \dots, n-1$ (voir Table 3.1), tels que $\sum_{j=0}^n w_j = 1$.

Les choix de discrétisations sont nombreux (cf par exemple [111], [41]), et dépendent de la précision voulue, de la stabilité nécessaire à la résolution du problème, de l'ordre des moments à conserver, de propriétés physiques à satisfaire (isotropie,...), ou encore des conditions aux bords à imposer (cf [106]).

En dimension une, les vitesses sont représentées par les réels \mathbf{e}_j , $j = 0, \dots, n-1$. Les modèles les plus utilisés pour des problèmes mono-dimensionnels sont le modèle *D1Q3* et son extension, le modèle *D1Q5* (Figure 3.1). Les deux vitesses \mathbf{e}_1 et \mathbf{e}_2 sont associées à chacune des deux directions menant aux deux nœuds voisins ($\mathbf{e}_1 = c$ et $\mathbf{e}_2 = -c$). Le modèle *D1Q5* fait intervenir deux vitesses supplémentaires associées aux nœuds situés à une distance de $2c$ ($\mathbf{e}_3 = 2c$ et $\mathbf{e}_4 = -2c$), afin de garantir la conservation de moments d'ordres plus élevés que dans le modèle *D1Q3*, au détriment d'une implémentation plus légère (cf [134]).

En dimension deux, le choix est plus large, mais les deux modèles les plus utilisés sont les modèles *D2Q7* et *D2Q9* (Figure 3.2) définis à partir de vitesses $\mathbf{e}_j \in \mathbb{R}^2$, $j = 0, \dots, n-1$. Dans le premier cas, le maillage associé au modèle *D2Q7* est constitué d'éléments hexagonaux ($\mathbf{e}_j = c \left(\cos\left(\frac{2\pi j}{6}\right), \sin\left(\frac{2\pi j}{6}\right) \right)$ pour $j = 1, \dots, 6$). Dans le second cas, les mailles sont des carrés et chaque nœud est relié aux coins et aux milieux de chaque arête ($\mathbf{e}_j = c(\cos(\frac{\pi}{2}(j-1)), \sin(\frac{\pi}{2}(j-1)))$ pour $j = 1, \dots, 4$ et $\mathbf{e}_j = c\sqrt{2}(\cos(\frac{\pi}{2}(j - \frac{1}{2})), \sin(\frac{\pi}{2}(j - \frac{1}{2})))$ pour $j = 5, \dots, 8$).

Enfin, les modèles en dimension trois sont définis à partir de $\mathbf{e}_j \in \mathbb{R}^3$, $j = 0, \dots, n-1$. Les trois modèles les plus communs sont les modèles *D3Q15*, *D3Q19* ou *D3Q27*. Dans ces modèles, chaque nœud peut être considéré comme le centre d'un cube à la surface duquel on peut placer l'ensemble des nœuds adjacents. On peut séparer les vitesses selon trois catégories (Figure 3.3): les vecteurs monodirectionnels (a) ($\mathbf{e}_j = c(\pm 1, 0, 0), c(\pm 1, 0, 0), c(\pm 1, 0, 0)$, pour $j = 1, \dots, 6$), les vecteurs bidirectionnels (b) ($\mathbf{e}_j = c(\pm 1, \pm 1, 0), c(0, \pm 1, \pm 1), c(\pm 1, 0, \pm 1)$ pour $j = 7, \dots, 18$), et les vecteurs tridimensionnels (c) ($\mathbf{e}_j = c(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$, pour $j = 7, \dots, 14$). La numérotation s'adaptant en fonction des modèles utilisés. Dans le modèle *D3Q15*, le nœud considéré est entouré des 6 nœuds adjacents (a) au centre de chaque face du cube. Les 8 dernières vitesses permettent de rallier les angles du cube (c). Dans le modèle *D3Q19*, la construction des 7 premières vitesses \mathbf{e}_j , $j = 0, \dots, 6$ est identique. Les vitesses supplémentaires rallient cette fois le milieu des arêtes du cube (b). Enfin, le modèle *D3Q27* est muni des trois catégories de vitesses (a), (b) et (c).

Quel que soit le modèle *DdQn* considéré, les approximations $f_j(\mathbf{x}, t)$ des fonctions de distribution particulière $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{e}_j)$ doivent permettre de retrouver les quantités macroscopiques (moments)

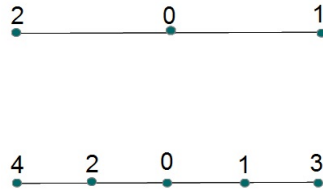


Figure 3.1: Modèle $D1Q3$ (haut) et $D1Q5$ (bas).

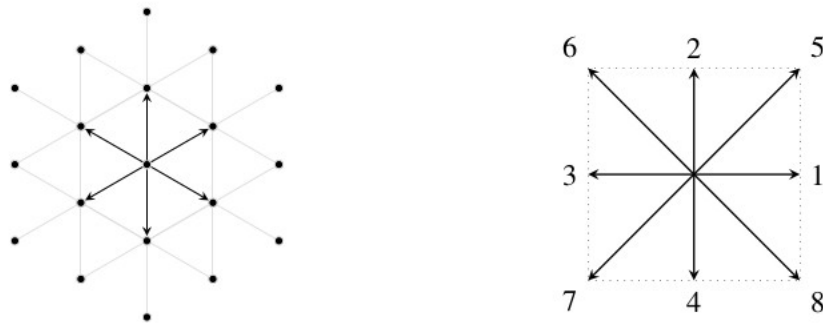


Figure 3.2: Modèle $D2Q7$ (gauche) et $D2Q9$ (droite).

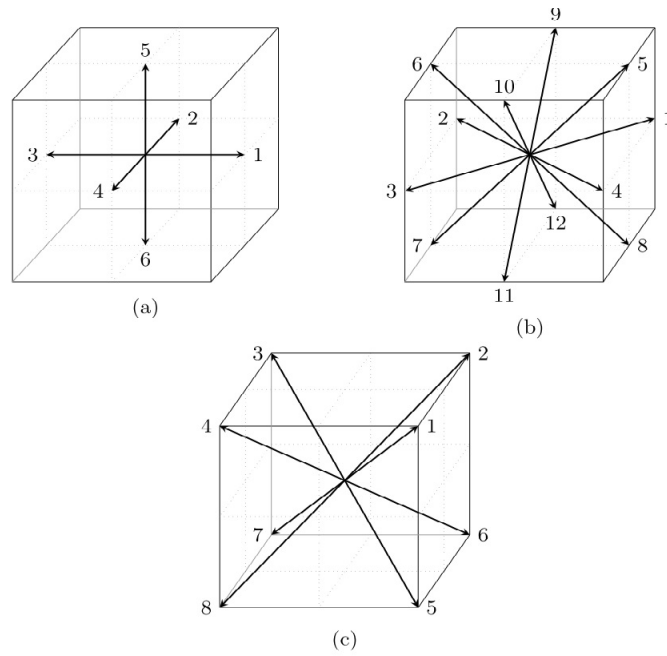


Figure 3.3: Les trois catégories de vitesses constituant les modèles $D3Q15, D3Q19$ et $D3Q27$.

Modèle	Vecteurs des vitesses \mathbf{e}_j	Poids w_j
<i>D1Q3</i>	$\mathbf{e}_j = \begin{cases} 0 & j=0, \\ c & j=1, \\ -c & j=2. \end{cases}$	$\mathbf{w}_j = \begin{cases} 2/3 & j=0, \\ 1/6 & j=1, 2. \end{cases}$
<i>D1Q5</i>	$\mathbf{e}_j = \begin{cases} 0 & j=0, \\ c & j=1, \\ -c & j=2 \\ 2c & j=3, \\ -2c & j=4. \end{cases}$	$\mathbf{w}_j = \begin{cases} 1/2 & j=0, \\ 1/6 & j=1, 2, \\ 1/12 & j=3, 4. \end{cases}$
<i>D2Q7</i>	$\mathbf{e}_j = \begin{cases} (0, 0) & j=0, \\ c \left(\cos\left(\frac{2\pi j}{6}\right), \sin\left(\frac{2\pi j}{6}\right) \right) & j=1, \dots, 6. \end{cases}$	$\mathbf{w}_j = \begin{cases} 1/2 & j=0, \\ 1/12 & j=1, \dots, 6. \end{cases}$
<i>D2Q9</i>	$\mathbf{e}_j = \begin{cases} (0, 0) & j=0, \\ c \left(\cos\left(\frac{\pi}{2}(j-1)\right), \sin\left(\frac{\pi}{2}(j-1)\right) \right) & j=1, \dots, 4, \\ c\sqrt{2} \left(\cos\left(\frac{\pi}{2}\left(j-\frac{1}{2}\right)\right), \sin\left(\frac{\pi}{2}\left(j-\frac{1}{2}\right)\right) \right) & j=5, \dots, 8. \end{cases}$	$\mathbf{w}_j = \begin{cases} 4/9 & j=0, \\ 1/9 & j=1, \dots, 4, \\ 1/36 & j=5, \dots, 8. \end{cases}$
<i>D3Q15</i>	$\mathbf{e}_j = \begin{cases} (0, 0, 0) & j=0, \\ c(\pm 1, 0, 0), c(0, \pm 1, 0), c(0, 0, \pm 1) & j=1, \dots, 6, \\ c(\pm 1, \pm 1, \pm 1) & j=7, \dots, 14, \end{cases}$	$\mathbf{w}_j = \begin{cases} 2/9 & j=0, \\ 1/9 & j=1, \dots, 6, \\ 1/72 & j=7, \dots, 14. \end{cases}$
<i>D3Q19</i>	$\mathbf{e}_j = \begin{cases} (0, 0, 0) & j=0, \\ c(\pm 1, 0, 0), c(0, \pm 1, 0), c(0, 0, \pm 1) & j=1, \dots, 6, \\ c(\pm 1, \pm 1, 0), c(0, \pm 1, \pm 1), c(\pm 1, 0, \pm 1) & j=7, \dots, 18, \end{cases}$	$\mathbf{w}_j = \begin{cases} 1/3 & j=0, \\ 1/18 & j=1, \dots, 6, \\ 1/36 & j=7, \dots, 18. \end{cases}$
<i>D3Q27</i>	$\mathbf{e}_j = \begin{cases} (0, 0, 0) & j=0, \\ c(\pm 1, 0, 0), c(0, \pm 1, 0), c(0, 0, \pm 1) & j=1, \dots, 6, \\ c(\pm 1, \pm 1, 0), c(0, \pm 1, \pm 1), c(\pm 1, 0, \pm 1) & j=7, \dots, 18, \\ c(\pm 1, \pm 1, \pm 1) & j=19, \dots, 26, \end{cases}$	$\mathbf{w}_j = \begin{cases} 8/27 & j=0, \\ 2/27 & j=1, \dots, 6, \\ 1/54 & j=7, \dots, 18, \\ 1/216 & j=19, \dots, 26. \end{cases}$

Table 3.1: Modèles *DdQn* classiques.

voulues. Les moments d'ordre 0 à 2 définis par l'équation (2.3) sont ainsi approchés par:

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{x}, t) &= \sum_{j=0}^{n-1} f_j(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=0}^{n-1} f_j^{eq}(\mathbf{x}, t), \\ \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) &= \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j f_j(\mathbf{x}, t), \\ E(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{n-1} |\mathbf{e}_j|^2 f_j(\mathbf{x}, t),\end{aligned}\tag{3.3}$$

où $f_j^{eq}(\mathbf{x}, t)$ sont les fonctions de répartition d'équilibre discrètes, permettant d'approcher la fonction de répartition f^{eq} satisfaisant la Définition 2.3.

L'opérateur de collision BGK défini par l'équation (2.15) est quant à lui exprimé en fonction des répartitions f_j tel que:

$$Q(f_j)(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau}(f_j(\mathbf{x}, t) - f_j^{eq}(\mathbf{x}, t)),\tag{3.4}$$

où τ est le taux de relaxation.

Remarque 3.1 .

Dans le cadre de ce travail, nous n'abordons que des modèles DdQn à pas Δx constant. Il existe cependant de nombreux travaux à propos de modèles multi-grille, ou de grille non-cartésienne (voir [109], [100], [128]) avec des pas d'espace Δx variables. Il est également possible de définir des pas de temps variables pour étudier des phénomènes au sein desquels les changements ou l'arrivée de perturbations ont lieu sur des intervalles très courts. En pratique, ces changements impliquent une construction minutieuse du taux de relaxation τ ainsi que des vitesses \mathbf{e}_j . Dans le cas d'un maillage à plusieurs niveaux de grilles, des conditions de raccord doivent aussi être mises en place aux interfaces.

3 Modèle D2Q9

Dans la suite nous ne traitons que des problèmes en dimension deux ($\Omega \subset \mathbb{R}^2$). Nous choisissons pour cela de n'étudier et de ne proposer que des variantes du modèle D2Q9. Ce modèle est en effet plus robuste que les autres modèles également utilisés en dimension deux, à savoir les modèles D2Q7, D2Q5 ou D2Q4. Ces modèles ne garantissent pas toujours une bonne stabilité à cause d'un nombre de vitesses trop restrictif. De plus, avec ces modèles, il est très délicat voire impossible de traiter certains types d'équations (voir [106], [93]). D'un point de vue purement algorithmique, par rapport aux modèles D2Qn avec $n < 9$, le choix d'un modèle D2Q9 implique une plus grande quantité de données à stocker et plus d'opérations par itération, mais ce surcote est largement compensé par les avantages mentionnés ci-dessus (en particulier la stabilité). Enfin, la définition de mailles carrées est plus simple à mettre en oeuvre que des mailles triangulaires ou des hexagonales. Notre but principal étant de valider des méthodes et non d'optimiser au maximum la précision, cette simplicité est importante.

Les vitesses \mathbf{e}_j choisies sont définies par:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_0 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_1 = c \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_3 = -\mathbf{e}_1, \\ \mathbf{e}_2 &= c \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_4 = -\mathbf{e}_2, \quad \mathbf{e}_5 = c \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_7 = -\mathbf{e}_5, \\ \mathbf{e}_6 &= c \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_8 = -\mathbf{e}_6. \end{aligned} \tag{3.5}$$

On en déduit:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1\mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_3\mathbf{e}_3 &= c^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_2\mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_4\mathbf{e}_4 = c^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{e}_5\mathbf{e}_5 = \mathbf{e}_7\mathbf{e}_7 &= 2c^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_6\mathbf{e}_6 = \mathbf{e}_8\mathbf{e}_8 = 2c^2 \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{3.6}$$

De plus, cette construction permet d'obtenir les égalités:

$$\sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j = 0, \quad \sum_{j=0}^8 w_j \mathbf{e}_j = 0 \quad \text{et} \quad \left(\sum_{j=0}^8 w_j \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j \right)_{k,l} = C_s^2 \delta_{k,l}, \tag{3.7}$$

où $c^2 = 3C_s^2$ et $\left(\sum_{j=0}^8 w_j \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j \right)_{k,l}$ est la composante située à la ligne k et à la colonne l avec $\delta_{k,l}$ est le symbole de Kronecker.

Remarque 3.2 .

Dans le cas de maillages réguliers (des mailles carrées identiques par exemple), les vitesses \mathbf{e}_j sont définies indépendamment de \mathbf{x} et par conséquent, pour toute fonction f suffisamment régulière, nous avons: $\mathbf{e}_j \cdot \nabla f = \text{div}(\mathbf{e}_j f)$.

Enfin, nous utiliserons les poids: $w_0 = \frac{4}{9}$; $w_j = \frac{1}{9}$ pour $j = 1, \dots, 4$ et $w_j = \frac{1}{36}$ pour $j = 5, \dots, 8$, vérifiant $\sum_{j=0}^8 w_j = 1$.

4 Méthode des caractéristiques

Nous allons à présent utiliser la méthode des caractéristiques pour construire l'équation de Boltzmann sur réseau. L'équation de Boltzmann sur réseau obtenue permet d'exprimer la distribution f_j à l'instant $t + \Delta t$ en fonction de l'état du système à l'instant t .

Nous définissons pour commencer la caractéristique: $(X(\mathbf{x}, t; s), s) \in \Omega \times [t, t + \Delta t]$ où $X(\mathbf{x}, t; \cdot) : s \rightarrow X(\mathbf{x}, t; s)$ est la solution du système (avec $(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{Q}$ fixé):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial s} X(\mathbf{x}, t; s) &= \mathbf{e}_j, \\ X(\mathbf{x}, t; t) &= \mathbf{x}, \end{aligned} \tag{3.8}$$

où \mathbf{e}_j sont des vecteurs constants pour $j = 0, \dots, n-1$.

D'après (3.1) on obtient:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial s} (f_j(X(\mathbf{x}, t; s), s)) &= \frac{\partial}{\partial s} f_j(X(\mathbf{x}, t; s), s) + \mathbf{e}_j \cdot \nabla f_j(X(\mathbf{x}, t; s), s) \\ &= -\frac{1}{\tau} (f_j(X(\mathbf{x}, t; s), s) - f_j^{eq}(X(\mathbf{x}, t; s), s)) + H_j(X(\mathbf{x}, t; s), s). \end{aligned} \quad (3.9)$$

En intégrant le terme de droite de l'équation (3.9) selon $s \in [t; t + \Delta t]$, on obtient:

$$\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial s} (f_j(X(\mathbf{x}, t; s), s)) ds = f_j(X(\mathbf{x}, t; t + \Delta t), t + \Delta t) - f_j(X(\mathbf{x}, t; t), t). \quad (3.10)$$

On intègre l'équation (3.9) et on utilise (3.10), on en déduit:

$$\begin{aligned} f_j(X(\mathbf{x}, t; t + \Delta t), t + \Delta t) &= f_j(X(\mathbf{x}, t; t), t) \\ &+ \int_t^{t+\Delta t} \left(-\frac{1}{\tau} (f_j(X(\mathbf{x}, t; s), s) - f_j^{eq}(X(\mathbf{x}, t; s), s)) + H_j(X(\mathbf{x}, t; s), s) \right) ds. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Comme les vecteurs \mathbf{e}_j sont constants, on peut exprimer facilement la caractéristique de manière explicite. En effet, $X(\mathbf{x}, t; s)$ étant solution du système (3.8), par intégration selon s , on en déduit: $X(\mathbf{x}, t; s) = \mathbf{x} + \mathbf{e}_j(s - t)$. Ainsi l'équation (3.11) devient:

$$\begin{aligned} f_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) &= f_j(\mathbf{x}, t) + \int_t^{t+\Delta t} H_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j(s - t), s) ds \\ &- \frac{1}{\tau} \int_t^{t+\Delta t} (f_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j(s - t), s) - f_j^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j(s - t), s)) ds. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Il nous faut maintenant calculer une approximation des termes intégraux. Pour cela, nous utilisons la méthode des trapèzes entre t et $t + \Delta t$ pour les approcher avec une précision d'ordre $\mathcal{O}(\Delta t^3)$:

$$\begin{aligned} f_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) &= f_j(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t}{2} (H_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) + H_j(\mathbf{x}, t)) \\ &- \frac{\Delta t}{2\tau} (f_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) - f_j^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) + f_j(\mathbf{x}, t) - f_j^{eq}(\mathbf{x}, t)). \end{aligned} \quad (3.13)$$

Comme nous ne connaissons pas $H_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t)$, nous le substituons par son développement de Taylor suivant (avec une erreur d'ordre $\mathcal{O}(\Delta t^2)$):

$$\begin{aligned} H_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) &= H_j(\mathbf{x}, t) \\ &+ \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right) H_j(\mathbf{x}, t) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Ainsi:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t}{2} (H_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) + H_j(\mathbf{x}, t)) &= \Delta t H_j(\mathbf{x}, t) \\ &+ \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right) H_j(\mathbf{x}, t) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \end{aligned} \quad (3.15)$$

Il nous reste à présent à éliminer le terme $f_j^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t)$ pour pouvoir enfin exprimer $f_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t)$, à partir de fonctions connues. Pour cela, nous faisons le changement de variable suivant:

$$g_j(\mathbf{x}, t) = f_j(\mathbf{x}, t) + a (f_j(\mathbf{x}, t) - f_j^{eq}(\mathbf{x}, t)), \quad g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = f_j^{eq}(\mathbf{x}, t) \quad (3.16)$$

avec $a \in \mathbb{R}$ constante que nous définissons par la suite. On en déduit:

$$f_j(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{1+a} (g_j(\mathbf{x}, t) + a g_j^{eq}(\mathbf{x}, t)). \quad (3.17)$$

Nous pouvons à présent repartir de l'équation (3.13) en passant à gauche tous les termes pris en $(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t)$, et en remplaçant f_j par son expression (3.17) pour obtenir:

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{\Delta t}{2\tau} \right) &\left(\frac{1}{1+a} (g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) + a g_j^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t)) \right) \\ &- \frac{\Delta t}{2\tau} g_j^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau} \right) \left(\frac{1}{1+a} (g_j(\mathbf{x}, t) + a g_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) \right) \\ &+ \frac{\Delta t}{2\tau} g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) + \Delta t H_j(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right) H_j(\mathbf{x}, t) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Cette équation peut se simplifier en regroupant les termes $g_j(\mathbf{x}, t)$, $g_j^{eq}(\mathbf{x}, t)$, $g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t)$ et $g_j^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t)$ entre eux:

$$\begin{aligned} \frac{2\tau + \Delta t}{2\tau(1+a)} g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) &+ \frac{2\tau a - \Delta t}{2\tau(1+a)} g_j^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) \\ &= \frac{2\tau - \Delta t}{2\tau(1+a)} g_j(\mathbf{x}, t) + \frac{2\tau a + \Delta t}{2\tau(1+a)} g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) + \Delta t H_j(\mathbf{x}, t) \\ &+ \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right) H_j(\mathbf{x}, t) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Nous voulons maintenant exprimer $g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t)$ en fonction des fonctions connues, à savoir $g_j(\mathbf{x}, t)$ et $H_j(\mathbf{x}, t)$, $j = 0, \dots, n-1$. Nous choisissons donc $a = \frac{\Delta t}{2}$ pour satisfaire:

$$\frac{2\tau a - \Delta t}{2\tau(1+a)} = 0.$$

Ainsi, nous annulons les facteurs des fonctions $g_j^{eq}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t)$ dans l'équation (3.19). On

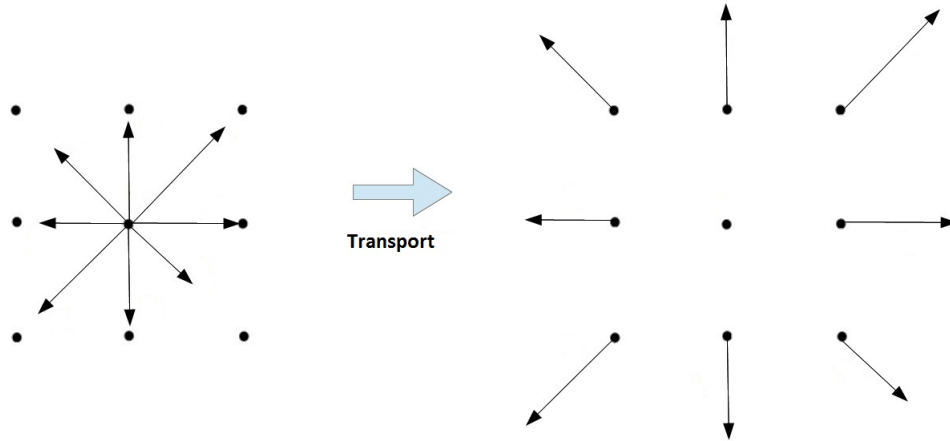


Figure 3.4: Fonctions de répartition d'un modèle $D2Q9$ avant la phase de transport (gauche), et après la phase de transport selon chaque direction (droite).

peut donc réécrire l'équation (3.19) telle que:

$$\begin{aligned}
 g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) &= g_j(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau + \frac{\Delta t}{2}} (g_j(\mathbf{x}, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \Delta t H_j(\mathbf{x}, t) \\
 &+ \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right) H_j(\mathbf{x}, t) + \mathcal{O}(\Delta t^3).
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

Posons $\tau_g = \frac{\tau}{\Delta t} + \frac{1}{2}$. On en déduit:

$$\begin{aligned}
 g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) &= g_j(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_g} (g_j(\mathbf{x}, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \Delta t H_j(\mathbf{x}, t) \\
 &+ \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right) H_j(\mathbf{x}, t) + \mathcal{O}(\Delta t^3).
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

L'équation (3.21) est dite équation de Boltzmann sur réseau. Ses solutions sont à une translation près des solutions approchées de l'équation de Boltzmann à vitesses discrètes (3.1).

La méthode de Boltzmann sur réseau consiste à résoudre l'équation (3.21) en deux étapes (Figure 3.4 pour un modèle $D2Q9$). La première étape de collision tenant compte des forces extérieures traduites par la fonction H_j , est représenté par g_j^{col} , $j = 0, \dots, n - 1$, avec:

$$\begin{aligned}
 g_j^{col}(\mathbf{x}, t) &= g_j(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_g} (g_j(\mathbf{x}, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \Delta t H_j(\mathbf{x}, t) \\
 &+ \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right) H_j(\mathbf{x}, t).
 \end{aligned} \tag{3.22}$$

Cette étape est locale en espace et chaque fonction de répartition g_j , $j = 0, \dots, n - 1$ est indépendante des autres fonctions de répartition g_i , avec $i \neq j$.

La seconde étape est la phase de transport, au cours de laquelle les particules associées à la vitesse \mathbf{e}_j se déplacent d'un noeud \mathbf{x} au noeud voisin $\mathbf{x} + \Delta t \mathbf{e}_j$. On approche ainsi les termes $g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t)$ avec une précision de l'ordre de $\mathcal{O}(\Delta t^3)$ tel que:

$$g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) \underset{\text{retribution}}{=} g_j^{col}(\mathbf{x}, t). \quad (3.23)$$

5 Algorithme

Dans cette section, nous détaillons les différents aspects algorithmiques généraux relatif à la méthode de Boltzmann sur réseau. Nous commençons par définir les différentes fonctions que nous utilisons avant d'expliquer les différentes étapes de l'algorithme général.

Tout d'abord, nous établissons la discrétisation de l'ensemble $\Omega \times (0, T)$. Pour cela, nous construisons un maillage Ω_H de bord $\partial\Omega_H$ recouvrant Ω en fonction de la quadrature $DdQn$ choisie. Nous considérons des maillages réguliers définis par un pas d'espace $\Delta \mathbf{x}$ constant. Nous notons N_x le nombre de noeuds, et \mathbf{x}_i , $i = 0, \dots, N_x - 1$ ses noeuds. La subdivision en temps est définie par $t_k = k\Delta t$, avec $k = 0, \dots, M_T$.

Compte tenu de cette discrétisation, nous définissons les différentes variables nécessaires à l'implémentation de la méthode de Boltzmann sur réseau (Tableau 3.2). Les vitesses \mathbf{e}_j et le vecteur des poids w_j sont définis par la quadrature $DdQn$ choisie. Les fonctions g_j^{eq} , H_j et le taux de relaxation τ sont définis en fonction du problème traité (voir Chapitre 4). On initialise ensuite les fonctions de répartition g_j avant de faire évoluer le temps jusqu'à l'instant final T . Toutes ces variables peuvent être actualisées à chaque itération, tout en conservant leurs données dans un fichier annexe accessible à l'écriture et à la lecture.

La boucle principale selon la variable de temps t_k consiste à résoudre l'équation portant sur la collision, à travers des variables g_j^{col} (équation (3.22)). Cette phase étant locale en espace, il est également possible d'actualiser les fonctions de répartition g_j pour tout noeud \mathbf{x}_i . La seconde étape est la phase de transport, dite de *streaming*, correspondant à l'équation (3.23). Numériquement, cette phase peut se résumer comme une translation de chaque valeur g_j^{col} vers le noeud adjacent selon la direction de \mathbf{e}_j . Nous traitons par la suite les conditions aux bords $\partial\Omega$ en fonction des conditions que l'on souhaite imposer (voir Chapitre 5) et qui servent de directions entrantes à l'instant $t_k + \Delta t$. Une fois ces trois étapes de calcul terminées, nous recomposons les quantités macroscopiques (par les relations (4.1) et (4.2) développées dans le Chapitre 4). Ces quantités macroscopiques servent à définir les fonctions d'équilibre et les termes sources à l'instant $t_k + \Delta t$.

Nous pouvons résumer les différentes étapes de l'algorithme de la manière suivante:

- Initialisation, $t = 0$:
 - Définition des pas d'espace Δx , de temps Δt , et de la vitesse de grille c .
 - Construction du maillage, des vecteurs \mathbf{e}_j , et des poids w_j .
 - Initialisation des fonctions g , g^{eq} , H et du taux de relaxation τ .
- Boucle en temps pour $k = 1, \dots, M_T$, pour tout noeud \mathbf{x}_i , $i = 0, \dots, N_x - 1$:

Nom	Dimension	Rôle
Δx	1	Pas d'espace.
Δt	1	Pas de temps.
c	1	Vitesse de grille.
τ	1 ou N_x	taux de relaxation (1: si taux constant, si N_x taux variable.)
\mathbf{e}	$d \times n$	Vecteurs des vitesses.
w	n	Vecteur des poids associés à chaque direction.
g	$N_x \times n$	Fonctions de répartition pour N_x mailles et n vitesses.
g^{eq}	$N_x \times n$	Fonctions de répartition d'équilibre pour N_x mailles et n vitesses.
H	$N_x \times n$	Termes sources des N_x mailles selon les n directions.

Table 3.2: Fonctions et dimensions relatifs à une méthode *DdQn*.

1. Phase de collision, avec une approximation de type différences finies des dérivées des terme source H_j , calcul du terme g_j^{col} défini par l'équation (3.22), pour $j = 0, \dots, n-1$.
2. Phase de transport, translation des termes g_j^{col} selon les directions de \mathbf{e}_j , d'après l'équation (3.23), pour $j = 0, \dots, n-1$.
3. Application de la méthode choisie pour le traitement des conditions aux bords. Pour $\mathbf{x}_l \in \partial\Omega_H$, approcher les fonctions $g_j(\mathbf{x}_l, t + \Delta t)$ (voir Chapitre 5).
4. Calcul des fonctions macroscopiques (par les relations (4.1) et (4.2) développées dans le Chapitre 4).
5. Calcul des fonctions $g_j^{eq}(\mathbf{x}_i, t + \Delta t)$ et $H_j(\mathbf{x}_i, t + \Delta t)$, pour $j = 0, \dots, n-1$.
6. Fin de l'itération: $t := t + \Delta t$.

Il s'agit ici de l'algorithme utilisé pour le cas général. Dans le cas d'équations elliptiques (voir le Chapitre 7), de systèmes d'équations couplées (voir Chapitre 8), ou de fonctions à variables complexes (voir chapitre 9), l'algorithme est adapté en fonction du problème traité. Les équations elliptiques impliquent l'ajout de sous-routine dont on sort une fois un critère de convergence atteint, les équations couplées nécessitent la définition de fonctions permettant de tenir compte du couplage et des problèmes à variables complexes doivent être traitées comme des équations couplées en séparant la partie réelle de la partie imaginaire.

4 Développement de Chapman-Enskog

Dans ce chapitre, nous expliquons comment la résolution de l'équation de Boltzmann sur réseau (3.21) permet d'approcher les solutions d'une équation aux dérivées partielles portant sur des quantités macroscopiques. Pour cela, nous utilisons le développement de Chapman-Enskog. Ce développement est un ansatz introduit entre 1910 et 1920 par Sydney Chapman et David Enskog visant à exprimer une répartition particulière en la scindant selon plusieurs échelles de perturbations autour de son état d'équilibre. Dans le cas de la méthode de Boltzmann sur réseau $DdQn$, nous utilisons ce développement pour définir toutes les fonctions de répartition d'équilibre discrètes g_j^{eq} , $j = 0, \dots, n-1$, les termes sources discrétisés H_j , $j = 0, \dots, n$, et le taux de relaxation τ . En introduisant ce développement dans l'équation de Boltzmann sur réseau (3.21) et en utilisant le développement de Taylor pour les fonctions de répartition g_j , $j = 0, \dots, n-1$, nous montrons par la suite comment faire coïncider la résolution de l'équation de Boltzmann sur réseau (3.21) avec la résolution de l'équation différentielle portant sur la quantité macroscopique ρ . Cette dernière est liée aux fonctions de répartition g_j et g_j^{eq} , $j = 0, \dots, n-1$, d'après les équations (3.16) et (3.3) par la relation:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=0}^{n-1} g_j(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=0}^{n-1} g_j^{eq}(\mathbf{x}, t). \quad (4.1)$$

Le terme de type source du système H , est lié aux fonctions H_j , $j = 0, \dots, n-1$, par la relation:

$$H(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=0}^{n-1} H_j(\mathbf{x}, t). \quad (4.2)$$

Le développement de Chapman-Enskog permet de faire le lien entre l'équation de Boltzmann sur réseau (3.21) et une équation différentielle portant sur des quantités macroscopiques. Cependant, pour pouvoir effectuer ce développement, il est essentiel d'exprimer les équations selon les mêmes référentiels (spatiaux, temporels, etc). Pour cela, la solution la plus simple est d'exprimer toutes les équations sous forme adimensionnelle. Nous adimensionnons dans un premier temps l'équation de Boltzmann sur réseau. Puis, nous introduisons l'ansatz dans sa forme générale et nous détaillons les différentes étapes du développement de Chapman-Enskog. Par la suite, dans la Partie II, nous adimensionnerons les équations macroscopiques que nous traiterons en adéquation avec l'équation de Boltzmann sur réseau adimensionnelle.

1 Adimensionnement

Pour adimensionner l'équation (3.21), on définit L , la longueur caractéristique du domaine Ω , et T , la longueur de l'intervalle de temps étudié. Nous introduisons également trois nouvelles variables de discrétisation sans dimension $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{t}$, et les pas $\Delta\tilde{x}, \Delta\tilde{y}, \Delta\tilde{t}$:

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= \frac{x}{L}, & \tilde{y} &= \frac{y}{L}, & \tilde{t} &= \frac{t}{T}, \\ \Delta\tilde{x} &= \frac{\Delta x}{L}, & \Delta\tilde{y} &= \frac{\Delta y}{L}, & \Delta\tilde{t} &= \frac{\Delta t}{T}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

On en déduit:

$$\frac{\partial}{\partial\tilde{x}} = L \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial\tilde{y}} = L \frac{\partial}{\partial y}, \quad \frac{\partial}{\partial\tilde{t}} = T \frac{\partial}{\partial t}. \quad (4.4)$$

Le rapport de longueur et de temps caractéristiques nous donne une vitesse caractéristique: $U = \frac{L}{T}$. Cette constante nous permet d'établir les relations suivantes pour la vitesse de grille, la célérité du son et les vecteurs des vitesses selon chaque direction j :

$$\tilde{c} = \frac{c}{U}; \quad \tilde{C}_s = \frac{C_s}{U}; \quad \tilde{\mathbf{e}}_j = \frac{\mathbf{e}_j}{U}. \quad (4.5)$$

On réécrit donc l'équation de Boltzmann sur réseau (3.21), pour $j = 0, \dots, n-1$ telle que:

$$\begin{aligned} g_j(L(\tilde{\mathbf{x}} + \tilde{\mathbf{e}}_j \Delta\tilde{t}), T(\tilde{t} + \Delta\tilde{t})) &= g_j(L\tilde{\mathbf{x}}, T\tilde{t}) - \frac{1}{\tau_g} \left(g_j(L\tilde{\mathbf{x}}, T\tilde{t}) - g_j^{eq}(L\tilde{\mathbf{x}}, T\tilde{t}) \right) \\ &+ T\Delta\tilde{t}H_j(L\tilde{\mathbf{x}}, T\tilde{t}) + \frac{(T\Delta\tilde{t})^2}{2T} \left(\frac{\partial}{\partial\tilde{t}} + \tilde{\mathbf{e}}_j \cdot \tilde{\nabla} \right) H_j(L\tilde{\mathbf{x}}, T\tilde{t}) + \mathcal{O}(\Delta\tilde{t}^3). \end{aligned} \quad (4.6)$$

On adimensionne à présent les fonctions de répartition g_j et l'opérateur H_j pour obtenir l'équation de Boltzmann sur réseau sans dimension. On introduit donc une densité caractéristique ρ_0 telle que $\tilde{g}_j(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) = \frac{g_j(\mathbf{x}, t)}{\rho_0}$, et $\tilde{H}_j(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) = \frac{TH_j(\mathbf{x}, t)}{\rho_0}$. L'équation (4.6) devient:

$$\begin{aligned} \rho_0 \tilde{g}_j(\tilde{\mathbf{x}} + \tilde{\mathbf{e}}_j \Delta\tilde{t}, \tilde{t} + \Delta\tilde{t}) &= \rho_0 \tilde{g}_j(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) - \frac{\rho_0}{\tau_g} \left(\tilde{g}_j(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) - \tilde{g}_j^{eq}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \right) + \rho_0 \Delta\tilde{t} \tilde{H}_j(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \\ &+ \rho_0 \frac{\Delta\tilde{t}^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial\tilde{t}} + \tilde{\mathbf{e}}_j \cdot \tilde{\nabla} \right) \tilde{H}_j(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) + \mathcal{O}(\Delta\tilde{t}^3). \end{aligned} \quad (4.7)$$

En divisant par ρ_0 , et en considérant cette équation en $(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}})$, on retrouve finalement une équation équivalente à l'équation de Boltzmann sur réseau (3.21):

$$\begin{aligned} \tilde{g}_j(\tilde{\mathbf{x}} + \tilde{\mathbf{e}}_j \Delta\tilde{t}, \tilde{t} + \Delta\tilde{t}) &= \tilde{g}_j(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) - \frac{1}{\tau_g} \left(\tilde{g}_j(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) - \tilde{g}_j^{eq}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \right) + \Delta\tilde{t} \tilde{H}_j(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \\ &+ \frac{\Delta\tilde{t}^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial\tilde{t}} + \tilde{\mathbf{e}}_j \cdot \tilde{\nabla} \right) \tilde{H}_j(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) + \mathcal{O}(\Delta\tilde{t}^3). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Par la suite, on omet les "tilde" et nous désignons l'équation sans dimension (4.8) quand nous

parlons d'équation de Boltzmann sur réseau.

2 Principe

Nous allons à présent détailler les différentes étapes du développement de Chapman-Enskog. Ce développement lie l'équation de Boltzmann sur réseau (4.8) et l'équation différentielle portant sur la quantité macroscopique $\rho(\mathbf{x}, t)$. Les différentes échelles de perturbations introduites par le développement de Chapman-Enskog sont caractérisées par le nombre sans dimension de Knudsen ε . Ce nombre est défini par $\varepsilon = l/L$, le rapport entre la distance l de libre parcours d'une particule et la grandeur caractéristique L . Dans notre cas, nous considérons que $\varepsilon \approx \Delta t$. Dans le cadre de la méthode de Boltzmann, les collisions entre deux particules se font en chaque point de notre grille et à chaque pas de temps. On a donc une distance de libre parcours de l'ordre de $1/L_\Omega \approx \Delta \mathbf{x}$, avec L_Ω la longueur caractéristique du domaine Ω . On choisit généralement de considérer une distance de libre parcours l de l'ordre de $\Delta \mathbf{x}$, et des grandeurs L et L_Ω du même ordre. Ces choix mènent à une relation de type $\Delta \mathbf{x}^2 \approx \Delta t$.

On construit à partir de ce nombre l'ansatz suivant (d'ordre $N \geq 2$):

$$g_j = g_j^{(0)} + \sum_{m=1}^N \varepsilon^m g_j^{(m)} + \mathcal{O}(\varepsilon^{N+1}), \quad (4.9)$$

telles que les fonctions d'ordre 0 soient associées à un état d'équilibre. Nous avons donc les égalités $g_j^{(0)} = g_j^{eq}$, $j = 0, \dots, n-1$.

On effectue également un développement portant sur les termes de type sources H_j du système:

$$H_j = H_j^{(0)} + \sum_{m=1}^N \varepsilon^m H_j^{(m)} + \mathcal{O}(\varepsilon^{N+1}). \quad (4.10)$$

Ces termes étant des perturbations appliquées au système, nous avons nécessairement les égalités $H_j^{(0)} = 0$, $j = 0, \dots, n-1$. On définit enfin ce développement pour les opérateurs différentiels, tels que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &= \sum_{m=1}^N \varepsilon^m \frac{\partial}{\partial t_m}, \\ \nabla &= \sum_{m=1}^N \varepsilon^m \nabla_m, \end{aligned} \quad (4.11)$$

où la variable t_m désigne la m ième échelle de temps, $\nabla_m = \nabla_{\mathbf{x}_m}$ est le gradient selon l'échelle d'espace \mathbf{x}_m .

Comme les différentes échelles de ε sont linéairement indépendantes, on a pour $m > 0$:

$$\sum_j g_j^{(m)} = 0. \quad (4.12)$$

Cette propriété découle directement du fait que pour tout développement d'ordre N , le développement de Chapman-Enskog conserve les propriétés de sommation (4.1) de la fonction de répartition

d'équilibre g_j^{eq} :

$$\sum_{j=0}^{n-1} g_j(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=0}^{n-1} g_j^{(eq)}(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=0}^{n-1} g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t). \quad (4.13)$$

Pour parvenir à la résolution de l'équation différentielle portant sur la quantité macroscopique ρ , nous commençons par exprimer la différence entre le développement de Taylor d'ordre M de la fonction de répartition $g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t)$ et l'équation de Boltzmann (4.8). Nous définissons donc le développement de Taylor à l'ordre 2 par:

$$g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) = g_j(\mathbf{x}, t) + \sum_{k=1}^2 \frac{\Delta t^k}{k!} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right)^k g_j(\mathbf{x}, t) + \mathcal{O}(\Delta t^3), \quad (4.14)$$

avec:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right)^k = \sum_{l=0}^k \frac{k!}{l!(k-l)!} \left(\frac{\partial^{k-l}}{\partial t^{k-l}} (\mathbf{e}_j \cdot \nabla)^l \right), \text{ et } (\mathbf{e}_j \cdot \nabla)^l = (\mathbf{e}_j \cdot \nabla) (\mathbf{e}_j \cdot \nabla)^{l-1}. \quad (4.15)$$

On introduit le développement de Chapman-Enskog d'ordre N défini par les équations (4.9)-(4.11) au sein de (4.14) pour obtenir:

$$\begin{aligned} g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) &= \sum_{m=0}^N \varepsilon^m g_j^{(m)}(\mathbf{x}, t) + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\ &+ \left(\sum_{k=1}^2 \frac{\Delta t^k}{k!} \left(\sum_{m=1}^N \varepsilon^m \frac{\partial}{\partial t_m} + \sum_{m=1}^N \varepsilon^m \mathbf{e}_j \cdot \nabla_m \right)^k \right) \left(\sum_{m=0}^N \varepsilon^m g_j^{(m)}(\mathbf{x}, t) \right) \\ &= \sum_{m=0}^N \varepsilon^m g_j^{(m)}(\mathbf{x}, t) \\ &+ \sum_{k=1}^2 \sum_{m=1}^N \sum_{p=1}^m \sum_{q=0}^{m-p} \varepsilon^p D_j^{p,k} \varepsilon^q g_j^{(q)}(\mathbf{x}, t) + \mathcal{O}(\Delta t^3) + \mathcal{O}(\varepsilon^{N+1}), \end{aligned} \quad (4.16)$$

avec $p \geq 1$, $q \geq 0$, et où l'opérateur différentiel $D_j^{m,k}$ désigne l'ensemble des opérateurs différentiels facteurs de ε^m dans le développement de Chapman-Enskog d'ordre N , tel que:

$$\sum_{m=1}^N \varepsilon^m D_j^{m,k} = \frac{\Delta t^k}{k!} \left(\sum_{m=1}^N \varepsilon^m \frac{\partial}{\partial t_m} + \sum_{m=1}^N \varepsilon^m \mathbf{e}_j \cdot \nabla_m \right)^k. \quad (4.17)$$

On aura (par exemple):

$$\begin{aligned} D_j^{m,1} &= \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_m} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_m \right), \forall m \geq 1 \\ D_j^{2,2} &= \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} + 2 \frac{\partial}{\partial t_1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 + (\mathbf{e}_j \cdot \nabla_1)^2 \right), \\ D_j^{3,2} &= \frac{2\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) \left(\frac{\partial}{\partial t_2} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_2 \right), \\ D_j^{3,3} &= \frac{\Delta t^3}{6} \left(\frac{\partial^3}{\partial t_1^3} + 3 \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 \left(\frac{\partial}{\partial t_2} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_2 \right) + (\mathbf{e}_j \cdot \nabla_1)^3 \right), \end{aligned} \quad (4.18)$$

Remarque 4.1 .

Dans l'équation (4.17) la plus petite puissance m de ε^m est ε^k . La somme est donc définie à partir du terme $m = k$. Nous pouvons donc restreindre la somme de l'équation (4.17) telle que:

$$\sum_{m=k}^N \varepsilon^m D_j^{m,k} = \frac{\Delta t^k}{k!} \left(\sum_{m=1}^N \varepsilon^m \frac{\partial}{\partial t_m} + \sum_{m=1}^N \varepsilon^m \mathbf{e}_j \cdot \nabla_m \right)^k. \quad (4.19)$$

Nous appliquons de la même manière le développement de Chapman-Enskog défini par les équations (4.9)-(4.11) à l'équation de Boltzmann sur réseau (4.8) pour obtenir:

$$\begin{aligned} g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) &= \left(1 - \frac{1}{\tau_g} \right) \left(\sum_{m=0}^N \varepsilon^m g_j^{(m)}(\mathbf{x}, t) \right) \\ &\quad + \frac{1}{\tau_g} g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) + \Delta t \left(\sum_{m=1}^N \varepsilon^m H_j^{(m)}(\mathbf{x}, t) \right) \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{2} \sum_{m=1}^N \varepsilon^m \left(\frac{\partial}{\partial t_m} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_m \right) \left(\sum_{m=1}^N \varepsilon^m H_j^{(m)}(\mathbf{x}, t) \right) \\ &\quad + \mathcal{O}(\Delta t^3) + \mathcal{O}(\varepsilon^{N+1}). \end{aligned} \quad (4.20)$$

En faisant la différence entre le développement de Taylor (4.14) d'ordre M et l'équation de Boltzmann sur réseau (4.8) nous obtenons l'égalité suivante:

$$\begin{aligned} g_j(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_g} (g_j(\mathbf{x}, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \Delta t H_j(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right) H_j(\mathbf{x}, t) \\ = g_j(\mathbf{x}, t) + \sum_{k=1}^2 \frac{\Delta t^k}{k!} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right)^k g_j(\mathbf{x}, t) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \end{aligned} \quad (4.21)$$

On a donc

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_g} (g_j(\mathbf{x}, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) - \left(\Delta t + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right) \right) H_j(\mathbf{x}, t) \\ + \sum_{k=1}^2 \frac{\Delta t^k}{k!} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right)^k g_j(\mathbf{x}, t) = \mathcal{O}(\Delta t^3). \end{aligned} \quad (4.22)$$

On applique enfin le développement de Chapman-Enskog défini par les équations (4.9)-(4.11) à l'équation (4.22). D'après les équations (4.16) et (4.20), nous obtenons

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_g} \left(\sum_{m=0}^N \varepsilon^m g_j^{(m)}(\mathbf{x}, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) \right) \\ - \left(\Delta t + \frac{\Delta t^2}{2} \sum_{m=1}^N \varepsilon^m \left(\frac{\partial}{\partial t_m} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_m \right) \right) \left(\sum_{m=1}^N \varepsilon^m H_j^{(m)}(\mathbf{x}, t) \right) \\ + \sum_{k=1}^2 \sum_{m=1}^N \sum_{p=1}^m \sum_{q=0}^{m-p} \varepsilon^p D_j^{p,k} \varepsilon^q g_j^{(q)}(\mathbf{x}, t) = \mathcal{O}(\Delta t^3) + \mathcal{O}(\varepsilon^{N+1}). \end{aligned} \quad (4.23)$$

La relation (4.23) peut s'écrire sous la forme

$$\mathcal{P}_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) + \varepsilon \mathcal{P}_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \varepsilon^2 \mathcal{P}_j^{(2)}(\mathbf{x}, t) + \dots = \mathcal{O}(\Delta t^3) + \mathcal{O}(\varepsilon^{N+1}), \quad (4.24)$$

avec

$$\mathcal{P}_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau_g} \left(g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) \right), \quad (4.25)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) &= D_j^{1,1} g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{\tau_g} g_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) - \Delta t H_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} D_j^{1,1} H_j^{(0)}(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_j^{(2)}(\mathbf{x}, t) &= (D_j^{2,1} + D_j^{2,2}) g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) + D_j^{1,1} g_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) \\ &\quad + \frac{1}{\tau_g} g_j^{(2)}(\mathbf{x}, t) - \Delta t H_j^{(2)}(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{2} D_j^{1,1} H_j^{(1)}(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (4.27)$$

et pour $m > 2$

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_j^{(m)}(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{\tau_g} g_j^{(m)}(\mathbf{x}, t) - \Delta t H_j^{(m)}(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{2} D_j^{1,1} H_j^{(m-1)}(\mathbf{x}, t) \\ &\quad + \sum_{k=1}^2 \sum_{p=1}^m \sum_{q=0}^{m-p} D_j^{p,k} g_j^{(q)}(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (4.28)$$

et on note par \mathcal{P}^m les fonctions macroscopiques (pour $m \geq 0$)

$$\mathcal{P}^{(m)} = \sum_{j=0}^{n-1} \mathcal{P}_j^{(m)}. \quad (4.29)$$

Comme les différentes échelles de perturbations sont linéairement indépendantes, on a $\mathcal{P}^{(m)} = 0$ (pour $m \geq 0$).

Ainsi par l'utilisation des $N + 1$ fonctions macroscopiques $\mathcal{P}^{(m)}$ on en déduit à partir de (4.29)

$$\mathcal{P}(\mathbf{x}, t) = \sum_{m=0}^N \varepsilon^m \mathcal{P}^{(m)}(\mathbf{x}, t) = \mathcal{O}(\Delta t^3) + \mathcal{O}(\varepsilon^{N+1}). \quad (4.30)$$

L'équation macroscopique portant sur la quantité ρ est approchée par

$$\mathcal{P}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (4.31)$$

avec une erreur de l'ordre de $\mathcal{O}(\Delta t^3) + \mathcal{O}(\varepsilon^{N+1})$.

Remarque 4.2 .

Si Δt est de l'ordre de ε alors d'après (4.31) l'équation macroscopique est ainsi approchée par

$$\sum_{m=0}^2 \varepsilon^m \mathcal{P}^{(m)}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (4.32)$$

avec une erreur de l'ordre de $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$.

3 Développement d'ordre 2

Pour illustrer la mise en oeuvre du développement de Chapman-Enskog pour la méthode de Boltzmann sur réseau, nous effectuons à présent un développement d'ordre 2 afin que la résolution de l'équation de Boltzmann sur réseau (4.8) nous permette de résoudre une équation différentielle équivalente à l'équation (4.31) portant sur la quantité macroscopique ρ pour $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T)$ définie par:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \nabla B(\rho) - \operatorname{div}(\nabla D(\rho)) = F(\rho; \mathbf{x}, t), \quad (4.33)$$

où B est un opérateur de transport, D un opérateur de diffusion et F un second membre donné.

Nous supposons que les fonctions g_j^{eq} , H_j et le taux de relaxation τ_g sont connus.

D'après la propriété (4.12), nous avons à l'ordre 0:

$$\mathcal{P}^{(0)}(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (4.34)$$

A l'ordre 1, nous obtenons d'après (4.12), (4.1) et (4.2) :

$$\begin{aligned} 0 = \mathcal{P}^{(1)}(\mathbf{x}, t) &= \sum_{j=0}^{n-1} \left(D_j^{1,1} g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) - \Delta t H_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) \right) \\ &= \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} \rho(\mathbf{x}, t) + \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) - H^{(1)}(\mathbf{x}, t) \right), \end{aligned} \quad (4.35)$$

où $H^{(1)}$ correspond à l'ordre 1 du développement (4.10). A l'ordre 2, nous obtenons l'équation:

$$\begin{aligned} 0 = \mathcal{P}^{(2)}(\mathbf{x}, t) &= \sum_{j=0}^{n-1} \left((D_j^{2,1} + D_j^{2,2}) g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) + D_j^{1,1} g_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) \right. \\ &\quad \left. - \Delta t H_j^{(2)}(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{2} D_j^{1,1} H_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) \right) \end{aligned} \quad (4.36)$$

D'après la définition des opérateurs $D_j^{2,1}$ et $D_j^{2,2}$ donnée par les équations (4.18), nous avons:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{n-1} (D_j^{2,1} + D_j^{2,2}) g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) &= \Delta t \sum_{j=0}^{n-1} \left(\frac{\partial}{\partial t_2} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_2 \right) g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{2} \sum_{j=0}^{n-1} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) \\ &= \Delta t \frac{\partial}{\partial t_2} \rho(\mathbf{x}, t) + \Delta t \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_2 g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{2} \sum_{j=0}^{n-1} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (4.37)$$

On remarque d'après (4.18) que $D_j^{2,2} = \frac{1}{2} (D_j^{1,1})^2$, on en déduit par l'utilisation de (4.26) que

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t^2}{2} \sum_{j=0}^{n-1} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) &= \frac{\Delta t}{2} \sum_{j=0}^{n-1} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) \\ &\times \left(-\frac{1}{\tau_g} g_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \Delta t H_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t}{2} D_j^{1,1} H_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) \right). \end{aligned} \quad (4.38)$$

En utilisant (4.12), nous avons

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t^2}{2} \sum_{j=0}^{n-1} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) &= -\frac{\Delta t}{2\tau_g} \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 g_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) \\ &+ \frac{\Delta t}{2} \sum_{j=0}^{n-1} D_j^{1,1} H_j^{(1)}(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (4.39)$$

par conséquent (4.37) devient

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{n-1} (D_j^{2,1} + D_j^{2,2}) g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) &= \Delta t \frac{\partial}{\partial t_2} \rho(\mathbf{x}, t) + \Delta t \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_2 g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) \\ &- \frac{\Delta t}{2\tau_g} \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 g_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \sum_{j=0}^{n-1} \frac{\Delta t}{2} D_j^{1,1} H_j^{(1)}(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (4.40)$$

En injectant (4.40) dans (4.36) et en utilisant à nouveau (4.12), nous obtenons

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{(2)}(\mathbf{x}, t) &= \Delta t \frac{\partial}{\partial t_2} \rho(\mathbf{x}, t) + \Delta t \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_2 g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) \\ &+ \Delta t \left(1 - \frac{1}{2\tau_g} \right) \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 g_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) - \Delta t H^{(2)}(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (4.41)$$

La dernière étape pour déterminer $\mathcal{P}^{(2)}$ est d'exprimer la somme $\sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 g_j^{(1)}(\mathbf{x}, t)$. D'après (4.26) on a

$$\sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j g_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) = -\tau_g \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \left(D_j^{1,1} g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) + \Delta t H_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) \right), \quad (4.42)$$

et ainsi

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{(2)}(\mathbf{x}, t) &= \Delta t \frac{\partial}{\partial t_2} \rho(\mathbf{x}, t) + \Delta t \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_2 g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) \\ &+ \Delta t \left(\frac{1}{2} - \tau_g \right) \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 D_j^{1,1} g_j^{(0)} \\ &+ \Delta t^2 \left(\frac{1}{2} - \tau_g \right) \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 H_j^{(1)} - \Delta t H^{(2)}(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Nous obtenons finalement d'après (4.34), (4.35), (4.43) et (4.30):

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}(\mathbf{x}, t) &= \varepsilon \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} \rho(\mathbf{x}, t) + \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) - H^{(1)}(\mathbf{x}, t) \right) \\
&\quad + \varepsilon^2 \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_2} \rho(\mathbf{x}, t) + \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_2 g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) + \left(\frac{1}{2} - \tau_g \right) \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 D_j^{1,1} g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{1}{2} - \tau_g \right) \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 H_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) - H^{(2)}(\mathbf{x}, t) \right) \\
&= \Delta t \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} \right) \rho(\mathbf{x}, t) - \Delta t (\varepsilon H^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \varepsilon^2 H^{(2)}(\mathbf{x}, t)) \\
&\quad + \Delta t \left(\sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot (\varepsilon \nabla_1 + \varepsilon^2 \nabla_2) g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) \right) \\
&\quad + \varepsilon^2 \left(\frac{1}{2} - \tau_g \right) \left(\sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 D_j^{1,1} g_j^{(0)}(\mathbf{x}, t) + \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 H_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) \right) \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{4.44}$$

Ainsi, en utilisant (4.9)-(4.11) et la relation (4.18) nous avons

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) + \left(\frac{1}{2} - \tau_g \right) \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right) g_j^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \\
= H(\mathbf{x}, t) - \left(\frac{1}{2} - \tau_g \right) \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla H_j(\mathbf{x}, t).
\end{aligned} \tag{4.45}$$

Afin d'obtenir (4.33) à partir de (4.45) (comme nous le montrons dans la Partie III), on choisit convenablement g_j^{eq} (satisfaisant (4.1)), H_j et le taux de relaxation τ_g tels que

$$\begin{aligned}
\sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla g_j^{eq} &= \nabla B, \\
\left(\frac{1}{2} - \tau_g \right) \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla D_j^{1,1} g_j^{(eq)} &= \operatorname{div}(\nabla D), \\
H = F \text{ et } \left(\frac{1}{2} - \tau_g \right) \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{e}_j \cdot \nabla H_j^{(1)} &= 0.
\end{aligned} \tag{4.46}$$

Ainsi, si les équations (4.1) et (4.46) sont satisfaites, la résolution de l'équation de Boltzmann (4.8) permet d'approcher la quantité macroscopique ρ solution de l'équation (4.33) avec une erreur de l'ordre de $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$.

5 Traitement des conditions aux bords

Le principal avantage de la méthode de Boltzmann sur réseau est son implémentation légère malgré les difficultés apportées par le traitement des conditions aux bords. En effet, en passant d'une échelle macroscopique à une échelle mésoscopique, il faut adapter le traitement des conditions aux bords afin que celles-ci restent valides. Pour cela, il faut faire des choix concernant les fonctions de répartitions sur les bords, afin de compenser l'absence d'information concernant le flux de particules entrantes ($g_j(\mathbf{x}, t)$, $\forall \mathbf{x} \in \partial\Omega$, où $\partial\Omega$ est supposé suffisamment régulier, selon les vitesses \mathbf{e}_j entrantes). Ces choix sont faits en fonction du développement de Chapman-Enskog (Chapitre 4), en tenant compte des lois de conservations des moments (équation (2.3)), ou en transposant directement les conditions aux bords à l'échelle mésoscopique. Nous détaillons ici comment ces choix peuvent être faits pour des conditions aux bords de type Dirichlet, Neumann ou Robin, et détaillons plusieurs approches communément utilisées. Nous utilisons des méthodes adaptables à tous les modèles $DdQn$, mais par soucis de simplicité nous illustrons ces méthodes pour le modèle $D2Q9$ que nous utilisons par la suite.

Remarque 5.1 .

Le traitement des conditions aux bords dépend des conditions imposées (de type Neumann, Dirichlet ou Robin), mais aussi de la nature de l'équation traitée et influence considérablement la stabilité de la méthode $DdQn$ choisie (voir par exemple l'analyse de R.W. Nash et al. [106]).

Avant de présenter les différentes méthodes de traitement des conditions aux bords, nous étudions l'influence des erreurs commises aux bords. L'erreur induite par l'approximation faite sur le bord au noeud \mathbf{x} se répercute à chaque itération aux noeuds voisins $\mathbf{x}_{i=1,\dots,n-1}$ suivant les directions $\mathbf{e}_{i=1,\dots,n-1}$ entrantes. Nous noterons $g_j(\mathbf{x}_i, t)$ les fonctions de répartition selon \mathbf{e}_j associées au noeud \mathbf{x}_i , voisin de \mathbf{x} dans la direction de la vitesse \mathbf{e}_i ($\mathbf{x}_i = \mathbf{x} + \mathbf{e}_i\Delta t$ comme le montre la Figure 5.1). Lors de la phase de transport, les flux de particules passent d'un noeud à l'autre avec un facteur

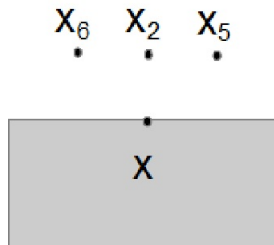


Figure 5.1: Numérotation des noeuds $\mathbf{x}_i = \mathbf{x} + \mathbf{e}_i\Delta t$.

Δt , ce dernier étant supposé de l'ordre du nombre de Knudsen ε . Ainsi, une erreur de l'ordre de $\mathcal{O}(\varepsilon^N)$ associée au point \mathbf{x} engendre une erreur d'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^{N+1})$ à ses voisins \mathbf{x}_i , qui s'ajoute à l'erreur d'approximation.

Nous commençons par présenter plusieurs méthodes classiques appliquées à des bords à géométrie simple. Ces différentes méthodes nous permettent de définir la méthode de traitement des conditions aux bords que nous utiliserons par la suite. Nous considérons donc dans un premier temps un domaine Ω dont les bords sont parallèles aux axes x et y et dont les mailles sont carrées. Ce choix nous permet de présenter les différentes méthodes avec des notations plus simples que dans le cas d'un bord $\partial\Omega$ quelconque, que nous présentons à la fin de cette section.

Nous détaillons dans un premier temps la méthode d'interpolation proposées par Guo Z.-L. et al. [69]. Puis, nous introduisons la méthode du *bounce-back* telle qu'elle est proposée par S. Succi en 2001 [125] (voir aussi [141] ou [126] pour des références plus anciennes). Celle-ci est particulièrement utilisée pour la simulation en mécanique des fluides. Nous expliquons ensuite la méthode du *halfway bounce-back* (dite auto-corrective) proposée par T. Zhang et al. en 2012 [137] d'après le modèle de A.J.C Ladd [94],[95]. Cette dernière fait intervenir de l'interpolation tout en conservant la démarche générale du *bounce-back*. Enfin, nous généralisons cette dernière pour qu'elle s'applique à des bords non-droit comme ce sera le cas dans notre application sur le coeur (Partie III) .

Nous traitons des conditions de type Robin telles que pour $\mathbf{x} \in \partial\Omega$:

$$\alpha_1 \rho(\mathbf{x}, t) + \alpha_2 \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}, t) = F_{bord}(\mathbf{x}, t), \quad (5.1)$$

où \mathbf{n} est la normale sortante, et α_1, α_2 deux constantes telles qu'au moins l'une d'elles soit non nulle ($\alpha_1 = 0$ donne des conditions de type Neumann et $\alpha_2 = 0$ des conditions de type Dirichlet).

Nous commençons par noter distinctement la phase de collision de la phase de transport (Figure 3.4) dans l'équation de Boltzmann sur réseau (4.8):

$$\begin{aligned} \text{Collision:} \quad & g_j^{col}(\mathbf{x}, t) = g_j(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_g} (g_j(\mathbf{x}, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \Delta t R_j(\mathbf{x}, t), \\ \text{Transport:} \quad & g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) = g_j^{col}(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (5.2)$$

où $R_j = H_j + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right) H_j$ est une fonction regroupant les termes sources H_j et ses dérivées. Lors de la phase de transport, les directions entrantes ne sont pas connues. Nous devons donc pour tout $\mathbf{x} \in \partial\Omega$ approximer ces fonctions de répartition entrantes $g_j(\mathbf{x}, t + \Delta t)$ à la fin de chaque itération.

Dans un premier temps, afin de justifier la pertinence des méthodes que nous allons introduire par la suite, nous présentons une manière simple, mais malheureusement fortement instable, d'implémenter des conditions de Dirichlet ou de Neumann, en utilisant directement la correspondance entre l'échelle macroscopique et mésoscopique induite par les équations des moments (2.3). Ainsi, dans le cas où $\alpha_2 = 0$, on peut implémenter de manière simple et naturelle les bords tels que pour $\mathbf{x} \in \partial\Omega$:

$$g_j(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \frac{w_j}{\alpha_1} F_{bord}(\mathbf{x}, t). \quad (5.3)$$

Nous pouvons de la même manière proposer un traitement de conditions de Neumann directement à partir des noeuds voisins \mathbf{x}_i en supposant que $\mathbf{n} = -\mathbf{e}_i$, que \mathbf{x}_i soit à une distance de $\Delta\mathbf{x}$ de \mathbf{x} , et tel que $\alpha_1 = 0$:

$$g_j(\mathbf{x}, t + \Delta t) = g_j(\mathbf{x}_i, t + \Delta t) + \Delta\mathbf{x} \frac{w_j}{\alpha_2} F_{bord}(\mathbf{x}, t). \quad (5.4)$$

Une combinaison des conditions (5.3) et (5.4) permet d'obtenir des conditions de Robin (5.1). Ce choix d'implémentation simple permet des approximations précises, et même exactes, sur les bords, mais cela entraîne de fortes instabilités au voisinage du bord. En effet, on utilise ici la relation existant entre la quantité macroscopique ρ et les répartitions particulières g_j , mais nous n'avons aucune garantie concernant la conservation de la quantité de mouvement (liée à la vitesse \mathbf{u}), à l'énergie (liée à E), ou à d'autres moments d'ordres plus élevés. Ces instabilités se propagent au reste du domaine Ω d'itération en itération, entraînant des erreurs de plus en plus importantes. Il faut donc faire un compromis, et tolérer une erreur dont on pourra contrôler l'ordre de grandeur afin de garantir la stabilité du système sur le long terme.

1 Méthode d'interpolation de la partie perturbée

Cette première méthode proposée par Guo Z.-L. et al. [69] consiste à approcher les fonctions de répartition entrantes à partir des informations connues sur les noeuds adjacents. Pour cela, on sépare les fonctions de répartition en deux parties distinctes: une partie d'équilibre (correspondant à la fonction de répartition d'équilibre g_j^{eq} connue) et une partie perturbée g_j^{neq} à interpoler. Ainsi, on écrit les répartitions g_j de la manière suivante:

$$g_j(\mathbf{x}, t) = g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) + g_j^{neq}(\mathbf{x}, t). \quad (5.5)$$

On réécrit dans un premier temps la phase de collision (5.2) à partir de l'équation (5.5):

$$\begin{aligned} g_j^{col}(\mathbf{x}, t) &= g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) + g_j^{neq}(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_g} (g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) + g_j^{neq}(\mathbf{x}, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \Delta t R_j(\mathbf{x}, t) \\ &= g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) + g_j^{neq}(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_g} g_j^{neq}(\mathbf{x}, t) + \Delta t R_j(\mathbf{x}, t) \\ &= g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) + \left(1 - \frac{1}{\tau_g}\right) g_j^{neq}(\mathbf{x}, t) + \Delta t R_j(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (5.6)$$

D'après le développement de Chapman-Enskog (4.9), avec $N = 1$ nous avons une première estimation de la partie perturbée, à savoir:

$$g_j^{neq} = \varepsilon g_j^{(1)} + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (5.7)$$

Nous devons à présent avoir une approximation des fonctions $g_j^{(1)}$. Pour cela, nous pouvons utiliser l'ensemble des fonctions connues définies aux points adjacents \mathbf{x}_i . On peut réécrire l'égalité (5.5) pour tout noeud voisin $\mathbf{x}_i \in \Omega$:

$$g_j^{neq}(\mathbf{x}_i, t) = g_j(\mathbf{x}_i, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}_i, t). \quad (5.8)$$

Le nombre de Knudsen ε étant de l'ordre du pas de temps Δt , et la célérité c étant définie par $c = \frac{\Delta \mathbf{x}}{\Delta t}$, nous avons la relation $\Delta \mathbf{x} \approx c\varepsilon$. Les noeuds \mathbf{x}_i étant éloignés de \mathbf{x} d'une distance de l'ordre de $\mathcal{O}(\Delta \mathbf{x})$, on obtient d'après [69]:

$$g_j^{(1)}(\mathbf{x}, t) = g_j^{(1)}(\mathbf{x}_i, t) + \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (5.9)$$

On obtient donc en injectant cette dernière équation (5.9) dans l'expression de la partie perturbée (5.7) l'équation:

$$\begin{aligned} g_j^{neq}(\mathbf{x}, t) &= \varepsilon \left(g_j^{(1)}(\mathbf{x}_i, t) + \mathcal{O}(\varepsilon) \right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &= \varepsilon g_j^{(1)}(\mathbf{x}_i, t) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (5.10)$$

On obtient une estimation de la partie perturbée $g_j^{neq}(\mathbf{x}, t)$ exprimée à partir des fonctions de répartition connues aux noeuds \mathbf{x}_i en utilisant l'équation (5.8):

$$g_j^{neq}(\mathbf{x}, t) = g_j(\mathbf{x}_i, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}_i, t) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (5.11)$$

Maintenant que nous avons une expression de la partie perturbée $g_j^{neq}(\mathbf{x}, t)$ avec une précision d'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$, nous devons approcher la partie d'équilibre $g_j^{eq}(\mathbf{x}, t)$. Pour obtenir une estimation de l'erreur faite en approchant $g_j^{eq}(\mathbf{x}, t)$ à partir des fonctions d'équilibres connues sur les noeuds voisins $g_j^{eq}(\mathbf{x}_i, t)$, on utilise les hypothèses faites sur le problème physique considéré. Par exemple, dans le cadre du problème traité par Guo Z.-L. et al. [69], des hypothèses faites sur le gradient des fonctions macroscopiques ρ et \mathbf{u} nous permettent d'obtenir:

$$g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = g_j^{eq}(\mathbf{x}_i, t) + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (5.12)$$

Ainsi, on approche finalement fonctions de répartition post-collision sur le bord en utilisant les équations (5.8) (5.12) pour réécrire l'équation (5.6):

$$\begin{aligned} g_j^{col}(\mathbf{x}, t) &= g_j^{eq}(\mathbf{x}_i, t) + \left(1 - \frac{1}{\tau_g} \right) (g_j(\mathbf{x}_i, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}_i, t)) + \Delta t R_j(\mathbf{x}, t) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &= g_j(\mathbf{x}_i, t) - \frac{1}{\tau_g} (g_j(\mathbf{x}_i, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}_i, t)) + \Delta t R_j(\mathbf{x}, t) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (5.13)$$

Cette méthode d'interpolation des fonctions de répartition entrantes garantie donc une bonne approximation de ces directions tout en restant simple à implémenter. Nous pouvons par exemple traiter des conditions de Dirichlet ($\alpha_2 = 0$) telles que $\forall \mathbf{x} \in \partial\Omega$:

$$g_j(\mathbf{x}, t + \Delta t) = g_j(\mathbf{x}_i, t) - \frac{1}{\tau_g} (g_j(\mathbf{x}_i, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}_i, t)) + \frac{w_j}{\alpha_1} F_{bord}(\mathbf{x}, t) - w_j \rho(\mathbf{x}_i, t). \quad (5.14)$$

De la même manière, nous traitons des conditions de Neumann, en supposant que $\mathbf{n} = -\mathbf{e}_i$,

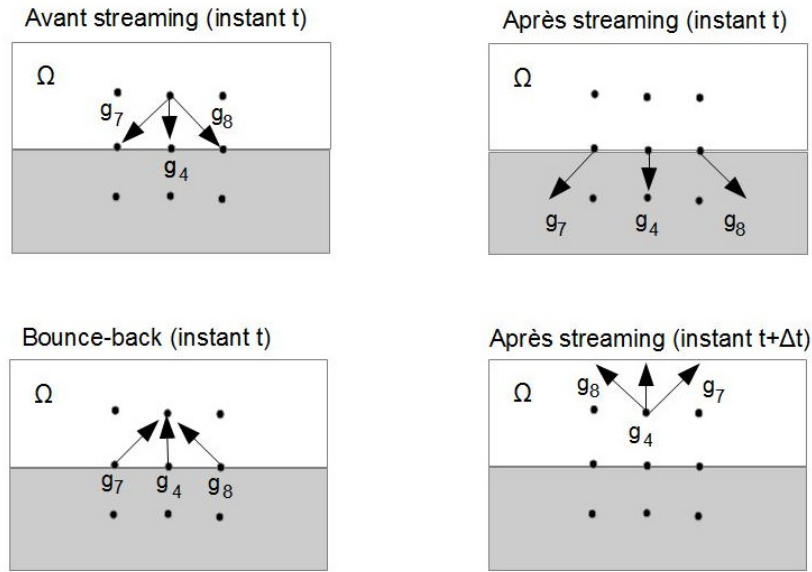


Figure 5.2: Méthode du *Bounce-back* modélisant le rebond des particules (modèle $D2Q9$).

que \mathbf{x}_i soit à une distance $\Delta\mathbf{x}$ de \mathbf{x} , avec $\alpha_1 = 0$, par:

$$g_j(\mathbf{x}, t + \Delta t) = g_j(\mathbf{x}_i, t) - \frac{1}{\tau_g} (g_j(\mathbf{x}_i, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}_i, t)) + \Delta\mathbf{x} \frac{w_j}{\alpha_2} F_{bord}(\mathbf{x}, t). \quad (5.15)$$

Remarque 5.2 .

Cette méthode s'avère très efficace pour des fonctions dont les dérivées en temps et en espace sont régulières et dont les normes restent de l'ordre de grandeur de la vitesse de grille c , mais il faut adopter un traitement plus fin dans le cas contraire pour éviter que les erreurs ne s'accumulent et ne soient plus négligeables.

Méthode du *bounce-back* générale

L'idée de la méthode du *bounce-back* diffère des autres que nous présentons ici. Avec cette méthode, nous ne transposons pas le traitement des conditions aux bords d'une échelle macroscopique à l'échelle mésoscopique. On modélise directement le rebond des particules sur une paroi, comme le montre la Figure 5.2 pour un modèle $D2Q9$. Cette méthode est particulièrement utilisée en mécanique des fluides, où les bords des domaines de simulations sont supposés solides. Les particules ne peuvent donc pas sortir du domaine de simulation et rebondissent sur les parois en garantissant ainsi la conservation de la masse. Cette méthode est souvent efficace pour des bords réguliers. Comme le montre la Figure 5.2, l'idée est d'approcher les fonctions de répartition entrantes selon la direction de \mathbf{e}_j directement à partir des particules supposées sortir selon la direction opposée, c'est à dire dans la direction $\bar{\mathbf{e}}_j$ avec $\bar{\mathbf{e}}_j = -\mathbf{e}_j$. Ainsi, entre deux itérations (instants t et $t + \Delta t$), les fonctions de répartition sortantes sont renvoyées dans la direction opposée. Dans cette méthode, nous utilisons directement les conditions au bord imposées à l'échelle macroscopique pour traduire ces relations. Ainsi, nous n'interpolons pas les directions entrantes mais nous les calculons ex-

pliquement en résolvant directement un système bien posé. Nous présentons ici dans les grandes lignes le principe pour des conditions de Robin couplées à une condition supplémentaire portant sur les moments d'ordre 1 afin d'obtenir un système de trois équations à trois inconnues.

La méthode du bounce-back s'appuie sur les différences finies pour approcher le gradient de la manière suivante:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}, t) = \frac{\rho(\mathbf{x}, t) - \rho(\mathbf{x}_i, t)}{\Delta \mathbf{x}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (5.16)$$

où nous supposons à nouveau que $\mathbf{n} = -\mathbf{e}_i$ et que \mathbf{x}_i est situé à une distance $\Delta \mathbf{x}$ du point \mathbf{x} . Ainsi, les conditions aux bords (5.1) deviennent:

$$\alpha_1 \rho(\mathbf{x}, t) + \alpha_2 \frac{\rho(\mathbf{x}, t) - \rho(\mathbf{x}_i, t)}{\Delta \mathbf{x}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) = F_{bord}(\mathbf{x}, t), \quad (5.17)$$

et nous ajoutons à ces conditions, une condition portant sur le moment d'ordre 2 telle que:

$$\sum_{j=1}^{n-1} \mathbf{e}_j g_j(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} u_{bord} \\ v_{bord} \end{pmatrix}. \quad (5.18)$$

Cette condition supplémentaire est relative à la conservation de la quantité de mouvement sur l'ensemble du domaine. Cela peut être des conditions de non frottement dans le cadre d'un problème de mécanique des fluides.

Remarque 5.3 .

Les conditions supplémentaires portant sur la vitesse \mathbf{u} sont courantes en mécanique des fluides, mais il est possible d'utiliser des conditions portant sur des moments d'ordres différents en fonction du problème traité. Le but est d'obtenir un système bien posé pour déterminer explicitement les fonction de répartition entrantes.

D'après (5.17), la fonction ρ à approcher satisfait l'équation:

$$\left(\alpha_1 + \frac{\alpha_2}{\Delta x} \right) \rho(\mathbf{x}, t) = F_{bord}(\mathbf{x}, t) + \frac{\alpha_2}{\Delta x} \rho(\mathbf{x}_i, t), \quad (5.19)$$

d'où:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{n-1} g_j(\mathbf{x}, t) &= \rho(\mathbf{x}, t) \\ &= \frac{\Delta x}{\Delta x \alpha_1 + \alpha_2} F_{bord}(\mathbf{x}, t) + \frac{\alpha_2}{\Delta x \alpha_1 + \alpha_2} \rho(\mathbf{x}_i, t) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (5.20)$$

Ainsi, dans le cadre de la méthode $D2Q9$, et pour des bords assez réguliers, nous aurons à résoudre le système constitué des équations (5.18) et (5.20). Nous aurons alors trois directions entrantes à déterminer, une équation portant sur la quantité ρ , et deux pour la vitesse \mathbf{u} . Un traitement plus fin doit être mis en place pour des domaines moins réguliers afin que le système obtenu reste bien posé, et que l'on puisse déterminer toutes les fonctions $g_j(\mathbf{x}, t + \Delta t)$ selon les directions entrantes.

2 Méthode auto-corrective.

Nous présentons à présent l'approche que nous allons le plus utiliser par la suite dans cette thèse. Il s'agit d'une méthode hybride reprenant l'idée du bounce-back dans le sens où nous modélisons un rebond de particules sur des parois (réelles ou fictives), tout en interpolant les informations manquantes en \mathbf{x} à partir des données connues aux noeuds voisins \mathbf{x}_i .

Le principal intérêt de cette méthode est de compenser, et donc de maîtriser, d'une itération à l'autre, l'erreur commise. Autrement dit, pour des conditions de type Dirichlet, si $\rho(\mathbf{x}, t) < F_{bord}(\mathbf{x}, t)$, alors $\rho(\mathbf{x}, t + \Delta t) > F_{bord}(\mathbf{x}, t + \Delta t)$, et inversement. Le principe est le même pour traiter des conditions au bord de type Neumann. Pour cela, nous commençons par introduire un terme correctif $g_j^*(\mathbf{x}, t)$ calculé à partir des fonctions de répartition post-collision de la direction opposée $\bar{\mathbf{e}}_j$, notée \bar{g}_j . La fonction g_j^* est ainsi défini par:

$$g_j^*(\mathbf{x}, t + \Delta t) = w_j F_{bord}(\mathbf{x}, t) - \bar{g}_j^{col}(\mathbf{x}, t). \quad (5.21)$$

Le fait de considérer les fonctions de répartition en \mathbf{x} avant la phase de transport permet de corriger la répartition des particules sans en modifier la quantité. De plus, en calculant ce terme de compensation en fonction des directions opposées permet de modéliser le rebond des particules sur le bord du domaine comme dans le cadre de la méthode de bounce-back (Figure 5.2). On a ainsi pour des conditions de Dirichlet ($\alpha_2 = 0$):

$$g_j(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \alpha^* g_j^*(\mathbf{x}, t + \Delta t) + \frac{1}{\alpha_1} w_j F_{bord}(\mathbf{x}, t), \quad (5.22)$$

avec α^* un paramètre à définir.

Ainsi, si à un instant t on a $\sum_{j=0}^{n-1} \bar{g}_j^{col}(\mathbf{x}, t) > F_{bord}(\mathbf{x}, t)$, alors on a $\sum_{j=0}^{n-1} g_j(\mathbf{x}, t) < F_{bord}(\mathbf{x}, t)$, et inversement.

Pour des conditions de Neumann, nous commençons par supposer que $\mathbf{n} = -\mathbf{e}_i$ afin d'exprimer le gradient en fonction du noeud voisin \mathbf{x}_i . Nous choisissons cette fois-ci de définir la fonction correctrice g_j^* à partir de l'approximation de ρ au bord à l'instant t :

$$g_j^*(\mathbf{x}, t + \Delta t) = w_j \rho(\mathbf{x}_i, t) - \bar{g}_j^{col}(\mathbf{x}, t). \quad (5.23)$$

Nous obtenons alors:

$$g_j(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \alpha^* g_j^*(\mathbf{x}, t + \Delta t) + g_j(\mathbf{x}_i, t) + \frac{\Delta \mathbf{x}}{\alpha_2} w_j F_{bord}(\mathbf{x}, t). \quad (5.24)$$

Cette méthode permet ainsi d'approcher les conditions au bord avec une erreur maîtrisée. Celle-ci sera d'une itération à l'autre positive puis négative, garantissant ainsi une meilleure stabilité que dans le cas d'un *bounce-back*.

3 Traitement de bords quelconques en dimension 2

Par la suite, nous traitons des bords quelconques en dimension 2 (cela sera appliqué dans la Partie III, à un coeur). Nous devons donc adapter notre méthode. De plus, nous prenons un maillage qui recouvre le domaine Ω de manière suffisamment fine pour que le bord $\partial\Omega$ passe par des noeuds du

maillage.

Pour approcher des conditions de Robin pour une normale sortante $\mathbf{n} = (a, b)^T$ non colinéaire aux vitesses \mathbf{e}_j , nous choisissons d'approcher de manière pondérée $\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{n}}$ à partir de deux noeuds voisins notés \mathbf{x}_x et \mathbf{x}_y .

Soient $\mathbf{n}_x = \begin{pmatrix} -a \\ 0 \end{pmatrix}$ et $\mathbf{n}_y = \begin{pmatrix} 0 \\ -b \end{pmatrix}$. Les vecteurs $\mathbf{e}_{i=1, \dots, n-1}$ correspondent à une combinaison linéaire de ces deux vecteurs. L'interpolation des fonctions de répartition $g_j(\mathbf{x}, t)$ est alors effectuée à partir des fonctions de répartition $g_j(\mathbf{x}_x, t)$ et $g_j(\mathbf{x}_y, t)$. Ces deux fonctions sont associées à des poids p_a et p_b , vérifiant $p_a + p_b = 1$, et définis par:

$$p_a = \frac{|a|}{|a| + |b|}, \quad p_b = \frac{|b|}{|a| + |b|}. \quad (5.25)$$

Pour satisfaire des conditions de Robin (5.1), nous définissons la fonction correctrice g_j^* par sommation de celles définies dans le cadre de conditions de Dirichlet (5.21) et Neumann (5.23):

$$g_j^*(\mathbf{x}, t + \Delta t) = w_j(p_a \rho(\mathbf{x}_x, t) + p_b \rho(\mathbf{x}_y, t) + F_{bord}(\mathbf{x}, t)) - 2\bar{g}_j^{col}(\mathbf{x}, t). \quad (5.26)$$

On obtient finalement l'interpolation:

$$g_j(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \alpha^* g_j^*(\mathbf{x}, t + \Delta t) + p_a g_j(\mathbf{x}_x, t) + p_b g_j(\mathbf{x}_y, t) + \left(\frac{1}{\alpha_1} + \frac{\Delta \mathbf{x}}{\alpha_2} \right) w_j F_{bord}(\mathbf{x}, t). \quad (5.27)$$

Cette méthode de traitement des conditions au bord inspirée de la méthode du *bounce-back* et de la méthode auto-corrective est ainsi facile à adapter à des bords quelconques suffisamment réguliers, et à des conditions de type Dirichlet, Neumann ou Robin.

4 Traitement des conditions initiales

Contrairement aux conditions aux bords, la méthode de Boltzmann ne requiert dans le cas général pas de traitement particulier lors de l'initialisation. Les fonctions de répartition d'équilibre g_j^{eq} sont construites de telle sorte que les moments définis par l'équation (2.3) soient satisfaits, les fonctions de répartition particulière initiales peuvent être choisies telles que:

$$g_j(\mathbf{x}, 0) = g_j^{eq}(\mathbf{x}, 0) = w_j \rho(\mathbf{x}, 0), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega. \quad (5.28)$$

L'impact des conditions initiales sur la convergence est pratiquement négligeable. En effet, seule l'erreur commise à $t = 0$ se propage. Celle-ci s'estompe peu à peu (à condition qu'elle n'implique pas directement une instabilité trop importante). A l'inverse, les conditions aux bords interviennent à chaque itération et se propagent à l'intérieur du domaine à chaque nouvelle itération.

Part II

Simulation et analyse de LBM pour des problèmes issus du monde réel.

Dans cette partie, nous proposons des méthodes de Boltzmann sur réseau de type $D2Q9$ (LBM- $D2Q9$), avec un processus général, basé sur des méthodes existantes, et adaptées à différents types de problèmes issus du monde réel. Pour définir cette méthode générale, nous avons utilisé un processus itératif. Tout d'abord, nous avons analysé la méthode proposée en 1997 (voir [73]) pour établir un premier processus et comprendre les différents aspects de la méthode de Boltzmann (cette partie n'est pas présentée dans cette thèse).

Ensuite nous avons étudié dans le Chapitre 6 des équations différentielles paraboliques non-linéaires. Les équations possèdent des opérateurs de transport ou de diffusion non-linéaires, ainsi que des termes sources non-linéaires. Puis nous avons analysé l'équation de Burger-Fisher (voir [64]), décrivant des phénomènes de réaction-diffusion ou de convection-diffusion, qui apparaissent dans de nombreux domaines tels que la dynamique des populations, la dynamique des gaz, la biologie, l'écologie, l'hydrogéologie, etc. (voir [130], [27], [99], [55], [49], [105]). Dans ce cadre, nous adaptons notre méthode pour un opérateur de transport non-linéaire ($\mathbf{B}(\rho) = \begin{pmatrix} \rho^{\alpha_1} \\ \rho^{\alpha_2} \end{pmatrix}$, $\alpha_1, \alpha_2 > 0$) et un opérateur de diffusion linéaire ($D(\rho) = \alpha\rho$, avec $\alpha > 0$). Nous étudions en second lieu l'équation de conduction de la chaleur, où nous serons cette fois confrontés à un opérateur de diffusion non-linéaire ($D(\rho) = \rho^\alpha$, $\alpha > 0$). Enfin, nous nous intéressons à la simulation d'écoulements dans un milieu poreux. Dans ce dernier exemple, nous étudions un terme de diffusion de la forme $\text{div}(K(\mathbf{x})\nabla\rho(\mathbf{x}, t))$ où $K(\mathbf{x})$ est une fonction discontinue. Nous avons alors continué la généralisation en adaptant la méthode à des équations elliptiques et de type Helmholtz homogène, dans le Chapitre 7. L'équation de Helmholtz est utilisée pour l'étude des ondes et leur propagation via le calcul des modes propres des solutions de l'équation de d'Alembert [2]. Ensuite, dans le Chapitre 8, nous avons élargi la méthode aux systèmes d'équations différentielles couplées avec applications à un système de type Patlak-Keller-Segel utilisée en chimiotaxie (voir [89], [61]) pour étudier le comportement de cellules vis-à-vis d'une substance chimique. Enfin, dans le Chapitre 9, nous avons adapté notre méthode pour pouvoir résoudre des équations différentielles à variables complexes avec applications à l'équation de Schrödinger non-linéaire défocalisante utilisée en optique pour simuler le comportement de faisceaux lumineux (voir [124]).

Suite aux études de ces différents systèmes, nous avons défini une méthode avec un processus général de telle sorte que cela nous permette de résoudre une variété plus large de systèmes non linéaires incluant ces dernières.

Dans tous les cas que nous traiterons, nous considérons $\Omega \in \mathbb{R}^2$ (et $\Omega \in \mathbb{C}^2$ pour la résolution d'équations différentielles à valeurs complexes, dans le Chapitre 9.) un ouvert dont le bord $\partial\Omega$ est supposé suffisamment régulier. Nous notons par $\mathcal{Q} = \Omega \times (0, T)$ avec $T > 0$. Dans cette partie, nous validons nos méthodes en étudiant des problèmes dans des domaines Ω carrés.

Pour toutes ces méthodes, nous appuyons nos validations en considérant l'erreur relative mesurant la distance entre la solution approchée par notre méthode ρ_{approx} et la solution exacte ρ_{ex} par :

$$Err_\rho = \frac{\|\rho_{ex} - \rho_{approx}\|^2}{\|\rho_{ex}\|^2}, \quad (5.29)$$

où la norme $\|\cdot\|$ peut désigner la norme dans $L^2(\Omega)$, $L^2(0, T)$ ou $L^2(\mathcal{Q})$ selon le type d'erreur que nous souhaitons étudier, et en procédant en deux étapes.

Etape 1: estimation d'erreur a priori :

Nous étudions dans un premier temps des benchmarks définis dans \mathcal{Q} où l'étude de l'erreur Err_ρ permet d'établir les ordres de convergence α et β de la méthode en temps et en espace, respectivement. Cet ordre de convergence est donné selon la discrétisation en espace en calculant la pente β de la courbe définie par $f_{\Delta\mathbf{x}}(\log_2(\Delta\mathbf{x})) = \log_2(Err_\rho)$ (en imposant $\Delta t^\alpha \leq \Delta x^\beta$), et selon la discrétisation en temps en calculant la pente α de la courbe définie par $f_{\Delta t}(\log_2(\Delta t)) = \log_2(Err_\rho)$ (en imposant $\Delta t^\alpha \geq \Delta x^\beta$). Compte tenu des résultats obtenus dans la littérature (voir [38, 122, 123, 132, 133]) avec les méthodes à partir desquelles nous avons défini nos méthodes de Boltzmann sur réseau, nous nous attendons à des méthodes d'ordre $1 \leq \beta \leq 2$, pour $\Delta t^\alpha \leq \Delta x^\beta$, en espace et d'ordre $\alpha \approx 1$ en temps, pour $\Delta t^\alpha \geq \Delta x^\beta$.

Etape 2: analyse de stabilité :

La seconde étape de validation consiste à estimer l'impact de perturbations sur les systèmes étudiés afin d'assurer la stabilité de la méthode. Pour cela, nous allons introduire des perturbations dans les termes sources. Nous définissons une fonction $-1 \leq r_\rho(\mathbf{x}, t) \leq 1$ aléatoire, de moyenne nulle sur l'ensemble du maillage. Cette fonction est associée à un poids $0 < P_\rho < 1$ choisi. Nous définissons alors le terme source perturbé F_P par:

$$F_P(\mathbf{x}, t) = (1 + P_\rho r_\rho(\mathbf{x}, t))F(\mathbf{x}, t). \quad (5.30)$$

Ainsi, nous pouvons garantir la stabilité de nos méthodes, et estimer la sensibilité du système vis-à-vis des perturbations.

Remarque 5.4 .

La fonction r_ρ étant générée aléatoirement, les résultats présentés pour ces perturbations peuvent donc changer d'une simulation à l'autre..

Remarque 5.5 .

Dans un soucis de simplicité de notation, le taux de relaxation τ_g introduit précédemment sera à partir de maintenant noté τ .

6 Méthode de Boltzmann pour des équations de réaction-diffusion non-linéaires

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à des équations aux dérivées partielles non-linéaires de type réaction-diffusion. Pour ce faire, nous nous appuyons sur les travaux de Xiang X. [132] et de Shi B. [123] pour des équations de réaction-diffusion. Ce modèle est intéressant à de nombreux égards, et la démarche utilisée ici est suffisamment générale pour être appliquée à des problèmes très variés. Nous validons ce modèle en nous appuyant sur un exemple simple aux données connues. Puis, nous l'appliquons aux équations de Burger-Fisher (voir [64]) présentant un terme de transport non-linéaires. Nous voulons ensuite étudier le comportement d'un système à diffusion non-linéaire. Nous appliquons donc notre méthode à l'équation de conduction de la chaleur non-linéaire. Enfin, nous nous intéressons à un écoulement en milieu poreux afin d'étudier le bon comportement de notre méthode dans le cas d'un coefficient de diffusion discontinu.

1 Définition du problème

Dans un premier temps, nous nous intéressons à la définition des équations de réaction-diffusion que nous voulons traiter, et nous traitons l'adimensionnement de celles-ci. On s'intéresse à des équations différentielles non-linéaires, définies pour $(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{Q}$ par:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \operatorname{div} \mathbf{B}(\rho) = \operatorname{div}(\nu \nabla D(\rho)) + F(\rho; \mathbf{x}, t), \quad (6.1)$$

où $\mathbf{B} = (B_1, B_2)$ est un opérateur non-linéaire de transport différentiable selon ρ , D est un opérateur non-linéaire de diffusion différentiable selon ρ . Ces deux opérateurs sont supposés bien définis pour les problèmes que nous traitons par la suite. $\nu = \nu(\mathbf{x}, t)$ est le coefficient de diffusion et $F(\rho; \mathbf{x}, t)$ est un opérateur non-linéaire de type source.

De plus, ρ respecte la conditions aux bords de type Robin suivante, pour $\mathbf{x} \in \partial\Omega$:

$$\alpha_1 \rho(\mathbf{x}, t) + \alpha_2 \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}, t) = F_\rho(\mathbf{x}, t), \quad (6.2)$$

où F_ρ est une fonction connue et $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}$. La fonction ρ vérifie également la condition initiale (pour $\mathbf{x} \in \Omega$):

$$\rho(\mathbf{x}, 0) = \rho^0(\mathbf{x}), \quad (6.3)$$

où ρ^0 est une fonction connue.

Afin de pouvoir recomposer l'équation de réaction-diffusion (6.1) à l'aide du développement de Chapman-Enskog, nous considérons cette équation sous sa forme adimensionnelle, en reprenant les variables définies par les équations (4.3), (4.4) et (4.5) dans la section 1 du chapitre 4. On définit également:

$$\tilde{\rho} = \frac{1}{\rho_0} \rho, \quad \tilde{\nu} = \frac{\nu}{\nu_0} \quad (6.4)$$

où ρ_0 (resp. ν_0) est une densité (resp. viscosité) caractéristique. On obtient ainsi:

$$\frac{\rho_0}{T} \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial \tilde{t}}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) + \frac{\rho_0}{L} \tilde{\text{div}} \mathbf{B}(\tilde{\rho}) = \frac{\nu_0 \rho_0}{L^2} \tilde{\text{div}} \left(\tilde{\nu} \tilde{\nabla} D(\tilde{\rho}) \right) + F(\tilde{\rho}; \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}). \quad (6.5)$$

On définit les opérateurs sans dimension $\tilde{\mathbf{B}}$, \tilde{D} et \tilde{F} , respectivement associés aux opérateurs \mathbf{B} , D et F tels que:

$$\tilde{\mathbf{B}} = \frac{T}{L} \mathbf{B}, \quad \tilde{D} = \frac{T \nu_0}{L^2} D, \quad \tilde{F} = \frac{T}{\rho_0} F. \quad (6.6)$$

L'équation (6.5) devient:

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial \tilde{t}}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) + \tilde{\text{div}} \tilde{\mathbf{B}}(\tilde{\rho}) = \tilde{\text{div}} \left(\tilde{\nu} \tilde{\nabla} \tilde{D}(\tilde{\rho}) \right) + \tilde{F}(\tilde{\rho}; \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}). \quad (6.7)$$

Dans la suite on omettra les "tilde" afin d'alléger les notations.

2 Définition de la méthode

Pour approcher les solutions de l'équation (6.7), nous définissons la méthode de Boltzmann sur réseau $D2Q9$ basée sur l'équation de Boltzmann sur réseau suivante, $\forall j = 0, \dots, 8$:

$$\begin{aligned} g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) = & g_j(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} (g_j(\mathbf{x}, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) \\ & + \Delta t F_j(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right) F_j(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (6.8)$$

Les fonctions g_j et g_j^{eq} sont respectivement les fonctions de répartition et les fonctions d'équilibre, τ est le taux de relaxation et F_j est la discrétisation de l'opérateur F . On approche la quantité macroscopique ρ de l'équation (6.1) par:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=0}^8 g_j(\mathbf{x}, t) \quad (6.9)$$

Nous définissons la fonction de répartition d'équilibre telle que:

$$\begin{aligned} g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = & w_j \left(\rho(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{C_s^2} (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{B}(\rho)) \right. \\ & \left. + \frac{1}{2C_s^4} (\mathbf{C}(\rho) - C_s^2 \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{I}_d) : (\mathbf{e}_j \mathbf{e}_j - C_s^2 \mathbf{I}_d) \right). \end{aligned} \quad (6.10)$$

Avec $:$ le produit interne matriciel $A : B$ pour deux matrices $A = (a_{ij})_{i,j}$ et $B = (b_{ij})_{i,j}$ de taille

$m \times m$ défini par: $A : B = \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m a_{kl} b_{kl}$, et \mathbf{C} l'opérateur défini par:

$$\mathbf{C}(\rho) = \mathbf{C}_0(\rho) + \beta C_s^2 \rho \mathbf{I}_d, \quad (6.11)$$

où $\beta \in [0, 1[$ est un paramètre choisi, \mathbf{C}_0 est défini par $\mathbf{C}'_0(\rho) = \mathbf{B}'(\rho) \mathbf{B}'(\rho)$, avec: $(\mathbf{C}_0)'_{k,l} = B'_k B'_l$, et \mathbf{B}' est la dérivée de l'opérateur \mathbf{B} par rapport à ρ .

D'après la définition (6.10), et les propriétés (3.5), (3.6), (3.7) relatives aux vecteurs \mathbf{e}_j , nous obtenons les trois relations suivantes:

$$\sum_{j=0}^8 g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t), \quad (6.12)$$

$$\sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{B}(\rho), \quad (6.13)$$

et:

$$\sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{C}(\rho), \quad (6.14)$$

En effet, d'après (6.10) on en déduit que:

$$\sum_{j=0}^8 g_j^{eq} = a + \frac{b}{C_s^2} + \frac{c}{2C_s^4}, \quad (6.15)$$

où $a = \sum_{j=0}^8 w_j \rho = \rho$ (car $\sum_{j=0}^8 w_j = 1$), $b = \sum_{j=0}^8 w_j \mathbf{e}_j \cdot \mathbf{B}(\rho) = 0$ (d'après (3.5)) et

$c = (\mathbf{C}(\rho) - C_s^2 \rho \mathbf{I}_d) : \sum_{j=0}^8 w_j (\mathbf{e}_j \mathbf{e}_j - C_s^2 \mathbf{I}_d) = 0$ (d'après (3.7)).

On obtient ainsi: $\sum_{j=0}^8 g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t)$.

De la même façon, d'après (6.10) on a:

$$\sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j g_j^{eq} = a_1 + \frac{b_1}{C_s^2} + \frac{c_1}{2C_s^4}, \quad (6.16)$$

avec $a_1 = \sum_{j=0}^8 w_j \mathbf{e}_j \rho = 0$ (d'après (3.5)), $b_1 = \sum_{j=0}^8 w_j \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j \mathbf{B}(\rho) = C_s^2 \mathbf{B}(\rho)$ (d'après (3.7)), et

$c_1 = (\mathbf{C}(\rho) - C_s^2 \rho \mathbf{I}_d) : \sum_{j=0}^8 w_j \mathbf{e}_j (\mathbf{e}_j \mathbf{e}_j - C_s^2 \mathbf{I}_d) = 0$ (d'après (3.5) et (3.7)).

Par conséquent on a $\sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{B}(\rho)$.

Enfin d'après (6.10) on a:

$$\sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j g_j^{eq} = a_2 + \frac{b_2}{C_s^2} + \frac{c_2}{2C_s^4}, \quad (6.17)$$

avec $a_2 = \sum_{j=0}^8 w_j \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j \rho = C_s^2 \rho \mathbf{I}_d$ (d'après (3.7)), $b_2 = \sum_{j=0}^8 w_j \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{B}(\rho)) = 0$ (d'après (3.5) et (3.7)) et $c_2 = \sum_{j=0}^8 w_j \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j (\mathbf{C}(\rho) - C_s^2 \rho \mathbf{I}_d) : (\mathbf{e}_j \mathbf{e}_j - C_s^2 \mathbf{I}_d)$.

Pour calculer c_2 , nous définissons la matrice $\mathbf{A} = \mathbf{C}(\rho) - C_s^2 \rho \mathbf{I}_d = (a_{ij})_{i,j}$, et nous calculons ensuite le produit interne $\mathbf{A} : (\mathbf{e}_j \mathbf{e}_j - C_s^2 \mathbf{I}_d)$ à partir de la propriété (3.7) relative aux vecteurs \mathbf{e}_j :

$$\begin{aligned} \mathbf{A} : (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 - C_s^2 \mathbf{I}_d) &= \mathbf{A} : (\mathbf{e}_3 \mathbf{e}_3 - C_s^2 \mathbf{I}_d) = c^2 a_{11} - C_s^2 (a_{11} + a_{22}) \\ \mathbf{A} : (\mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2 - C_s^2 \mathbf{I}_d) &= \mathbf{A} : (\mathbf{e}_4 \mathbf{e}_4 - C_s^2 \mathbf{I}_d) = c^2 a_{22} - C_s^2 (a_{11} + a_{22}) \\ \mathbf{A} : (\mathbf{e}_5 \mathbf{e}_5 - C_s^2 \mathbf{I}_d) &= \mathbf{A} : (\mathbf{e}_7 \mathbf{e}_7 - C_s^2 \mathbf{I}_d) = c^2 (a_{11} + 2a_{12} + a_{22}) - C_s^2 (a_{11} + a_{22}) \\ \mathbf{A} : (\mathbf{e}_6 \mathbf{e}_6 - C_s^2 \mathbf{I}_d) &= \mathbf{A} : (\mathbf{e}_8 \mathbf{e}_8 - C_s^2 \mathbf{I}_d) = c^2 (a_{11} - 2a_{12} + a_{22}) - C_s^2 (a_{11} + a_{22}). \end{aligned} \quad (6.18)$$

Nous obtenons donc d'après (3.7) et (6.18):

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^8 w_j \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j \mathbf{A} : (\mathbf{e}_j \mathbf{e}_j - C_s^2 \mathbf{I}_d) &= \frac{c^2}{9} \left(2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} (c^2 a_{11} - C_s^2 (a_{11} + a_{22})) \right. \\ &\quad \left. + 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} (c^2 a_{22} - C_s^2 (a_{11} + a_{22})) \right) \\ &\quad + \frac{c^2}{36} \left(2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} (c^2 (a_{11} + 2a_{12} + a_{22}) - C_s^2 (a_{11} + a_{22})) \right) \\ &\quad \left. + \frac{c^2}{36} \left(2 \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} (c^2 (a_{11} - 2a_{12} + a_{22}) - C_s^2 (a_{11} + a_{22})) \right) \right) \end{aligned} \quad (6.19)$$

comme $c^2 = 3C_s^2$, on en déduit:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^8 w_j \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j \mathbf{A} : (\mathbf{e}_j \mathbf{e}_j - C_s^2 \mathbf{I}_d) &= \frac{C_s^2}{12} \begin{pmatrix} 8C_s^2 (a_{11} + a_{22}) & 24C_s^2 a_{12} \\ 24C_s^2 a_{12} & 8C_s^2 (a_{11} + a_{22}) \end{pmatrix} \\ &\quad + \frac{C_s^2}{3} \begin{pmatrix} 6C_s^2 a_{11} - 2C_s^2 (a_{11} + a_{22}) & 0 \\ 0 & 6C_s^2 a_{22} - 2C_s^2 (a_{11} + a_{22}) \end{pmatrix} \\ &= 2C_s^4 \mathbf{A} = 2C_s^4 (\mathbf{C}(\rho) - C_s^2 \rho \mathbf{I}_d) \end{aligned} \quad (6.20)$$

Ainsi $\sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{C}(\rho)$.

Nous définissons le taux de relaxation τ de cette méthode en fonction de $D'(\rho)$ (la dérivée de l'opérateur D par rapport à ρ). Nous notons pour cela que:

$$\operatorname{div}(\nu \nabla(D(\rho))) = \operatorname{div}(\nu D'(\rho) \nabla \rho) \quad (6.21)$$

On définit le taux de relaxation par:

$$\tau(\mathbf{x}, t) = \frac{\nu D'(\rho)}{\beta C_s^2 \Delta t} + \frac{1}{2} \quad (6.22)$$

Enfin, on approche le terme source $F(\rho; \mathbf{x}, t)$ selon la direction \mathbf{e}_j par:

$$F_j(\mathbf{x}, t) = w_j F(\rho; \mathbf{x}, t) \left(1 + \frac{\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{B}'(\rho)}{C_s^2} \right). \quad (6.23)$$

D'après la relation (3.7), nous déduisons les deux égalités suivantes:

$$\sum_{j=0}^8 F_j(\mathbf{x}, t) = F(\rho; \mathbf{x}, t) \text{ et } \sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j F_j(\mathbf{x}, t) = \mathbf{B}'(\rho) F(\rho; \mathbf{x}, t). \quad (6.24)$$

Remarque 6.1 .

Dans le cas particulier où $\mathbf{B} = 0$, la fonction d'équilibre peut être simplifiée :

$$g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_j \rho(\mathbf{x}, t) \left(1 - \frac{1}{2C_s^2} (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_j - 2C_s^2) \right). \quad (6.25)$$

Proposition 6.1 .

Si la fonction de répartition d'équilibre g_j^{eq} est définie par l'équation (6.10) satisfait les propriétés (6.12), (6.13) et (6.14), que le taux de relaxation τ satisfait (6.22), et que les termes sources F_j vérifient l'égalité (6.24), alors d'après le développement de Chapman-Enskog, la résolution de l'équation de Boltzmann sur réseau (6.8) permet de retrouver la quantité macroscopique ρ , solution de l'équation de réaction-diffusion (6.7) avec une erreur d'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$.

Proof. Pour démontrer cette proposition, nous allons détailler les différentes étapes du développement de Chapman-Enskog comme nous l'avons fait dans le Chapitre 3.

Afin d'approcher la quantité macroscopique ρ avec une erreur de l'ordre de $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$, nous définissons le développement de Chapman-Enskog suivant:

$$\begin{aligned} g_j &= g_j^{(0)} + \varepsilon g_j^{(1)} + \varepsilon^2 g_j^{(2)} + \mathcal{O}(\varepsilon^3), \\ F_j &= \varepsilon F_j^{(1)}, \\ \frac{\partial}{\partial t} &= \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2}, \\ \nabla &= \varepsilon \nabla_1, \end{aligned} \quad (6.26)$$

où les fonctions de répartitions $g_j^{(n)}$ vérifient l'équation (4.13) pour $n > 0$, et $g_j^{(0)} = g_j^{eq}$. A partir de ce développement, on définit les fonctions $\mathcal{P}_j^{(n)}$ pour $n = 0, 1, 2$ comme dans le Chapitre 4 vérifiant:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_j^{(0)} &= \frac{1}{\tau} \left(g_j^{(0)} - g_j^{eq} \right), \\
\mathcal{P}_j^{(1)} &= \left(\Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{eq} \right) + \frac{1}{\tau} g_j^{(1)} - \Delta t F_j^{(1)} \\
\mathcal{P}_j^{(2)} &= \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{(1)} + \left(\Delta t \frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 \right) g_j^{eq} \\
&\quad + \frac{1}{\tau} g_j^{(2)} - \frac{\Delta t^2}{2} \left(\mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 + \frac{\partial}{\partial t_1} \right) F_j^{(1)}.
\end{aligned} \tag{6.27}$$

Posons $\mathcal{P}^{(n)} = \sum_{j=0}^8 \mathcal{P}_j^{(n)}$, pour $n = 0, \dots, 2$ et $F^{(1)} = \sum_{j=0}^8 F_j^{(1)}$.

À l'ordre 1, d'après les relations (6.12), (6.13), et (4.13) et les propriétés (6.24), (6.26) on obtient par sommation:

$$\mathcal{P}^{(1)} = \Delta t \left(\frac{\partial \rho}{\partial t_1} + \operatorname{div}_1 \mathbf{B}(\rho) - F^{(1)}(\rho) \right). \tag{6.28}$$

Nous cherchons à présent à calculer la somme des fonctions $\mathcal{P}_j^{(2)}$. On utilise pour cela (6.12) et (4.13), et les propriétés (6.24) et (6.27) pour obtenir:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}^{(2)} &= \sum_{j=0}^8 \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{(1)} + \sum_{j=0}^8 \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 g_j^{eq} \\
&\quad + \Delta t \frac{\partial \rho}{\partial t_2} - \sum_{j=0}^8 \frac{\Delta t^2}{2} \left(\mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 + \frac{\partial}{\partial t_1} \right) F_j^{(1)}.
\end{aligned} \tag{6.29}$$

D'après la deuxième relation de (6.27) on en déduit:

$$\frac{\Delta t^2}{2} \sum_{j=0}^8 \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 g_j^{eq} = \frac{\Delta t}{2} \sum_{j=0}^8 \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) \left(-\frac{1}{\tau} g_j^{(1)} + \Delta t F_j^{(1)} \right). \tag{6.30}$$

On substitue alors les termes $\left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 g_j^{eq}$ dans l'équation (6.29). D'après (6.30), les termes $\frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) F_j^{(1)}$ présents dans (6.29) et (6.30) s'annulent, et nous pouvons réécrire $\mathcal{P}^{(2)}$ telle que:

$$\mathcal{P}^{(2)} = \Delta t \frac{\partial \rho}{\partial t_2} + \Delta t \sum_{j=0}^8 \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) \left(\left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) g_j^{(1)} \right). \tag{6.31}$$

Nous cherchons donc à calculer $\sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j g_j^{(1)}$. Nous repartons pour cela de l'expression (6.27) des

fonctions $\mathcal{P}_j^{(1)}$, et des propriétés de la fonction d'équilibre (6.12), (6.13) et (6.14) pour obtenir:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j g_j^{(1)} &= -\tau \Delta t \sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j \left(\left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{eq} - F_j^{(1)} \right) \\ &= -\tau \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t_1}(\rho) + \operatorname{div}_1(\mathbf{C}(\rho)) - \mathbf{B}'(\rho) F^{(1)}(\rho) \right) \end{aligned} \quad (6.32)$$

D'après l'expression de \mathbf{C} on en déduit:

$$\begin{aligned} \operatorname{div}_1(\mathbf{C}(\rho)) &= \operatorname{div}_1(\mathbf{C}_0(\rho) + \beta C_s^2 \rho \mathbf{I}_d) \\ &= \mathbf{C}'_0(\rho) \nabla_1 \rho + \beta C_s^2 \nabla_1 \rho \\ &= \mathbf{B}'(\rho) \mathbf{B}'(\rho) \nabla_1 \rho + \beta C_s^2 \nabla_1 \rho \\ &= \mathbf{B}'(\rho) \operatorname{div}_1 \mathbf{B}(\rho) + \beta C_s^2 \nabla_1 \rho. \end{aligned} \quad (6.33)$$

Nous pouvons ainsi factoriser une partie de la relation (6.32) par \mathbf{B}' pour obtenir (d'après (6.28)):

$$\begin{aligned} \sum_j \mathbf{e}_j g_j^{(1)} &= -\tau \Delta t \mathbf{B}'(\rho) \left(\frac{\partial \rho}{\partial t_1} + \operatorname{div}_1 \mathbf{B}(\rho) - F^{(1)}(\rho) \right) - \tau \Delta t \beta C_s^2 \nabla_1 \rho. \\ &= -\tau (\mathbf{B}'(\rho) \mathcal{P}^{(1)} + \Delta t \beta C_s^2 \nabla_1 \rho) \\ &= -\tau \Delta t \beta C_s^2 \nabla_1 \rho. \end{aligned} \quad (6.34)$$

Ainsi l'expression de $\mathcal{P}^{(2)}$ devient

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{(2)} &= \Delta t \frac{\partial \rho}{\partial t_2} + \Delta t \operatorname{div}_1 \sum_{j=0}^8 \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \mathbf{e}_j g_j^{(1)} \\ &= \Delta t \frac{\partial \rho}{\partial t_2} - \Delta t^2 C_s^2 \beta \operatorname{div}_1 \left(\left(\tau - \frac{1}{2} \right) \nabla_1 \rho \right). \end{aligned} \quad (6.35)$$

D'après l'expression (6.22) de τ , nous obtenons:

$$\mathcal{P}^{(2)} = \Delta t \frac{\partial \rho}{\partial t_2} - \Delta t \operatorname{div}_1 (\nu D'(\rho) \nabla_1 \rho). \quad (6.36)$$

En simplifiant par Δt les expressions (6.28) et (6.36) de $\mathcal{P}^{(1)}$ et $\mathcal{P}^{(2)}$ (avec une erreur d'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$) on en déduit:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^0 + \varepsilon \mathcal{P}^1 + \varepsilon^2 \mathcal{P}^2 &= \varepsilon \left(\frac{\partial \rho}{\partial t_1} + \operatorname{div}_1 \mathbf{B}(\rho) - F^{(1)} \right) + \varepsilon^2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial t_2} - \operatorname{div}_1 (\nu D'(\rho) \nabla_1 \rho) \right) \\ &= \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} \right) \rho + \varepsilon \operatorname{div}_1 \mathbf{B}(\rho) - \varepsilon F^{(1)} - \varepsilon^2 \operatorname{div}_1 (\nu D'(\rho) \nabla_1 \rho) \\ &= \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{B}(\rho) - \operatorname{div} (\nu D'(\rho) \nabla \rho) - F = 0. \end{aligned} \quad (6.37)$$

Ce qui complète la preuve. □

3 Applications

Pour mettre en application cette méthode, nous commençons par la valider en traitant un problème aux données connues. Nous l'appliquons ensuite à l'équation de Burger-Fisher (voir [64]). Celle-ci comporte un opérateur \mathbf{B} non linéaire, et apparait dans de nombreux domaines tels que la mécanique des fluides, la formation d'ondes de choc, la turbulence, la dynamique des gaz, la modélisation d'ondes acoustiques en milieu visqueux, ou encore pour la conduction de la chaleur (voir [130], [27], [99], [55], [49], [105]). Puis, nous traitons l'équation de conduction la chaleur non-linéaire traitée avec des données réalistes pour étudier le bon comportement de la méthode avec un opérateur D non-linéaire. Enfin, nous traitons un problème d'écoulement dans un milieu poreux. Ce dernier exemple nous permettra d'appliquer notre méthode à un problème dont le coefficient de diffusion ν est discontinu selon \mathbf{x} .

3.1 Benchmark et estimation numérique de l'erreur

Pour commencer, nous traitons l'équation suivante avec un domaine carré $\Omega = (-1; 1) \times (-1; 1)$, et $T > 0$. L'équation que nous traitons est définie pour tout $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T)$ par:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \operatorname{div} \mathbf{B}(\rho) = \operatorname{div}(\nu \nabla D(\rho)) + F(\rho; \mathbf{x}, t), \quad (6.38)$$

avec la condition initiale:

$$\rho(\mathbf{x}, 0) = 0, \quad (6.39)$$

et pour laquelle on impose des conditions de Neumann homogènes sur $\partial\Omega \times (0, T)$. Nous traitons ces conditions en utilisant l'équation (5.27) introduite dans le Chapitre 5.

L'opérateur \mathbf{B} associé au transport est défini par: $\mathbf{B}(\rho) = \begin{pmatrix} \rho(\mathbf{x}, t)^{\delta_1} \\ \rho(\mathbf{x}, t)^{\delta_1} \end{pmatrix}$, avec $\delta_1 > 0$. On définit l'opérateur D associé à la diffusion par: $D(\rho) = \rho(\mathbf{x}, t)^{\delta_2}$, avec $\delta_2 > 0$.

On choisit enfin l'opérateur F tel que la solution de l'équation (6.38), notée ρ_{sol} , soit définie par:

$$\rho_{sol}(x, y, t) = t \cos(\pi x) \cos(\pi y). \quad (6.40)$$

Estimation de l'ordre de convergence

Dans un premier temps, nous estimons l'ordre de convergence de la méthode. Pour cela, nous allons choisir $\delta_1 = \delta_2 = 1$, avec $\nu = 0.05$ afin de se rapprocher au plus d'un taux de relaxation $\tau = 1/2$. Cette valeur étant souvent critique pour la stabilité de la méthode, il est donc intéressant de s'assurer que même sous cette contrainte notre modèle reste stable. Comme le montre la figure 6.1, pour des pas entre $\Delta x = 1/16$ à $1/256$, et relativement aux erreurs relatives pour la norme $\|\cdot\|_{L^2(\Omega)}$, l'ordre de convergence obtenu est compris entre 1.4756 et 1.6534 pour $t = 0.5$ et entre 1.1521 et 1.4620 pour $t = 1$.

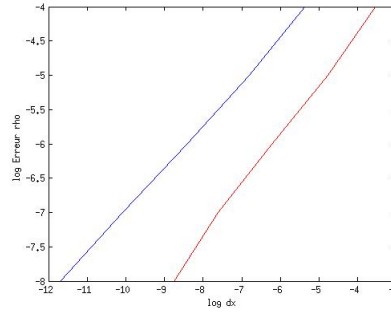


Figure 6.1: Log de l'erreur en espace, $t = 1$ en rouge et $t = 0.5$ en bleu, pentes de l'ordre de 1.5

Influence des paramètres

Dans un second temps, nous étudions l'influence des coefficient δ_1 , δ_2 et ν en fixant $\Delta x = 1/50$ et $\Delta t = \Delta x^2$, et en prenant successivement $t = 0.5$ et $t = 1$. Comme le montre le Tableau 6.1, les variations du paramètre δ_2 , lié à l'opérateur D , n'affectent que de manière négligeable l'erreur relative obtenue. A l'inverse, en augmentant le paramètre δ_1 , lié à l'opérateur \mathbf{B} , on voit l'erreur relative diminuer de manière significative pour $t = 1$. La partie portant sur le transport a donc plus d'impacte sur l'erreur que la partie diffusive pour des valeurs du coefficient de diffusion ν comprises entre 0.05 et 5. Les variations apportées sur le coefficient de diffusion ν portent également sur la partie diffusive et n'engendrent pas non plus de différences significatives. Cependant, ν entre aussi en jeu dans la construction du taux de relaxation τ , et l'erreur est plus petite quand ν est grand car τ est alors plus éloigné de la valeur critique $1/2$.

		$\nu=0.05$		$\nu=0.5$		$\nu=5$	
		t=0.5	t=1	t=0.5	t=1	t=0.5	t=1
$\delta_1 = 2$	$\delta_2 = 2$	0.0011	0.0062	9.1553×10^{-4}	0.0050	8.9854×10^{-4}	0.0044
	$\delta_2 = 4$	0.0011	0.0062	9.1435×10^{-4}	0.0050	8.7969×10^{-4}	0.0044
	$\delta_2 = 8$	0.0011	0.0062	9.1423×10^{-4}	0.0050	8.7934×10^{-4}	0.0044
	$\delta_2 = 16$	0.0011	0.0062	9.1420×10^{-4}	0.0050	8.7929×10^{-4}	0.0046
$\delta_2 = 2$	$\delta_1 = 4$	5.8438×10^{-4}	0.0044	3.1372×10^{-4}	0.0032	3.9048×10^{-4}	0.0029
	$\delta_1 = 8$	5.2484×10^{-4}	0.0035	2.2771×10^{-4}	0.0021	3.1992×10^{-4}	0.0021
	$\delta_1 = 16$	5.4174×10^{-4}	0.0030	2.5720×10^{-4}	0.0016	3.4242×10^{-4}	0.0017
	$\delta_1 = 32$	5.4295×10^{-4}	0.0027	2.5951×10^{-4}	0.0013	3.4433×10^{-4}	0.0016

Table 6.1: Evolution de l'erreur relative en fonction de δ_1 , δ_2 et ν pour $t = 0.5$ et $t = 1$.

3.2 Equation de Burger-Fisher

Dans cette seconde application, nous traitons l'équation de Burger-Fisher générale sur un domaine $\Omega = (-1; 1) \times (-1; 1)$, telle que pour tout $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T)$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \operatorname{div} \mathbf{B}(\rho) - b \Delta \rho(\mathbf{x}, t) = k \rho(\mathbf{x}, t) (1 - \rho(\mathbf{x}, t)^\delta), \quad (6.41)$$

où $\mathbf{B} = (a\rho^{\delta+1}, 0)$, avec $a, \delta > 0$ deux paramètres fixés.

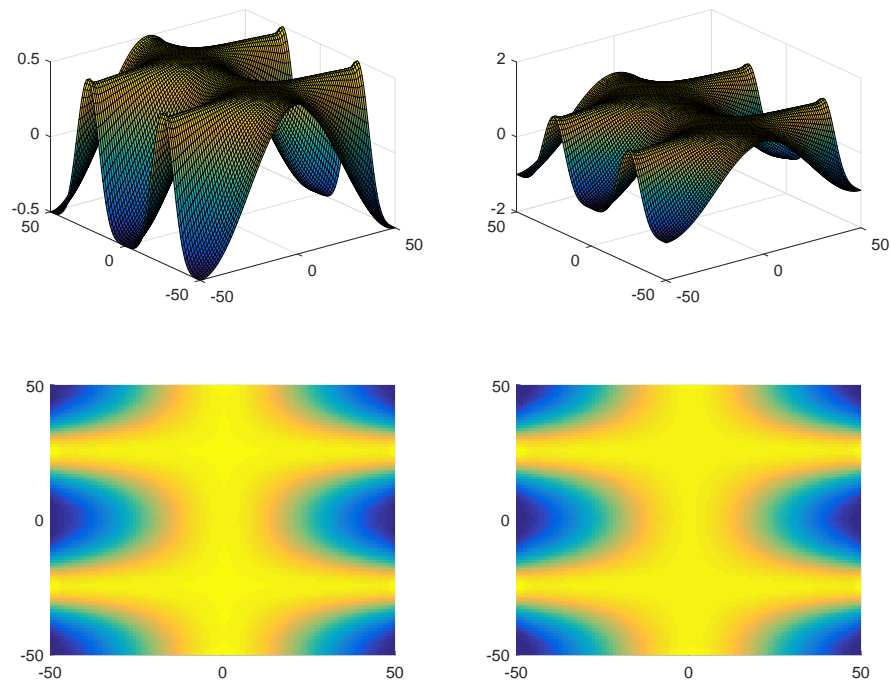


Figure 6.2: Courbe (haut) et vue de dessus (bas) de ρ pour $t = 0.5$ (gauche) et $t = 1$ (droite) avec $\Delta x = 1/100$, $\alpha_1 = \alpha_2 = 5$.

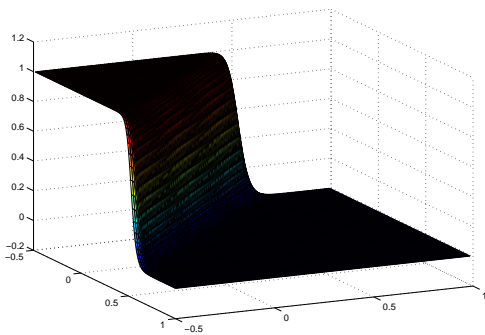


Figure 6.3: Courbe de ρ pour $t = 1$ avec $\Delta x = 1/50$, $\delta = 1.5$, $a = 4$, $b = 0.05$ et $k = 1$.

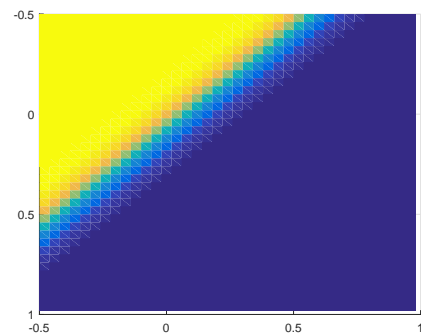


Figure 6.4: Vue de dessus de ρ pour $t = 1$ avec $\Delta x = 1/50$, $\delta = 1.5$, $a = 4$, $b = 0.05$ et $k = 1$.

Nous choisissons des conditions aux bords de Dirichlet telles que pour $\mathbf{x} \in \partial\Omega$:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_{sol}(\mathbf{x}, t), \quad (6.42)$$

que nous traitons en utilisant l'équation (5.27) introduite dans le Chapitre 5. On a enfin la condition initiale pour $t = 0$:

$$\rho(\mathbf{x}, 0) = \rho_{sol}(\mathbf{x}, 0). \quad (6.43)$$

La solution exacte de l'équation (6.41), notée ρ_{sol} , est définie par:

$$\rho_{sol}(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh(A(x + y - \omega t)) \right)^{1/\delta}, \quad (6.44)$$

où:

$$A = -\frac{a\delta}{4b(\delta + 1)} ; \quad \omega = \frac{a^2 + 2bk(\delta + 1)^2}{a(\delta + 1)}. \quad (6.45)$$

Les paramètres b et k sont des réels positifs choisis.

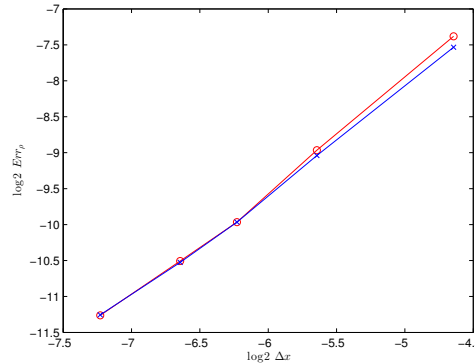


Figure 6.5: Relation entre l'erreur relative Err_ρ et le pas d'espace pour $t = 0.5$ (cercles) et pour $t = 1$ (croix), pentes de l'ordre de 1.5.

Estimation de l'ordre de convergence

Dans un premier temps, nous estimons l'ordre de convergence de la méthode appliquée à ce problème. Pour cela, nous choisissons les constantes $a = 4$, $b = 0.1$, $k = 1$ et $\delta = 1.5$. Comme le montre le Tableau 6.2, l'erreur relative évolue très peu pour des temps finaux $t = 0.5$ ou $t = 1$. Nous obtenons donc des erreurs relatives selon la norme $\|\cdot\|_{L^2(\Omega)}$ allant de 0.006 pour un pas d'espace $\Delta \mathbf{x} = 1/25$ à 4.0694×10^{-4} pour $\Delta \mathbf{x} = 1/150$. La relation entre le log de cette erreur et le log de la discrétisation donne une courbe de pente moyenne 1.47 pour $t = 0.5$ et 1.42 pour $t = 1$ (Figure 6.5). Ces erreurs sont essentiellement dues au changement d'état faisant passer ρ de 0 à 1 très brusquement (voir Figures 6.3-6.4). Ce changement d'état parcourt le domaine Ω au cours du temps (allant de $\mathbf{x} = (-0.5, -0.5)$ à $\mathbf{x} = (1, 1)$ en diagonale), et constitue la principale source potentielle d'erreurs et d'instabilités.

Δx	$t = 0.5$	$t = 1$
1/25	0.0060	0.0054
1/50	0.0020	0.0019
1/75	0.0010	0.0010
1/100	6.8706×10^{-4}	6.7848×10^{-4}
1/150	4.0694×10^{-4}	4.0894×10^{-4}

Table 6.2: Relation entre la discrétisation de la grille et l'erreur relative Err_ρ pour $\delta = 1.5$, pour $t = 0.5$ et $t = 1$.

Influence des paramètres

Nous effectuons finalement des simulations en faisant varier les paramètres δ , b , k et α , tout en choisissant les autres paramètres à une valeur par défaut ($\delta = 1.2$, $b = 0.01$, $k = 1$ et $\alpha = 4$), pour estimer leur influence sur la dynamique du système. Comme le montre les figures 6.6 et 6.7, les paramètres k et α influencent la vitesse de propagation du changement d'état. On voit ainsi que pour $\alpha = 16$ nous avons $\rho = 1$ sur l'ensemble du domaine, tandis que pour $\alpha = 4$ nous avons $\rho = 1$ sur la moitié du domaine. Le constat est le même avec k mais le phénomène est moins important avec les valeurs choisies. Le paramètre δ est choisi entre 1.5 et 3 et joue un rôle dans l'opérateur de transport \mathbf{B} et le second membre. On a ainsi (Figure 6.9) des courbures et des pentes différentes, avec un contour légèrement arrondi et un changement d'état plus net pour $\delta = 1.5$ que pour $\delta = 3$. Enfin, comme le montre la Figure 6.8, le paramètre b joue un rôle important sur la phase de transition entre $\rho = 1$ et $\rho = 0$. Le changement d'état est très net pour $b = 0.05$, tandis que la transition est progressive avec $b = 0.2$.

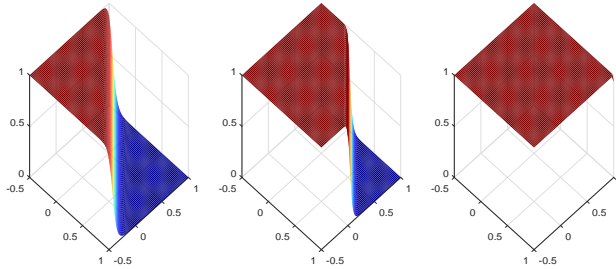


Figure 6.6: Evolution de la solution à $t = 0.5$ pour $\delta = 1.2$, $k = 1$, $b = 0.01$ pour $\alpha = 4$ (gauche), $\alpha = 8$ (centre) et $\alpha = 16$ (droite).

3.3 Equation de conduction de la chaleur non-linéaire

Nous nous penchons finalement sur l'équation de la chaleur non linéaire dans $\Omega = (0; 1) \times (0; 1)$. L'application précédente permettait d'étudier un cas aux données réalistes concernant un opérateur \mathbf{B} non-linéaire. Nous étudions maintenant un cas où l'opérateur D est non-linéaire. Nous choisissons pour cela l'équation pour $(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{Q}$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}, t) - b \Delta \rho(\mathbf{x}, t)^\delta = \rho(\mathbf{x}, t)(1 - \rho(\mathbf{x}, t)^{\delta-1}), \quad (6.46)$$

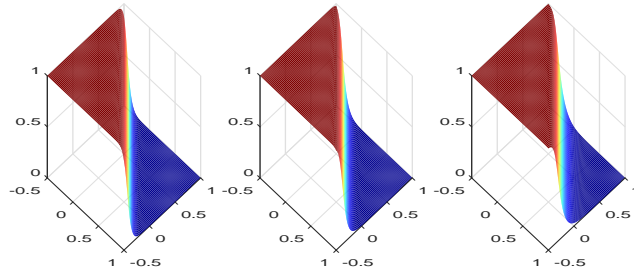


Figure 6.7: Evolution de la solution à $t = 0.5$ pour $\delta = 1.2$, $b = 0.01$, $\alpha = 4$ pour $k = 1$ (gauche), $k = 2$ (centre) et $k = 3$ (droite).

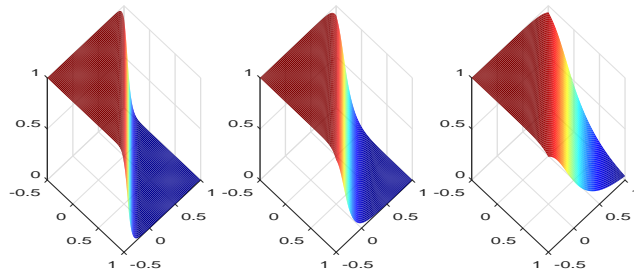


Figure 6.8: Evolution de la solution à $t = 0.5$ pour $\delta = 1.2$, $k = 1$, $\alpha = 4$ pour $b = 0.05$ (gauche), $b = 0.1$ (centre) et $b = 0.2$ (droite).

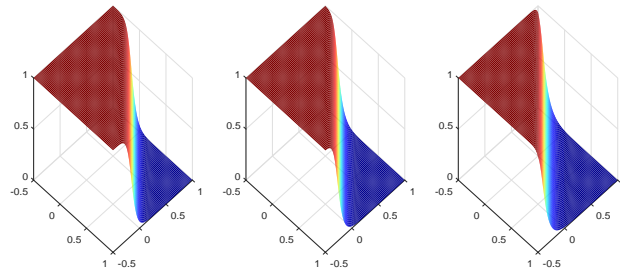


Figure 6.9: Evolution de la solution à $t = 0.5$ pour $\alpha = 4$, $k = 1$, $b = 0.01$ pour $\delta = 1.5$ (gauche), $\delta = 2$ (centre) et $\delta = 3$ (droite).

avec des conditions aux bords de Dirichlet pour $\mathbf{x} \in \partial\Omega$:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_{sol}(\mathbf{x}, t), \quad (6.47)$$

que l'on traite en utilisant l'équation (5.27) introduite dans le Chapitre 5. On a enfin la condition initiale:

$$\rho(\mathbf{x}, 0) = \rho_{sol}(\mathbf{x}, 0). \quad (6.48)$$

La solution exacte de l'équation (6.46), notée ρ_{sol} , est définie par:

$$\rho_{sol}(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \tanh(A(x + y - \omega t)) \right)^{-1/(\delta-1)}, \quad (6.49)$$

où:

$$A = -\frac{\delta - 1}{2\delta\sqrt{2b}}; \quad \omega = \sqrt{2b}. \quad (6.50)$$

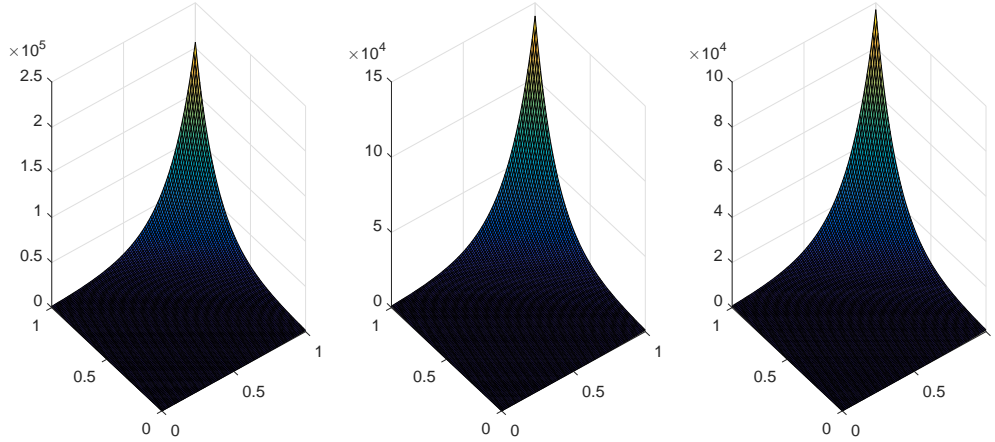


Figure 6.10: Evolution de la solution pour $\delta = 1.2$, $b = 0.01$ pour $t = 0$ (gauche), $t = 0.5$ (centre) et $t = 1$ (droite).

Estimation de l'ordre de convergence

Nous commençons par étudier l'ordre de convergence de cette méthode avec $b = 0.01$ et $\delta = 1.2$ (Figure 6.10.) Pour cela, nous relevons l'erreur relative pour $t = 0.5$ et pour $t = 1$ pour des discrétisations allant de $\Delta \mathbf{x} = 1/25$ à $\Delta \mathbf{x} = 1/200$. Comme nous le montre le Tableau 6.3, nous obtenons des erreurs légèrement plus importantes que dans l'exemple précédent. Cela s'explique par des variations beaucoup plus importantes de la fonction ρ . Cette erreur reste cependant petite, et n'évolue que de manière négligeable au cours du temps. On a finalement le rapport entre le log de la discrétisation et le log de l'erreur relative (voir Figure 6.11) dont la pente est en moyenne de 0.8445 pour $t = 0.5$ et 0.8512 pour $t = 1$. Ce résultat s'explique une fois encore par la nature de l'exemple traité, avec des données subissant d'importants changements d'ordre de grandeur.

Influence des paramètres

Nous effectuons à présent des simulations avec différentes valeurs de δ et de b afin d'étudier leur influence sur le système. Comme le montre les Figures 6.12 et 6.12, choisir des valeurs de δ et de b plus grandes accélèrent la vitesse à laquelle la solution ρ décroît.

Enfin, nous perturbons le terme source $F(\rho) = \rho(\mathbf{x}, t)(1 - \rho(\mathbf{x}, t)^{\delta-1})$ en prenant $\delta = 1.2$. Comme le montre le Tableau 6.4, l'impact des perturbations P_ρ est négligeable lorsque celles-ci n'excèdent pas 15%. En effet, cette perturbation générée aléatoirement peut même diminuer

Δx	$t = 0.5$	$t = 1$
1/25	0.0232	0.0266
1/50	0.0140	0.0160
1/75	0.0099	0.0113
1/100	0.0077	0.0088
1/150	0.0053	0.0060
1/200	0.0040	0.0046

Table 6.3: Relation entre la discrétisation de la grille et l'erreur relative Err_ρ avec $\delta = 1.2$.

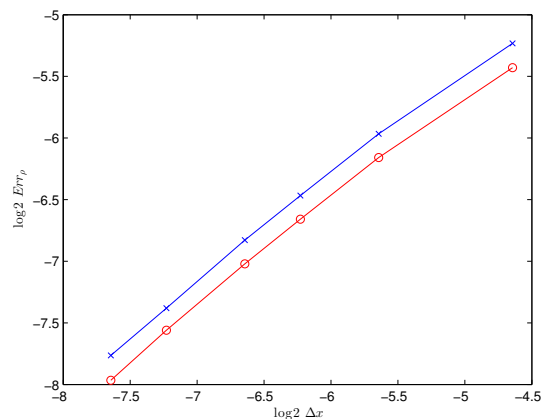


Figure 6.11: Relation entre l'erreur relative Err_ρ et le pas d'espace pour $t = 0.5$ (cercles) et $t = 1$ (croix), pentes de l'ordre de 1.

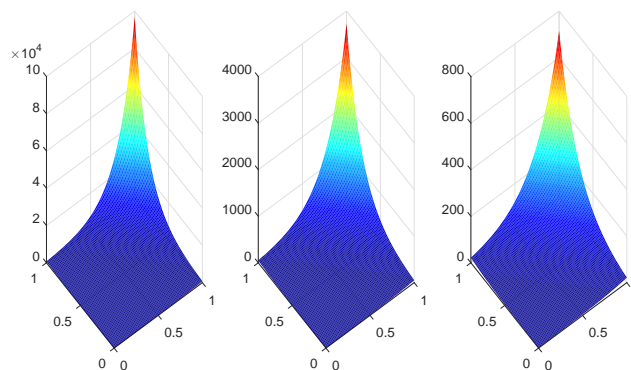


Figure 6.12: Evolution de la solution à $t = 1$ pour $b = 0.01$, avec $\delta = 1.2$ (gauche), $\delta = 1.6$ (centre) et $\delta = 2$ (droite).

l'erreur si les faibles perturbations rapprochent l'approximation ρ de la solution exacte. Par ailleurs, nous constatons que pour des perturbations importantes (30% et plus), l'erreur engendrée est proportionnelle au pourcentage de perturbation introduit dans le système, sans que cela n'engendre d'instabilité.

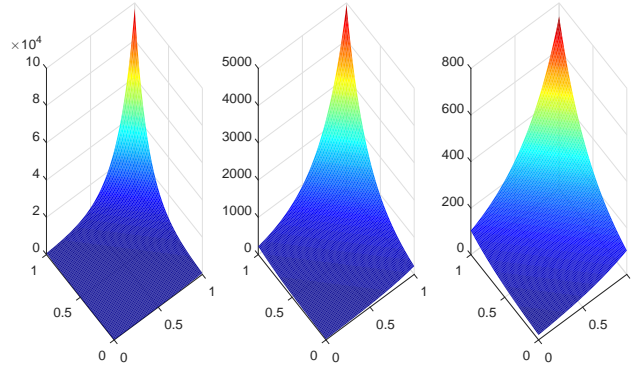


Figure 6.13: Evolution de la solution à $t = 1$ pour $\delta = 1.2$, avec $b = 0.01$ (gauche), $b = 0.02$ (centre) et $b = 0.04$ (droite).

P_ρ (en %)	$\Delta x = 1/50$	$\Delta x = 1/100$
0	0.0160	0.0088
5	0.0126	0.0063
10	0.0113	0.0088
15	0.0127	0.0137
30	0.0245	0.0298
50	0.0428	0.0503
100	0.0843	0.0950

Table 6.4: Impacte de la perturbation P_ρ (en %) sur l'erreur relative Err_ρ à $t = 1$.

3.4 Écoulements dans un milieu poreux

Dans cette dernière application, nous nous intéressons à la simulation d'un écoulement en milieux poreux, et en particulier à un cas comportant une forte discontinuité au niveau de son coefficient de diffusion. Ce travail a été réalisé dans le cadre d'une présentation donnée lors de la 4e École EGRIN (23-26 mai 2016). Dans ce cadre, nous étudions un système portant sur le débit d'un fluide soumis à une loi de Darcy. Ce système comporte une première équation relative à la divergence de la vitesse \mathbf{U} , une seconde exprimant la loi de Darcy en fonction du gradient hydraulique ∇p , et une équation de type convection-diffusion. L'existence et unicité d'un tel système a été montré par Feng X. 1995 [62]. Enfin, nous considérons $\Omega \in \mathbb{R}^2$ une tranche du sous-sol de bord $\partial\Omega$, tel que pour tout $(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{Q}$:

$$\begin{aligned}
 \operatorname{div}(\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)) &= q^+(\mathbf{x}) - q^-(\mathbf{x}), \\
 \mathbf{U}(\mathbf{x}, t) &= -\frac{K(\mathbf{x})}{\mu(\rho)} \nabla p(\mathbf{x}, t), \\
 \phi(\mathbf{x}) \frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}, t) - \operatorname{div}(D(\mathbf{U}; \mathbf{x}) \nabla \rho(\mathbf{x}, t)) + \operatorname{div}(\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{U}(\mathbf{x}, t)) &= H(\rho),
 \end{aligned} \tag{6.51}$$

où ρ est la densité de fluide, p la pression, K le tenseur de conductivité hydraulique, D le tenseur de dispersion, ϕ un coefficient de porosité, μ la viscosité du fluide, et q^+, q^-, H des termes sources.

On choisit les conditions aux bords de Neumann ($\mathbf{x} \in \partial\Omega$):

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}, t) = 0 \text{ et } D(\mathbf{U}; \mathbf{x}) \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (6.52)$$

que nous traitons en utilisant l'équation (5.27) introduite dans le Chapitre 5. On a enfin les conditions initiales:

$$\rho(\mathbf{x}, 0) = \rho^0(\mathbf{x}) \text{ et } \mathbf{U}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{U}^0(\mathbf{x}). \quad (6.53)$$

On définit l'opérateur H par:

$$H(\rho) = -q^- \rho + q^+ \hat{\rho}, \quad (6.54)$$

où $\hat{\rho}$ est une densité caractéristique et les fonctions sources q^- , q^+ et la pression p respectent la condition de compatibilité presque partout $t > 0$:

$$\int_{\Omega} p(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = 0, \quad \int_{\Omega} q^+(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} q^-(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

On définit l'opérateur D selon le modèle statistique développé par Bear en 1961 (voir [8], [9]) servant à modéliser les phénomènes de dispersion-diffusion par:

$$D(\mathbf{U}; \mathbf{x}) = (\phi(\mathbf{x})D_m + \phi(\mathbf{x})D_t|\mathbf{U}(\mathbf{x})|)\mathbf{I}_d + \frac{\phi(\mathbf{x})}{|\mathbf{U}(\mathbf{x})|}(D_l - D_t)(U_i(\mathbf{x})U_j(\mathbf{x}))_{1 \leq i, j \leq d},$$

où D_m est le coefficient de dispersion moléculaire, D_l le coefficient de dispersion longitudinal, et D_t le coefficient de dispersion transversal, tels que $D_l \geq D_t > 0$ et $D_m > 0$.

Pour cette application, on choisit $\Omega = (-500, 500) \times (-500, 500)$, $t = 0.2$, $\Delta t = \mathcal{O}(\Delta \mathbf{x}^2)$, avec une porosité et une viscosité constantes: $\phi(\mathbf{x}) = 1$, $\mu(\rho) = 0.01$. On choisit des coefficients de dispersions constants tels que: $D_m = 1$, $D_t = 0.5$, $D_l = 5$, et on définit la pression p et le tenseur de conductivité hydraulique K par:

$$p(\mathbf{x}) = \cos(x\pi/500) \cos(-y\pi/500), \quad K(\mathbf{x}) = \begin{cases} 5 \text{ si } x < 0, \\ 1 \text{ sinon.} \end{cases} \quad (6.55)$$

On en déduit la vitesse \mathbf{U} (Figure 6.17):

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \frac{\pi K(\mathbf{x})}{5} \begin{pmatrix} \sin(x\pi/500) \cos(-y\pi/500) \\ -\cos(x\pi/500) \sin(-y\pi/500) \end{pmatrix}.$$

On choisit le terme source $F(\rho)$ tel que la solution ρ_{sol} de notre système soit:

$$\rho_{sol}(\mathbf{x}, t) = tK(\mathbf{x}) \left(\left(\frac{x^3}{3 \times 500^2} - x \right) \frac{1}{500} + \left(\frac{y^3}{3 \times 500^2} - y \right) \frac{1}{500} \right)$$

Comme le montre le Tableau 6.5 et la Figure 6.14, nous obtenons des erreurs à $t = 0.2$ d'ordre de grandeur comparables à celle obtenues dans l'exemple précédent à $t = 0.5$ (Tableau 6.3), avec une convergence en espace d'ordre 1. Celles-ci sont cependant légèrement plus importantes à cause de la discontinuité induite par la définition de la conductivité hydraulique K (equation (6.55)). Notre

Δx	Err_ρ
1/25	0.0351
1/50	0.0155
1/75	0.0117
1/100	0.0081
1/150	0.0057
1/200	0.0046

Table 6.5: Relation entre la discrétisation de la grille et l'erreur relative Err_ρ avec $t = 0.2$.

approximation de ρ est donc satisfaisante (voir Figures 6.15-6.16), la méthode reste toutefois stable, et l'erreur engendrée est négligeable.

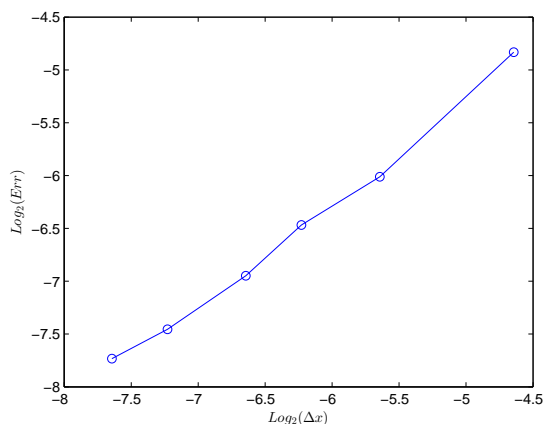


Figure 6.14: Relation entre l'erreur relative Err_ρ et le pas d'espace, pente de l'ordre de 1.

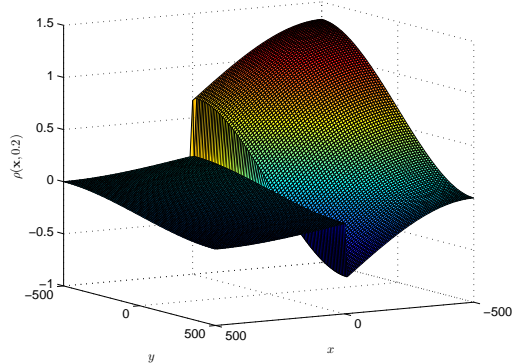


Figure 6.15: Représentation de ρ dans Ω pour $t = 0.2$.

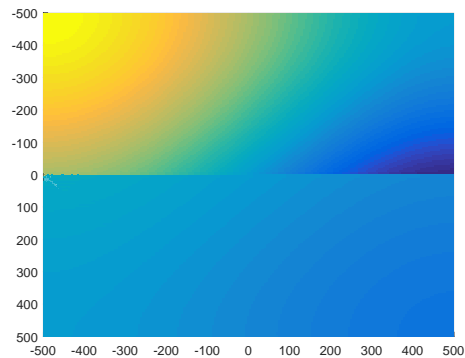


Figure 6.16: Vue de dessus de ρ dans Ω pour $t = 0.2$.

Conclusion

A travers ces applications, nous avons validé la LBM que nous avons défini pour traiter des équations de réaction-diffusion non-linéaires. Le premier exemple nous a permis de valider la méthode pour des opérateurs \mathbf{B} et D non-linéaires, puis nous avons appliqué la méthode à des problèmes

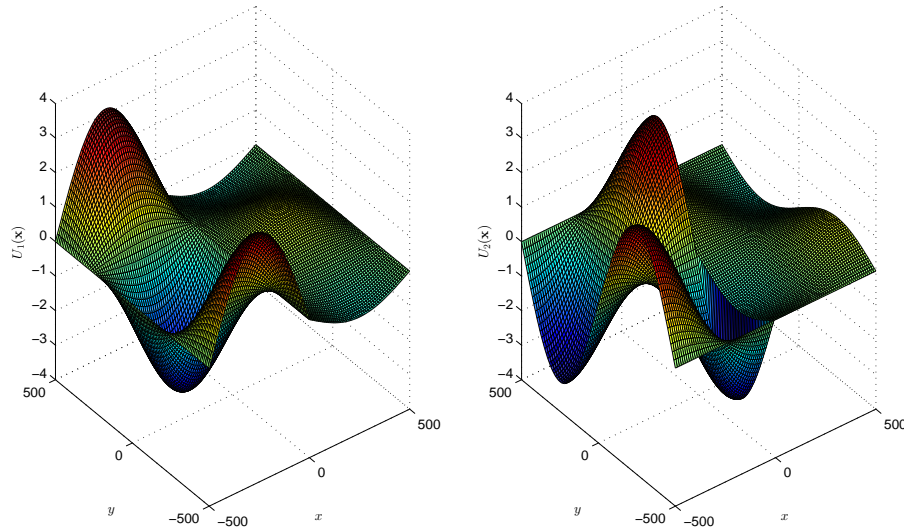


Figure 6.17: Vitesse $\mathbf{U} = (u, v)$, avec u à gauche et v à droite.

réalistes, via l'équation de Burger-Fisher, l'équation de conduction de la chaleur, ou la simulation d'un écoulement de fluides en milieu poreux. Nous avons donc pu valider la méthode avec des applications variées, des opérateurs non-linéaires, un coefficient de diffusion discontinu, et des termes sources perturbés. Nous obtenons des ordres de convergence en espace de l'ordre de 1 à 1.5 selon les cas traités, ce qui correspond à nos attentes.

7 Méthode de Boltzmann pour des équations de type elliptique

Nous nous intéressons maintenant à la construction d'une méthode de Boltzmann sur réseau pour la résolution d'équations de type elliptique dépendant du temps. Ce type d'équation doit être traité de manière différente des équations différentielles paraboliques évolutives en temps étudiées précédemment. Comme les équations elliptiques ne présentent pas de terme différentiel en temps, nous proposons une construction alternative dans le but de ne pas faire apparaître cette dérivée en temps dans le développement de Chapman-Enskog, inspirée de la méthode proposée dans [38].

1 Définition du problème

Nous considérons des équations elliptiques pour $(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{Q}$ de la forme:

$$-\operatorname{div}(\nu(\mathbf{x}, t)\nabla D(\rho)) = F(\rho; \mathbf{x}, t), \quad (7.1)$$

où le coefficient de diffusion ν , l'opérateur de diffusion D et l'opérateur F sont supposés connus, et bien définis pour les problèmes que nous traitons par la suite. De plus, ρ respecte la conditions aux bords de type Robin suivante, pour $\mathbf{x} \in \partial\Omega$:

$$\alpha_1\rho(\mathbf{x}, t) + \alpha_2\frac{\partial\rho}{\partial\mathbf{n}}(\mathbf{x}, t) = F_\rho(\mathbf{x}, t), \quad (7.2)$$

où F_ρ est une fonction connue, et $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}$.

Comme dans les cas précédents, la construction de la méthode et le développement de Chapman-Enskog seront effectués à partir de la formulation adimensionnelle de l'équation (7.1). Nous reprenons donc les variables définies par les équations (4.3), (4.4) et (4.5) dans la section 1 du chapitre 4 pour obtenir:

$$-\tilde{\operatorname{div}}\left(\tilde{\nu}\tilde{\nabla}D(\tilde{\rho})\right) = \tilde{F}(\tilde{\rho}; \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}), \quad (7.3)$$

avec le coefficient de diffusion adimensionnel $\tilde{\nu} = \frac{\nu}{\nu_0}$ et le terme source adimensionnel $\tilde{F} = \frac{L^2}{\nu_0}F$.

Dans la suite on omettra les "tilde" afin d'alléger les notations.

2 Définition de la méthode

Pour résoudre cette équation à un temps t fixé, nous utilisons une variable de pseudo-temps r associée à un pas Δr . On définit alors l'équation de Boltzmann discrétisée suivante:

$$g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta r, r + \Delta r; t) = g_j(\mathbf{x}, r; t) - \frac{1}{\tau} (g_j(\mathbf{x}, r; t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}, r; t)) + \Delta r F_j(\mathbf{x}, r; t), \quad (7.4)$$

où F_j est la discrétisation de l'opérateur F dans la direction \mathbf{e}_j . L'approximation $\bar{\rho}$ de la quantité macroscopique ρ solution de l'équation (7.3) s'obtient via les sommations:

$$\bar{\rho}(\mathbf{x}, r; t) = \frac{1}{1 - w_0} \sum_{i=1}^8 g_i(\mathbf{x}, r; t). \quad (7.5)$$

La méthode de Boltzmann est à nouveau construite en fonction du développement de Chapman-Enskog. Seulement, comme nous l'avons vu dans les cas précédents, la propriété de la fonction d'équilibre $\sum_{j=0}^8 g_j^{eq} = \bar{\rho}$ fait naturellement apparaître une dérivée temporelle lors des sommations sur les fonctions $\mathcal{P}_j^{(1)}$ et $\mathcal{P}_j^{(2)}$. Pour ne pas faire apparaître ces dérivées, nous devons définir les fonctions d'équilibre telles que $\sum_{j=0}^8 g_j^{eq} = 0$. Cependant, cela ne doit pas influencer les propriétés de sommation selon \mathbf{e}_j et $\mathbf{e}_j \mathbf{e}_j$ permettant de retrouver les termes associés au transport ou à la diffusion. On définit donc les fonctions d'équilibre par:

$$g_j^{eq}(\mathbf{x}, r; t) = \begin{cases} w_j \bar{\rho}(\mathbf{x}, r; t), & \text{si } j \neq 0 \\ (w_0 - 1) \bar{\rho}(\mathbf{x}, r; t) & \text{si } j = 0 \end{cases}$$

D'après la définition des fonctions d'équilibre (7.6), et les propriétés (3.5), (3.6), (3.7) relatives aux vecteurs \mathbf{e}_j , nous obtenons les trois relations suivantes:

$$\sum_{j=0}^8 g_j^{eq}(\mathbf{x}, r; t) = 0, \quad (7.6)$$

$$\sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j g_j^{eq}(\mathbf{x}, r; t) = 0, \quad (7.7)$$

$$\sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j g_j^{eq}(\mathbf{x}, r; t) = C_s^2 \bar{\rho}(\mathbf{x}, r; t) \mathbf{I}_d. \quad (7.8)$$

Par ailleurs, l'équation (7.5) est aussi valable avec les fonctions d'équilibre:

$$\bar{\rho}(\mathbf{x}, r; t) = \frac{1}{1 - w_0} \sum_{i=1}^8 g_i^{eq}(\mathbf{x}, r; t). \quad (7.9)$$

Remarque 7.1 .

Dans ce chapitre nous traitons des équations ne faisant pas intervenir d'opérateur de transport

$\mathbf{B}(\bar{\rho})$, mais il est possible de définir des fonctions d'équilibres de la même manière que pour le cas d'équations de réaction-diffusion (6.10) sans que cela n'affecte les sommes sur la fonction d'équilibre (7.9). En effet, seul g_0 est traité séparément, et cette direction est associée à la vitesse nulle $\mathbf{e}_0 = (0,0)^T$. Seule la sommation permettant de retrouver ρ est donc influencée par ce changement.

L'opérateur $\bar{F}(\rho; \mathbf{x}, r, t)$ est approché selon la direction \mathbf{e}_j par:

$$F_j(\mathbf{x}, r; t) = w_j \bar{F}(\rho; \mathbf{x}, r, t). \quad (7.10)$$

On en déduit que:

$$\sum_{j=0}^8 F_j(\mathbf{x}, r; t) = \bar{F}(\rho; \mathbf{x}, r, t) \text{ et } \sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j F_j(\mathbf{x}, r; t) = 0. \quad (7.11)$$

Enfin, le taux de relaxation τ est défini par:

$$\tau(\mathbf{x}, r; t) = \frac{\nu(\mathbf{x}, r; t) D'(\rho)}{\Delta r C_s^2} + \frac{1}{2}, \quad (7.12)$$

où $D'(\rho)$ est la dérivée de l'opérateur D par rapport à ρ . Les fonctions associées à la variable r induisent des sous-routine à chaque instant t pour approcher les convergences:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \bar{\rho}(\mathbf{x}, r; t) = \rho(\mathbf{x}, t) \text{ et } \lim_{r \rightarrow \infty} \bar{F}(\rho; \mathbf{x}, r, t) = F(\rho; \mathbf{x}, t). \quad (7.13)$$

Proposition 7.1 .

Si la fonction de répartition d'équilibre g_j^{eq} est définie par l'équation (7.6) satisfait les propriétés (7.6), (7.7) et (7.8) , que le taux de relaxation τ satisfait l'équation (7.12), et que les termes sources F_j vérifient (7.11), alors d'après le développement de Chapman-Enskog, la résolution de l'équation de Boltzmann sur réseau (7.4) permet de retrouver la quantité macroscopique ρ , solution de l'équation elliptique (7.3) avec une erreur d'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$.

Proof. Nous choisissons le développement de Chapman-Enskog suivant:

$$\begin{aligned} g_j &= g_j^{(0)} + \varepsilon g_j^{(1)} + \varepsilon^2 g_j^{(2)} + \mathcal{O}(\varepsilon^3), \\ F_j &= \varepsilon^2 F_j^{(2)}, \\ \frac{\partial}{\partial t} &= \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} \text{ et } \nabla = \varepsilon \nabla_1. \end{aligned} \quad (7.14)$$

où les fonctions de répartitions $g_j^{(n)}$ vérifient l'équation (4.13) pour $n > 0$, et $g_j^{(0)} = g_j^{eq}$. A partir de ce développement, on définit les fonctions $\mathcal{P}_j^{(n)}$ pour $n = 0, 1, 2$ comme dans le Chapitre 4,

vérifiant:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_j^{(0)} &= \frac{1}{\tau} \left(g_j^{(0)} - g_j^{eq} \right), \\
\mathcal{P}_j^{(1)} &= \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{eq} + \frac{1}{\Delta r \tau} g_j^{(1)}, \\
\mathcal{P}_j^{(2)} &= \left(\frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\Delta r}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 \right) g_j^{eq} \\
&\quad + \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{(1)} - \frac{1}{\Delta r \tau} g_j^{(2)} - F_j^{(2)}.
\end{aligned} \tag{7.15}$$

Nous allons donc exprimer les fonctions $\mathcal{P}^{(n)}$ définies par $\mathcal{P}^{(n)} = \sum_{j=0}^8 \mathcal{P}_j^{(n)}$, pour $n = 0, \dots, 2$. A l'ordre 1, nous avons d'après (4.12), (7.6), (7.7) et (7.11):

$$\mathcal{P}^{(1)} = \sum_{j=0}^8 \left(\left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{eq} + \frac{1}{\Delta r \tau} g_j^{(1)} \right). \tag{7.16}$$

A l'ordre 2 nous avons:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}^{(2)} &= \sum_{j=0}^8 \left(\frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\Delta r}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 \right) g_j^{eq} \\
&\quad + \sum_{j=0}^8 \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{(1)} - \sum_{j=0}^8 \frac{1}{\Delta r \tau} g_j^{(2)} - F^{(2)}.
\end{aligned} \tag{7.17}$$

D'après les propriétés (7.6), (7.7) et (7.8) relatives aux fonctions d'équilibres, nous obtenons:

$$\begin{aligned}
\sum_{j=0}^8 \left(\frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\Delta r}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 \right) g_j^{eq} &= \sum_{j=0}^8 (\mathbf{e}_j \cdot \nabla_1)^2 g_j^{eq} \\
&= \frac{\Delta r}{2} C_s^2 \Delta_1 \bar{\rho}.
\end{aligned} \tag{7.18}$$

Ainsi, l'expression de la fonction $\mathcal{P}^{(2)}$ devient:

$$\mathcal{P}^{(2)} = \operatorname{div}_1 \sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j g_j^{(1)} + \frac{\Delta r}{2} C_s^2 \Delta_1 \bar{\rho} - F^{(2)}. \tag{7.19}$$

Il faut donc exprimer la somme des termes $\mathbf{e}_j g_j^{(1)}$. Pour cela nous utilisons l'expression (7.16) de $\mathcal{P}_j^{(1)}$ pour obtenir (d'après (7.7) et (7.8)):

$$\begin{aligned}
\sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j g_j^{(1)} &= -\tau \Delta r \sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{eq} \\
&= -\tau \Delta r C_s^2 \nabla_1 \bar{\rho}.
\end{aligned} \tag{7.20}$$

Ainsi

$$\begin{aligned}\mathcal{P}^{(2)} &= \operatorname{div}_1 \left(-\tau \Delta r C_s^2 \nabla_1 \bar{\rho} \right) + \frac{\Delta r}{2} C_s^2 \Delta_1 \bar{\rho} - F^{(2)} \\ &= \operatorname{div}_1 \left(\Delta r C_s^2 \left(\frac{1}{2} - \tau \right) \nabla_1 \bar{\rho} \right) - F^{(2)}.\end{aligned}\tag{7.21}$$

D'après (7.11) et (7.12), nous obtenons finalement avec une erreur d'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$:

$$\begin{aligned}\mathcal{P}^{(0)} + \varepsilon \mathcal{P}^{(1)} + \varepsilon^2 \mathcal{P}^{(2)} &= -\varepsilon \bar{F}^{(1)} + \varepsilon^2 \left(-\operatorname{div}_1 (\nu \nabla_1 D(\bar{\rho})) \right) \\ &= -\operatorname{div} (\nu \nabla D(\bar{\rho})) - \bar{F} \\ &= 0.\end{aligned}\tag{7.22}$$

Par passage à la limite en r on en déduit formellement :

$$0 = \lim_{r \rightarrow \infty} \left(-\operatorname{div} (\nu \nabla D(\bar{\rho})) - \bar{F} \right) = -\operatorname{div} (\nu \nabla D(\rho)) - F.\tag{7.23}$$

Cette dernière équation est équivalente à $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$ près à l'équation elliptique (7.1). \square

3 Applications

Pour mettre en application cette méthode de Boltzmann nous allons traiter trois équations elliptiques aux solutions et aux données connues. Dans un premier temps nous considérons un problème unidimensionnel de solution exponentielle, où l'on impose des conditions aux bords de Neumann non homogènes. Puis, nous traitons un cas bidimensionnel où nous imposons des conditions aux bords de Neumann homogènes. Une fois la méthode validée, nous l'appliquons à l'équation de Helmholtz homogène.

Pour ces simulations, nous introduisons un critère d'arrêt :

$$C_\rho = \frac{\|\rho(\mathbf{x}, r) - \rho(\mathbf{x}, r - \Delta r)\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}}{\|\rho(\mathbf{x}, r - \Delta r)\|_{\mathcal{L}^2(\Omega)}}.\tag{7.24}$$

On décide ainsi d'arrêter notre algorithme une fois que celui-ci est inférieure à un seuil choisi (dépendant du pas d'espace $\Delta \mathbf{x}$ ou d'une constante arbitraire). On considère à ce moment que les fonctions de répartition particulières ont atteint un état d'équilibre et que la méthode a convergé vers la solution avec une erreur tolérable. Bien entendu, il est également possible de poursuivre les itérations jusqu'à un temps r jugé suffisamment grand pour considérer que le système a atteint son état d'équilibre.

3.1 Benchmarks et estimation numérique de l'erreur

Premier application

Dans ce premier exemple, nous choisissons un domaine $\Omega = (-1; 1) \times (-1; 1)$, et nous traitons l'équation elliptique définie pour tout $\mathbf{x} \in \Omega$:

$$\Delta \rho(x, y) = \exp(x).\tag{7.25}$$

Nous choisissons de traiter des conditions de Neumann pour $\mathbf{x} \in \partial\Omega$, telles que:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}) = \exp(x), \quad (7.26)$$

que nous traitons en utilisant l'équation (5.27) introduite dans le Chapitre 5. On définit la solution de l'équation (7.25), notée ρ_{sol} , par:

$$\rho_{sol}(x, y) = \exp(x). \quad (7.27)$$

Ce premier exemple nous permet de valider notre méthode pour une solution exponentielle

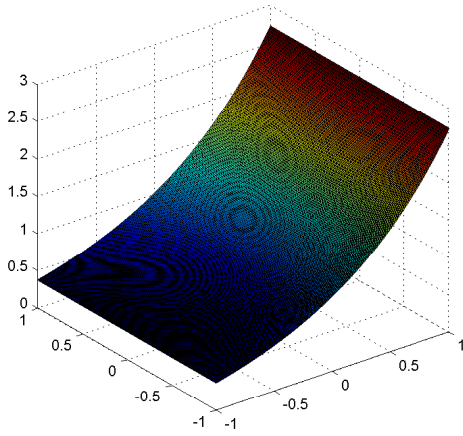


Figure 7.1: Courbe de ρ à $r = 1$ avec $\Delta x = 1/100$.

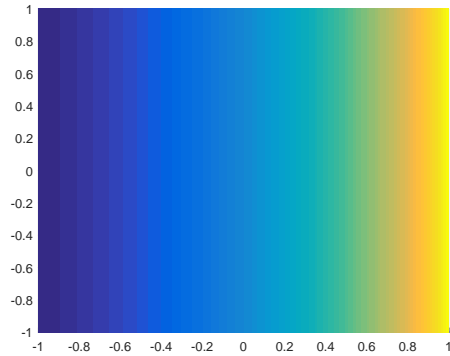


Figure 7.2: Vue de dessus de ρ à $r = 1$ avec $\Delta x = 1/100$.

(Figures 7.1 et 7.2) et avec condition de Neumann non homogène. On constate à l'aide du Tableau 7.1 que pour un même temps l'erreur relative par rapport à la discrétisation est plus grande à mesure que l'on affine le maillage. Cette erreur provient du fait qu'il faille un plus grand nombre d'itérations proportionnellement au pas de temps $\Delta r = \Delta \mathbf{x}^2$ pour parvenir à une même erreur. A partir de $r = 10$, pour un pas d'espace de $1/25$ l'erreur relative atteint un minimum de 0.0047 tandis que pour un pas d'espace de $1/100$ elle atteint 0.0011. Nous obtenons finalement une

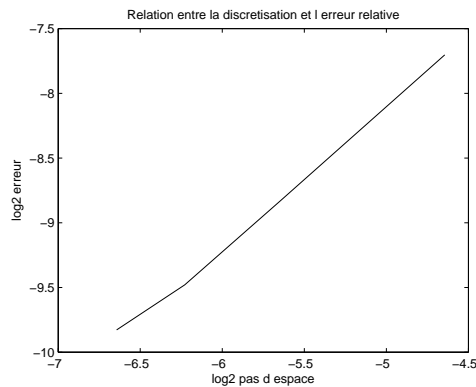


Figure 7.3: Relation entre l'erreur relative et la discrétisation à $r = 10$, pente de l'ordre de 1.

Δx	$r = 0.5$	$r = 1$	$r = 10$
1/25	0.1650	0.1170	0.0048
1/50	0.1696	0.1207	0.0022
1/75	0.1711	0.1220	0.0014
1/100	0.1718	0.1226	0.0011

Table 7.1: Relation entre la discrétisation de la grille et l'erreur relative à ρ .

Δx	$r = 0.5$	$r = 1$	$r = 10$
1/25	0.1256	0.0758	0.0065
1/50	0.1253	0.0742	0.0017
1/75	0.1254	0.0740	7.5609×10^{-4}
1/100	0.1256	0.0740	4.3526×10^{-4}

Table 7.2: Relation entre la discrétisation de la grille et l'erreur relative à ρ .

méthode d'ordre 1 en espace comme le montre la Figure 7.3 montrant la relation entre le log de la discrétisation entre $\Delta x = 1/25$ et $\Delta x = 1/100$ à $r = 10$, et pour une solution exponentielle que l'on peut voir sur la Figure 7.1.

Deuxième application

Dans ce second exemple, nous choisissons à nouveau $\Omega = (-1; 1) \times (-1; 1)$ et nous traitons l'équation elliptique définie pour tout $\mathbf{x} \in \Omega$ par:

$$\Delta \rho(x, y) = -4\pi^2 \cos(\pi x) \cos(\pi y). \quad (7.28)$$

Nous choisissons de traiter des conditions de Neumann homogènes pour $\mathbf{x} \in \partial\Omega$ en utilisant l'équation (5.27) introduite dans le Chapitre 5. On définit la solution de l'équation (7.28), notée ρ_{sol} , par:

$$\rho_{sol}(x, y) = 2 \cos(\pi x) \cos(\pi y). \quad (7.29)$$

Comme le montre le tableau 7.2 nous ne retrouvons pas le phénomène précédent: les erreurs

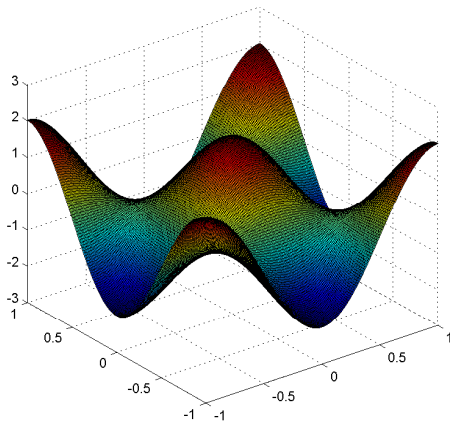


Figure 7.4: Courbe de ρ à $r = 1$ avec $\Delta x = 1/100$.

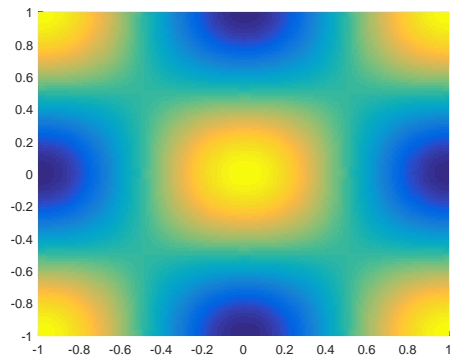


Figure 7.5: Vue de dessus de ρ à $r = 1$ avec $\Delta x = 1/100$.

décroissent quand la discrétisation s'affine pour $r \geq 1$ (Figures 7.4 et 7.5). La différence est négligeable entre $r = 0.5$ et $r = 1$ et devient réellement significative avec un nombre important d'itération. Ainsi à $r = 10$ notre approximation de la solution a une convergence d'ordre 2 comme le montre la Figure 7.6. On estime à présent l'impacte d'une perturbation sur le second membre F afin d'étudier la stabilité de notre méthode en vue de la Partie III. Pour cela, nous simulons avec

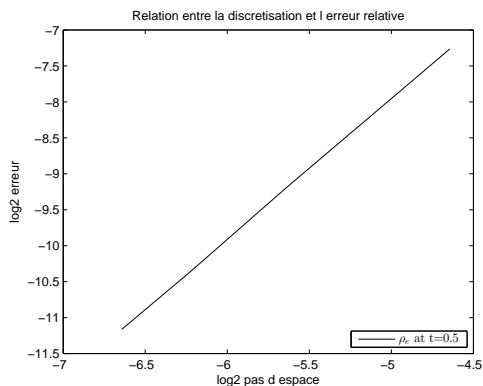


Figure 7.6: Relation entre l'erreur relative et la discrétisation à $r = 10$, pente de l'ordre de 2.

un pas de $\Delta x = 1/25$ et nous nous basons sur l'erreur relative à $r = 1$ et $r = 5$. Comme le montre le tableau 7.3, il faut se baser sur un temps long pour voir l'impact réel de cette perturbation. En effet, notre solution approchée étant en moyenne inférieure à la solution, une faible perturbation positive du second membre nous approche de la solution lors des premières itérations. Cependant, sur le long terme l'impact de la perturbation sur l'erreur relative s'avère linéaire par rapport au pourcentage de perturbation que l'on apporte, ce qui est le comportement attendu.

P_ρ (en %)	$r = 1$	$r = 5$
0	0.0758	0.0081
5	0.0563	0.0327
10	0.0486	0.0733
15	0.0580	0.1139
30	0.1296	0.2362
50	0.2447	0.3989

Table 7.3: Impacte de la perturbation P_ρ (en %) sur l'erreur relative à $r = 1$ et $r = 5$.

3.2 Équation de Helmholtz homogène

Pour cette application, nous allons traiter l'équation de Helmholtz homogène dans le domaine $\Omega = (0; 1) \times (0; 1)$. Celle-ci découle de l'équation des ondes isotrope et non-diffusive, ou équation des ondes de d'Alembert, décrivant les variations d'une quantité ondulante pour $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T)$:

$$\Delta \Phi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{C_o^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2}(\mathbf{x}, t), \quad (7.30)$$

où C_o est la célérité de l'onde. Cette équation a pour solution harmonique une fonction Φ de la forme:

$$\Phi(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}) \exp(i\omega t), \quad (7.31)$$

où $\omega = kC_o$ est la pulsation et k le nombre d'onde ($k = \frac{2\pi}{\lambda}$ avec λ la longueur d'onde). En introduisant cette expression dans l'équation (7.30), on obtient l'équation dite de Helmholtz, définie pour $\mathbf{x} \in \Omega$ par:

$$\Delta\rho(\mathbf{x}) = k^2\rho(\mathbf{x}). \quad (7.32)$$

Cette dernière est utilisée pour rechercher les modes propres, ou solutions stationnaires, des équations (7.30). Nous choisissons de traiter l'équation (7.32) en considérant des conditions aux bords de type Dirichlet pour $\mathbf{x} \in \partial\Omega$:

$$\rho(\mathbf{x}) = \rho_{sol}(\mathbf{x}), \quad (7.33)$$

que nous traitons en utilisant l'équation (5.27) introduite dans le Chapitre 5. La solution de l'équation (7.32), notée ρ_{sol} (approchée sur les Figures 7.7 et 7.8), est:

$$\rho_{sol}(\mathbf{x}) = \cos(\pi x) \frac{\sinh(\mu(1-y))}{\sinh \mu}, \quad (7.34)$$

où $\mu = \sqrt{k^2 + \pi^2}$. Nous choisissons dans un premier temps $k = 2$. Nous commencerons par vérifier l'ordre de convergence de la méthode appliquée à ce problème. La principale différence avec les deux autres applications est que le terme source est un opérateur dépendant de ρ .

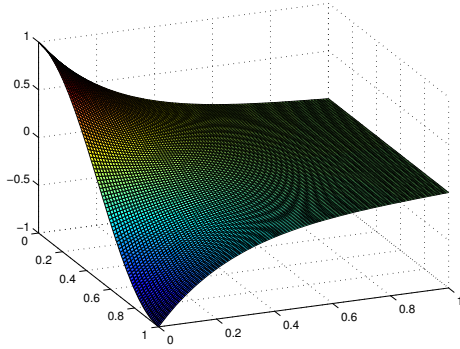


Figure 7.7: Approximation de ρ avec $k = 2$, $\Delta x = 1/100$ et $r = 1$.

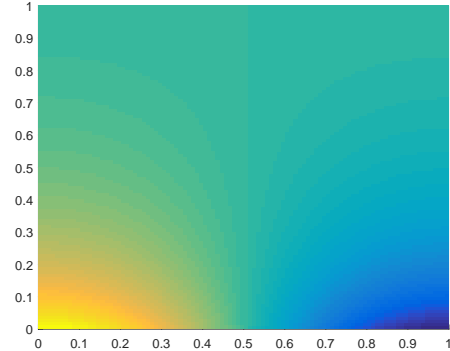
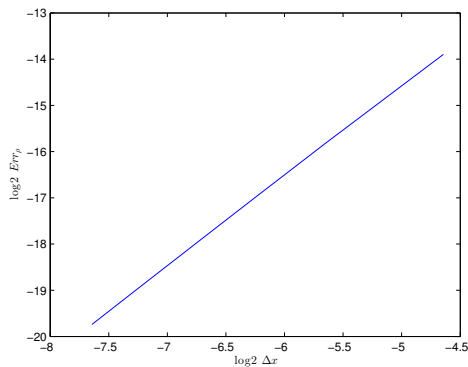


Figure 7.8: Vue de dessus de ρ avec $k = 2$, $\Delta x = 1/100$ et $r = 1$.

Estimation de l'ordre de convergence

Dans un premier temps, nous estimons l'ordre de convergence de la méthode appliquée à ce problème à partir des erreurs relatives présentées dans le Tableau 7.4. Comme le montre la Figure 7.9, nous obtenons une pente moyenne de 1.9559, validant ainsi la convergence d'ordre 2 en espace attendu.

À présent, nous nous munissons du critère d'arrêt C_ρ avec un seuil de l'ordre de Δx^3 afin de mesurer l'impacte des conditions initiales sur le temps de convergence et sur la précision. Comme le montre le Tableau 7.5, l'initialisation n'impacte pas la précision de la méthode, sauf dans le cas où l'on initialise directement ρ à sa valeur exacte. On constate que le système met de plus en plus de temps à atteindre son état d'équilibre à mesure que l'on choisit ρ^0 proche de ρ_{sol} . Pour cause, la somme des fonctions de répartitions particulières sont de plus en plus proches de leur

Figure 7.9: Relation entre l'erreur relative et la discrétisation à $r = 10$, pente de l'ordre de 2.

Δx	Err_ρ
1/25	6.5539×10^{-5}
1/50	1.7428×10^{-5}
1/75	7.9019×10^{-6}
1/100	4.4892×10^{-6}
1/150	2.0166×10^{-6}
1/200	1.1414×10^{-6}

Table 7.4: Relation entre la discrétisation Δx et l'erreur relative à $r = 10$.

état d'équilibre et évoluent très lentement tandis que les vitesses définies par la somme $\sum_j \mathbf{e}_j g_j$ continue à évoluer. A l'inverse, en initialisant ρ^0 par des valeurs éloignées de la solution exacte ρ_{sol} , la méthode convergera rapidement, et les différents moments d'équilibre sont tous atteints dans le même ordre de grandeur d'itérations.

Influence des paramètres

Nous voulons maintenant étudier l'impact de l'opérateur $F(\rho)$ sur le système. Pour cela, nous allons faire varier le paramètre k entre 0.1 et 32. Comme le montre la Figure 7.10 mesurant l'erreur relative à $r = 1$ pour $\Delta x = 1/50$, nous obtenons une courbe dont la pente varie entre 2 et

u_0	$\Delta x = 1/50$		$\Delta x = 1/100$	
	Err_ρ	t	Err_ρ	t
0	0.0013	0.3620	0.0006	0.4072
$0.25 \times u_{sol}$	0.0013	0.7060	0.0006	0.7965
$0.5 \times u_{sol}$	0.0013	1.0248	0.0006	1.1605
$0.75 \times u_{sol}$	0.0012	1.2492	0.0005	1.4813
u_{sol}	1.9915×10^{-7}	1.3008	1.3209×10^{-8}	1.4813

Table 7.5: Etude du temps de convergence en fonction de ρ_0 et de Δx avec $C_\rho \leq \Delta \mathbf{x}^3$.

P_ρ (en %)	$\Delta x = 1/50$	$\Delta x = 1/100$
0	1.7625×10^{-5}	4.5277×10^{-6}
5	0.0019	0.0019
10	0.0037	0.0039
15	0.0057	0.0058
30	0.0113	0.0111
50	0.0190	0.0189
100	0.0333	0.0371

Table 7.6: Impacte de la perturbation P_ρ (en %) sur l'erreur relative à $r = 1$.

4, pour une erreur variant entre 7.5742×10^{-8} et 0.0074. Compte tenu de la forme de la solution, il est normal que ce paramètre entraîne une erreur plus importante en grandissant car cela entraîne une pente plus importante (Figure 7.10). De plus, cela signifie également que l'opérateur $F(\rho)$ a bien plus d'influence sur le comportement numérique du modèle, et par conséquent que les erreurs s'accumulent à mesure que l'on itère.

Enfin, comme pour l'exemple précédent nous voulons mettre notre modèle à l'épreuve des perturbation de l'opérateur $F(\rho)$. Pour cela, nous initialisons ρ à 0 sur l'ensemble du domaine Ω et l'on fait varier le pourcentage de perturbation, pour $\Delta x = 1/50$ puis $1/100$. Comme le montre le Tableau 7.6, le comportement est sensiblement le même que dans l'exemple précédent, à savoir une erreur relative linéairement dépendante des perturbations. Aussi, dès lors que le pourcentage d'erreur est d'ordre bien plus élevé que l'erreur initiale, la discrétisation ne joue qu'un rôle négligeable. La méthode reste donc fiable pour de petites perturbations.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons validé une LBM adaptée à la résolution d'équations de type elliptique, en l'appliquant à deux benchmarks, et à l'équation des ondes de d'Alembert. Nous obtenons à nouveau un ordre de convergence en espace de l'ordre de 1 à 2 en fonction de la nature de l'exemple traité. De plus, nous avons validé la stabilité de la méthode en introduisant des perturbations importantes sur le second membre.

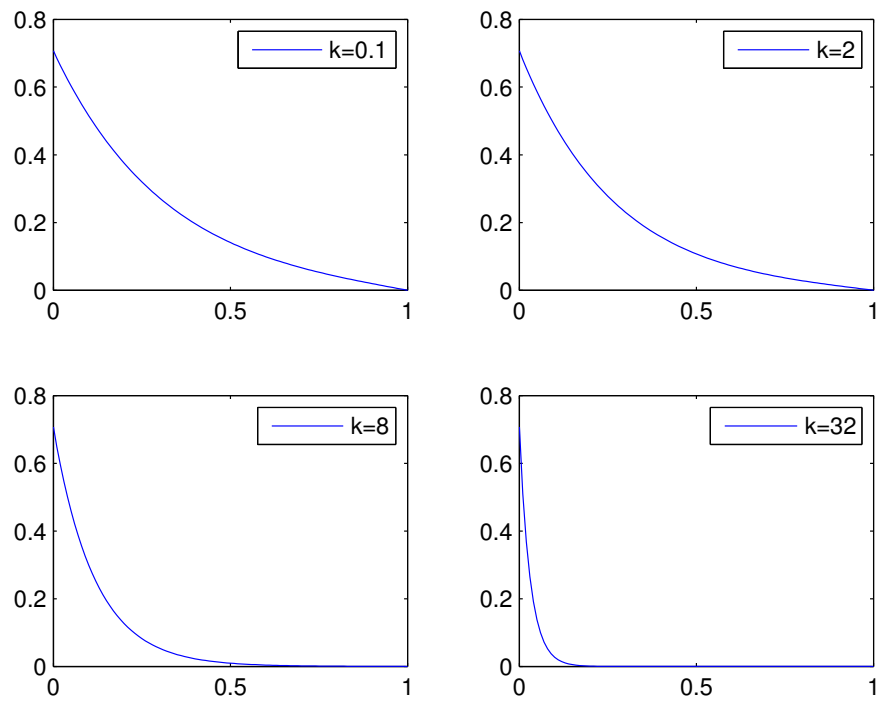


Figure 7.10: $\rho(0.25, y, 1)$ avec $k = 0.1, 2, 8, 32$ pour $\Delta x = 1/100$.

8 Méthode de Boltzmann pour des systèmes d'EDPs couplées

Dans cette partie, nous proposons une méthode de Boltzmann sur réseau $D2Q9$ permettant de résoudre des systèmes d'équations différentielles non-linéaires en nous basant sur la méthode proposée dans [133]. Nous définissons une méthode pour un système de deux équations paraboliques dans le but de l'appliquer au modèle de Patlak-Keller-Segel pour la chimiotaxie (voir [89], [61]). La construction proposée peut être étendue à des systèmes plus grands en procédant exactement de la même manière. Aussi, il est possible d'intégrer un opérateur de transport en s'inspirant de la méthode proposée pour des équations de type réaction-diffusion (voir chapitre 6). Cette construction s'appuie sur l'introduction de fonctions correctives associées à chaque équation du système. On associera également une équation de Boltzmann sur réseau à chacune des équations du système afin de calculer chacune des fonctions à approcher.

1 Définition du problème

Nous prenons à nouveau $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T)$, et nous traitons un système de la forme:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_1}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= \operatorname{div}(\nu_1(\mathbf{x}, t)\nabla \rho_1(\mathbf{x}, t) + \nu_2(\mathbf{x}, t)\nabla \rho_2(\mathbf{x}, t)) + F(\rho_1, \rho_2; \mathbf{x}, t), \\ \frac{\partial \rho_2}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= \operatorname{div}(\nu_3(\mathbf{x}, t)\nabla \rho_2(\mathbf{x}, t) + \nu_4(\mathbf{x}, t)\nabla \rho_1(\mathbf{x}, t)) + G(\rho_1, \rho_2; \mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (8.1)$$

où ν_1, ν_2, ν_3 et ν_4 sont les coefficients de diffusions et les opérateurs F et G sont connus. De plus, ρ_1 et ρ_2 respectent les conditions aux bords de type Robin suivantes, pour $\mathbf{x} \in \partial\Omega$:

$$\begin{aligned} \alpha_1 \rho_1(\mathbf{x}, t) + \alpha_2 \frac{\partial \rho_1}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}, t) &= F_{\rho_1}(\mathbf{x}, t), \\ \alpha_3 \rho_2(\mathbf{x}, t) + \alpha_4 \frac{\partial \rho_2}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}, t) &= F_{\rho_2}(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (8.2)$$

où F_{ρ_1} et F_{ρ_2} sont des fonctions connues, et $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4 \in \mathbb{R}$. Les fonctions ρ_1 et ρ_2 vérifient également les conditions initiales:

$$\rho_1(\mathbf{x}, 0) = \rho_1^0(\mathbf{x}), \quad \rho_2(\mathbf{x}, 0) = \rho_2^0(\mathbf{x}), \quad (8.3)$$

où ρ_1^0 et ρ_2^0 sont des fonctions connues.

Comme pour les autres cas traités, nous construisons notre méthode autour de la formulation

adimensionnelle, en reprenant les variables définies par les équations (4.3), (4.4) et (4.5) dans la section 1 du Chapitre 4:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{\rho}_1}{\partial \tilde{t}}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) &= \tilde{\text{div}}(\tilde{\nu}_1 \nabla \tilde{\rho}_1(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t})) + \tilde{\nu}_2 \tilde{\nabla} \tilde{\rho}_2(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) + \tilde{F}(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2; \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}), \\ \frac{\partial \tilde{\rho}_2}{\partial \tilde{t}}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) &= \tilde{\text{div}}(\tilde{\nu}_3 \tilde{\nabla} \tilde{\rho}_2(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t})) + \tilde{\nu}_4 \nabla \tilde{\rho}_1(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) + \tilde{G}(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2; \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}),\end{aligned}\tag{8.4}$$

avec les coefficients de diffusions $\tilde{\nu}_k = \frac{T\nu_k}{L^2}$ pour $k = 1, \dots, 4$, les opérateurs $\tilde{F} = TF$ et $\tilde{G} = TG$. Dans la suite on omettra les "~" afin d'alléger les notations.

2 Définition de la méthode

Pour résoudre un tel système, nous reprenons tout ou partie les méthodes déjà utilisées, en introduisant deux fonctions correctives S_j^1 et S_j^2 . Nous associons à chacune des deux équations du système une équation de Boltzmann sur réseau:

$$\begin{aligned}f_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) &= f_j(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_1} (f_j(\mathbf{x}, t) - f_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) \\ &\quad + \Delta t S_j^1(\mathbf{x}, t) + \Delta t F_j(\mathbf{x}, t) \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right) F_j(\mathbf{x}, t), \\ g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) &= g_j(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_2} (g_j(\mathbf{x}, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) \\ &\quad + \Delta t S_j^2(\mathbf{x}, t) + \Delta t G_j(\mathbf{x}, t) \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right) G_j(\mathbf{x}, t),\end{aligned}\tag{8.5}$$

où f_j et g_j sont les fonctions de répartition respectivement associées à la première et à la seconde equation de (8.4), et où f_j^{eq} et g_j^{eq} sont les fonctions d'équilibre. Les termes sources F_j et G_j sont des formes discrétisées des opérateurs F et G . On approche les fonctions ρ_1 et ρ_2 solutions du système (8.4) via les sommations:

$$\rho_1(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=0}^8 f_j(\mathbf{x}, t) \text{ et } \rho_2(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=0}^8 g_j(\mathbf{x}, t).\tag{8.6}$$

Nous définissons les fonctions d'équilibre associées à chacune des deux équations par:

$$f_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_j \rho_1(\mathbf{x}, t) \text{ et } g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_j \rho_2(\mathbf{x}, t).\tag{8.7}$$

D'après (8.7), (3.5), (3.6), (3.7) nous obtenons les relations suivantes:

$$\sum_{j=0}^8 f_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = \rho_1(\mathbf{x}, t) \text{ et } \sum_{j=0}^8 g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = \rho_2(\mathbf{x}, t),\tag{8.8}$$

$$\sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j f_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = 0 \text{ et } \sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (8.9)$$

$$\sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j f_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = C_s^2 \rho_1(\mathbf{x}, t) \mathbf{I}_d \text{ et } \sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = C_s^2 \rho_2(\mathbf{x}, t) \mathbf{I}_d, \quad (8.10)$$

Les termes sources seront quant à eux discrétisés tels que:

$$F_j(\mathbf{x}, t) = w_j F(\rho_1, \rho_2; \mathbf{x}, t) \text{ et } G_j(\mathbf{x}, t) = w_j G(\rho_1, \rho_2; \mathbf{x}, t). \quad (8.11)$$

D'où:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^8 F_j(\mathbf{x}, t) &= F(\rho_1, \rho_2; \mathbf{x}, t), & \sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j F_j(\mathbf{x}, t) &= 0, \\ \sum_{j=0}^8 G_j(\mathbf{x}, t) &= G(\rho_1, \rho_2; \mathbf{x}, t), & \sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j G_j(\mathbf{x}, t) &= 0, \end{aligned} \quad (8.12)$$

Enfin, pour tenir compte du couplage dans le système (8.4), nous introduisons des fonctions correctives S_j^1 et S_j^2 et on note pour $k = 1, 2$, $\sum_j S_j^k = S^k$. Chacune des fonctions S^k est associée à la k^{ime} équation, et son rôle est d'approcher les gradients des fonctions ρ_1 et ρ_2 . Ainsi S^1 (resp. S^2) permettra d'approcher le terme $\nu_2(\mathbf{x}, t) \nabla \rho_2(\mathbf{x}, t)$ (res. $\nu_4(\mathbf{x}, t) \nabla \rho_1(\mathbf{x}, t)$) dans la première (resp. seconde) équation du système (8.4). Nous définissons ces fonctions sous la forme:

$$\begin{aligned} S_j^1(\mathbf{x}, t) &= w_j (\beta_1(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_j \cdot \nabla \rho_1(\mathbf{x}, t) + \beta_2(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_j \cdot \nabla \rho_2(\mathbf{x}, t)), \\ S_j^2(\mathbf{x}, t) &= w_j (\beta_3(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_j \cdot \nabla \rho_2(\mathbf{x}, t) + \beta_4(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_j \cdot \nabla \rho_1(\mathbf{x}, t)), \end{aligned} \quad (8.13)$$

où β_k , avec $k = 1, \dots, 4$, sont des fonctions vérifiant:

$$\begin{aligned} \beta_1(\mathbf{x}, t) &= -\frac{1}{\tau_1} \left(\frac{\nu_1(\mathbf{x}, t)}{C_s^2 \Delta t} + \frac{1}{2} - \tau_1 \right), & \beta_2(\mathbf{x}, t) &= -\frac{\nu_2(\mathbf{x}, t)}{\tau_1 \Delta t C_s^2}, \\ \beta_3(\mathbf{x}, t) &= -\frac{1}{\tau_2} \left(\frac{\nu_3(\mathbf{x}, t)}{C_s^2 \Delta t} + \frac{1}{2} - \tau_2 \right), & \beta_4(\mathbf{x}, t) &= -\frac{\nu_4(\mathbf{x}, t)}{\tau_2 \Delta t C_s^2}, \end{aligned} \quad (8.14)$$

avec $\tau_k > \frac{1}{2}$ pour $k = 1, 2$. On obtient ainsi:

$$\begin{aligned} S_j^1(\mathbf{x}, t) &= w_j \left(-\frac{1}{\tau_1} \left(\frac{\nu_1(\mathbf{x}, t)}{C_s^2 \Delta t} + \frac{1}{2} - \tau_1 \right) \mathbf{e}_j \cdot \nabla \rho_1(\mathbf{x}, t) - \frac{\nu_2(\mathbf{x}, t)}{\tau_1 \Delta t C_s^2} \mathbf{e}_j \cdot \nabla \rho_2(\mathbf{x}, t) \right), \\ S_j^2(\mathbf{x}, t) &= w_j \left(-\frac{1}{\tau_2} \left(\frac{\nu_3(\mathbf{x}, t)}{C_s^2 \Delta t} + \frac{1}{2} - \tau_2 \right) \mathbf{e}_j \cdot \nabla \rho_2(\mathbf{x}, t) - \frac{\nu_4(\mathbf{x}, t)}{\tau_2 \Delta t C_s^2} \mathbf{e}_j \cdot \nabla \rho_1(\mathbf{x}, t) \right). \end{aligned} \quad (8.15)$$

D'après (3.7) - (3.5) on montre facilement que

$$\sum_{j=0}^8 S_j^1(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \sum_{j=0}^8 S_j^2(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (8.16)$$

et

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j S_j^1(\mathbf{x}, t) &= C_s^2 \beta_1(\mathbf{x}, t) \nabla \rho_1(\mathbf{x}, t) + C_s^2 \beta_2(\mathbf{x}, t) \nabla \rho_2(\mathbf{x}, t), \\ \sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j S_j^2(\mathbf{x}, t) &= C_s^2 \beta_3(\mathbf{x}, t) \nabla \rho_2(\mathbf{x}, t) + C_s^2 \beta_4(\mathbf{x}, t) \nabla \rho_1(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (8.17)$$

Remarque 8.1 .

Nous prenons le partie pris de fonctions de répartitions d'équilibres simples, indépendantes des coefficients de diffusion, afin de grouper tous les termes relatifs aux opérateurs non-linéaires dans les fonctions correctives. Ces fonctions nous permettent aussi de tenir compte des coefficients de diffusions. Ainsi, les taux de relaxations τ_1 et τ_2 peuvent être choisis arbitrairement tels que $\tau_k > \frac{1}{2}$, $k = 1, 2$. Il est également possible d'adopter une autre démarche, et d'incorporer directement les fonctions S^k à l'intérieur des fonctions de répartition d'équilibre.

Proposition 8.1 .

Si les fonctions de répartition d'équilibre f_j^{eq} et g_j^{eq} sont définies par l'équation (8.7) satisfont les propriétés (8.8), (8.9) et (8.10), que les taux de relaxation τ_1 et τ_2 sont strictement supérieurs à $\frac{1}{2}$, que les termes sources F_j et G_j vérifient les égalités (8.12), et que les fonctions correctives S_j^1 et S_j^2 vérifient les propriétés (8.16) et (8.17), alors d'après le développement de Chapman-Enskog, la résolution de l'équation de Boltzmann sur réseau (8.5) permet d'approcher les quantités macroscopiques ρ_1 et ρ_2 , solutions du système (8.4) avec une erreur de l'ordre de $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$.

Proof. Pour appliquer la méthode de Chapman-Enskog au système choisi, nous notons $\mathcal{P}_j^{(n)}$ les fonctions de recomposition associées à la première équation, et $\mathcal{Q}_j^{(n)}$ celles associées à la seconde. Compte tenu de la nature des équations, nous allons utiliser un développement d'ordre 2 en temps et 1 en espace, soit:

$$\begin{aligned} f_j &= f_j^{(0)} + \varepsilon f_j^{(1)} + \varepsilon^2 f_j^{(2)} + \mathcal{O}(\varepsilon^3), \\ g_j &= g_j^{(0)} + \varepsilon g_j^{(1)} + \varepsilon^2 g_j^{(2)} + \mathcal{O}(\varepsilon^3), \\ F_j &= \varepsilon F_j^{(1)}, \quad G_j = \varepsilon G_j^{(1)}, \\ S_j^1 &= \varepsilon S_j^{1,(1)}, \quad S_j^2 = \varepsilon S_j^{2,(1)}, \\ \frac{\partial}{\partial t} &= \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2}, \quad \nabla = \varepsilon \nabla_1. \end{aligned} \quad (8.18)$$

où les fonctions de répartition $f_j^{(n)}$ et $g_j^{(n)}$ vérifient l'équation (4.13) pour $n > 0$, et où $f_j^{(0)} = f_j^{eq}$ et $g_j^{(0)} = g_j^{eq}$. A partir de ce développement, on définit les fonctions $\mathcal{P}_j^{(n)}$ et $\mathcal{Q}_j^{(n)}$ pour $n = 0, 1, 2$

telles que:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_j^{(0)} &= \frac{1}{\tau_1} \left(f_j^{(0)} - f_j^{eq} \right), \quad \mathcal{Q}_j^{(0)} = \frac{1}{\tau_2} \left(g_j^{(0)} - g_j^{eq} \right), \\
\mathcal{P}_j^1 &= \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) f_j^{eq} + \frac{1}{\Delta t \tau_1} f_j^{(1)} - S_j^{1,(1)} - F_j^{(1)}, \\
\mathcal{Q}_j^{(1)} &= \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{eq} + \frac{1}{\Delta t \tau_2} g_j^{(1)} - S_j^{2,(1)} - G_j^{(1)}, \\
\mathcal{P}_j^{(2)} &= \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) f_j^{(1)} + \left(\frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 \right) f_j^{eq} \\
&\quad + \frac{1}{\Delta t \tau_1} f_j^{(2)} - \frac{\Delta t}{2} \left(\mathbf{e}_j \cdot \nabla + \frac{\partial}{\partial t_1} \right) F_j^{(1)}, \\
\mathcal{Q}_j^{(2)} &= \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{(1)} + \left(\frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 \right) g_j^{eq} \\
&\quad + \frac{1}{\Delta t \tau_2} g_j^{(2)} - \frac{\Delta t}{2} \left(\mathbf{e}_j \cdot \nabla + \frac{\partial}{\partial t_1} \right) G_j^{(1)},
\end{aligned} \tag{8.19}$$

Nous devons maintenant exprimer les sommes $\mathcal{P}^{(n)} = \sum_{j=0}^8 \mathcal{P}_j^{(n)}$ et $\mathcal{Q}^{(n)} = \sum_{j=0}^8 \mathcal{Q}_j^{(n)}$ pour $n = 0, \dots, 2$. A l'ordre 1, nous avons:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_j^{(1)} &= \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) f_j^{eq} + \frac{1}{\Delta t \tau_1} f_j^{(1)} - S_j^{1,(1)} - F_j^{(1)}, \\
\mathcal{Q}_j^{(1)} &= \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{eq} + \frac{1}{\Delta t \tau_2} g_j^{(1)} - S_j^{2,(1)} - G_j^{(1)}.
\end{aligned} \tag{8.20}$$

D'après (8.8) , (8.12), (8.16) on peut exprimer les fonctions $\mathcal{P}^{(1)}$ et $\mathcal{Q}^{(1)}$ par:

$$\mathcal{P}^{(1)} = \frac{\partial \rho_1}{\partial t_1} - F^{(1)} \quad \text{et} \quad \mathcal{Q}^{(1)} = \frac{\partial \rho_2}{\partial t_1} - G^{(1)}, \tag{8.21}$$

où $F = \varepsilon F^{(1)}$ et $G = \varepsilon G^{(1)}$. Nous cherchons à présent à calculer la somme des fonctions $\mathcal{P}_j^{(2)}$ et $\mathcal{Q}_j^{(2)}$. D'après (8.8), (8.9), (4.13), et (8.12) on obtient:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}^{(2)} &= \sum_{j=0}^8 \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) f_j^{(1)} + \sum_{j=0}^8 \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 f_j^{eq} \\
&\quad + \frac{\partial \rho_1}{\partial t_2} - \sum_{j=0}^8 \frac{\Delta t}{2} \left(\mathbf{e}_j \cdot \nabla + \frac{\partial}{\partial t_1} \right) F_j^{(1)}, \\
\mathcal{Q}^{(2)} &= \sum_{j=0}^8 \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{(1)} + \sum_{j=0}^8 \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 g_j^{eq} \\
&\quad + \frac{\partial \rho_2}{\partial t_2} - \sum_{j=0}^8 \frac{\Delta t}{2} \left(\mathbf{e}_j \cdot \nabla + \frac{\partial}{\partial t_1} \right) G_j^{(1)}.
\end{aligned} \tag{8.22}$$

Par l'utilisation des expressions de $\mathcal{P}_j^{(1)}$ et $\mathcal{Q}_j^{(1)}$ données dans (8.19) on en déduit:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t}{2} \sum_{j=0}^8 \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 f_j^{eq} &= \frac{\Delta t}{2} \sum_{j=0}^8 \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) \left(-\frac{1}{\Delta t \tau_1} f_j^{(1)} + F_j^{(1)} + S_j^{1,(1)} \right), \\ \frac{\Delta t}{2} \sum_{j=0}^8 \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 g_j^{eq} &= \frac{\Delta t}{2} \sum_{j=0}^8 \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) \left(-\frac{1}{\Delta t \tau_2} g_j^{(1)} + G_j^{(1)} + S_j^{2,(1)} \right). \end{aligned} \quad (8.23)$$

Par conséquent les relations (8.22) deviennent:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{(2)} &= \frac{\partial \rho_1}{\partial t_2} + \sum_{j=0}^8 \left(1 - \frac{1}{2\tau_1} \right) \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 f_j^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) S_j^{1,(1)}, \\ \mathcal{Q}^{(2)} &= \frac{\partial \rho_2}{\partial t_2} + \sum_{j=0}^8 \left(1 - \frac{1}{2\tau_2} \right) \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 g_j^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) S_j^{2,(1)}. \end{aligned} \quad (8.24)$$

Nous obtenons d'après (8.9), (8.10), (8.12) et les propriétés des fonctions correctives S_j^1 et S_j^2 (8.16) et (8.17) :

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{1}{2\tau_1} \right) \sum_j \mathbf{e}_j f_1^{(1)} &= - \left(\tau_1 - \frac{1}{2} \right) \Delta t \sum_j \mathbf{e}_j \left(\left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) f_j^{eq} - F_j^{(1)} - S_j^{1,(1)} \right) \\ &= - \left(\tau_1 - \frac{1}{2} \right) \Delta t C s^2 \left((1 - \beta_1) \nabla_1 \rho_1 - \beta_2 \nabla_1 \rho_2 \right), \\ \left(1 - \frac{1}{2\tau_2} \right) \sum_j \mathbf{e}_j g_1^{(1)} &= - \left(\tau_2 - \frac{1}{2} \right) \Delta t \sum_j \mathbf{e}_j \left(\left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{eq} - G_j^{(1)} - S_j^{2,(1)} \right) \\ &= - \left(\tau_2 - \frac{1}{2} \right) \Delta t C s^2 \left((1 - \beta_3) \nabla_1 \rho_2 - \beta_4 \nabla_1 \rho_1 \right). \end{aligned} \quad (8.25)$$

Nous pouvons donc réécrire les relations (8.24) telles que:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{(2)} &= \frac{\partial \rho_1}{\partial t_2} + \text{div}_1 \left(\left(\tau_1 - \frac{1}{2} \right) \Delta t C s^2 \left((\beta_1 - 1) \nabla_1 \rho_1 + \beta_2 \nabla_1 \rho_2 \right) \right) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} C_s^2 \left(\beta_1 \nabla_1 \rho_1 + \beta_2 \nabla_1 \rho_2 \right) \\ &= \frac{\partial \rho_1}{\partial t_2} + \text{div}_1 \left(\tau_1 \Delta t C s^2 \left(\left(\beta_1 - 1 + \frac{1}{2\tau_1} \right) \nabla_1 \rho_1 + \beta_2 \nabla_1 \rho_2 \right) \right) \\ \mathcal{Q}^{(2)} &= \frac{\partial \rho_2}{\partial t_2} + \text{div}_1 \left(\left(\tau_2 - \frac{1}{2} \right) \Delta t C s^2 \left((\beta_3 - 1) \nabla_1 \rho_2 + \beta_4 \nabla_1 \rho_1 \right) \right) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} C_s^2 \left(\beta_3 \nabla_1 \rho_2 + \beta_4 \nabla_1 \rho_1 \right) \\ &= \frac{\partial \rho_2}{\partial t_2} + \text{div}_1 \left(\tau_2 \Delta t C s^2 \left(\left(\beta_3 - 1 + \frac{1}{2\tau_2} \right) \nabla_1 \rho_2 + \beta_4 \nabla_1 \rho_1 \right) \right). \end{aligned} \quad (8.26)$$

D'après (8.14) des fonctions β_k , $k = 1, \dots, 4$, les relations (8.26) deviennent:

$$\begin{aligned}\mathcal{P}^{(2)} &= \frac{\partial \rho_1}{\partial t_2} - \operatorname{div}_1 (\nu_1 \nabla_1 \rho_1 + \nu_2 \nabla_1 \rho_2) \\ \mathcal{Q}^{(2)} &= \frac{\partial \rho_2}{\partial t_2} - \operatorname{div}_1 (\nu_3 \nabla_1 \rho_2 + \nu_4 \nabla_1 \rho_1).\end{aligned}\tag{8.27}$$

Par la recombinaison selon les puissances de ε on en déduit, avec une erreur de l'ordre de $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$:

$$\begin{aligned}0 = \mathcal{P}^{(0)} + \varepsilon \mathcal{P}^{(1)} + \varepsilon^2 \mathcal{P}^{(2)} &= \frac{\partial \rho_1}{\partial t} - F(\rho_1, \rho_2) - \operatorname{div} (\beta_1 \nabla \rho_1 + \beta_2 \nabla \rho_2), \\ 0 = \mathcal{Q}^{(0)} + \varepsilon \mathcal{Q}^{(1)} + \varepsilon^2 \mathcal{Q}^{(2)} &= \frac{\partial \rho_2}{\partial t} - G(\rho_1, \rho_2) - \operatorname{div} (\beta_3 \nabla \rho_2 + \beta_4 \nabla \rho_1).\end{aligned}\tag{8.28}$$

Ce qui conclut la preuve. \square

3 Initialisation des fonctions de répartition

Nous avons introduit plusieurs égalités liant les fonctions correctives S_j^1 et S_j^2 aux gradients de ρ_1 et ρ_2 . Ceux-ci sont liés par l'expression des fonctions $\mathcal{P}^{(1)}$ et $\mathcal{Q}^{(1)}$ aux sommes $\sum_j \mathbf{e}_j f_j$ et $\sum_j \mathbf{e}_j g_j$. Cette liaison nous donne des conditions à satisfaire dès l'initialisation. Pour ce faire, il faut initialiser les gradients à partir de ces égalités, et que les fonctions de répartition respectent ces conditions à $t = 0$. Nous initialisons les gradients explicitement si les fonctions ρ_1^0 et ρ_2^0 sont données explicitement, ou à l'aide d'approximation numériques (par exemple différences finies). Ces gradients vont nous mener à construire les conditions initiales des fonctions de répartition. L'initialisation $f_j(\mathbf{x}, 0) = f_j^{eq}(\mathbf{x}, 0)$ et $g_j(\mathbf{x}, 0) = g_j^{eq}(\mathbf{x}, 0)$ permet de respecter les conditions $\sum_{j=0}^8 f_j(\mathbf{x}, 0) = \rho_1^0(\mathbf{x})$ et $\sum_{j=0}^8 g_j(\mathbf{x}, 0) = \rho_2^0(\mathbf{x})$, mais dans ce cas les gradients sont liés aux fonctions de répartition par les relations (8.25):

$$\begin{aligned}\sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j f_j(\mathbf{x}, t) &= -\Delta t \tau_1 C_s^2 \left(\frac{1}{\tau_1} \left(\frac{\nu_1}{C_s^2 \Delta t} + \frac{1}{2} - \tau_1 \right) \nabla \rho_1(\mathbf{x}, t) + \frac{\nu_2}{\tau_1 \Delta t C_s^2} \nabla \rho_2(\mathbf{x}, t) \right), \\ \sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j g_j(\mathbf{x}, t) &= -\Delta t \tau_2 C_s^2 \left(\frac{1}{\tau_2} \left(\frac{\nu_3}{C_s^2 \Delta t} + \frac{1}{2} - \tau_2 \right) \nabla \rho_2(\mathbf{x}, t) + \frac{\nu_4}{\tau_2 \Delta t C_s^2} \nabla \rho_1(\mathbf{x}, t) \right).\end{aligned}\tag{8.29}$$

On initialise donc les fonctions f_j et g_j telles que:

$$\begin{aligned}f_j(\mathbf{x}, 0) &= w_j \left(\rho_1^0(\mathbf{x}) - \Delta t \left(\left(\frac{\nu_1}{C_s^2 \Delta t} + \frac{1}{2} - \tau_1 \right) \mathbf{e}_j \cdot \nabla \rho_1(\mathbf{x}, t) + \frac{\nu_2}{\Delta t C_s^2} \mathbf{e}_j \cdot \nabla \rho_2(\mathbf{x}, t) \right) \right), \\ g_j(\mathbf{x}, 0) &= w_j \left(\rho_2^0(\mathbf{x}) - \Delta t \left(\left(\frac{\nu_3}{C_s^2 \Delta t} + \frac{1}{2} - \tau_2 \right) \mathbf{e}_j \cdot \nabla \rho_2(\mathbf{x}, t) + \frac{\nu_4}{\Delta t C_s^2} \mathbf{e}_j \cdot \nabla \rho_1(\mathbf{x}, t) \right) \right).\end{aligned}\tag{8.30}$$

La relation (8.25) est donc satisfaite à l'initialisation.

4 Application au modèle de Patlak-Keller-Segel

Pour valider ce modèle et l'illustrer par une application, nous résolvons les équations de Keller-Segel. Il s'agit d'un modèle de chimiotaxie où l'on étudie le mouvements des cellules attirées par une substance chimique qu'elles produisent. La première équation porte sur le comportement des cellules, et fait intervenir la diffusion de la substance chimique. La seconde permet de modéliser l'évolution de la densité de cette substance. Ces équations sont définies pour tout $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times [0, T]$ par:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= \operatorname{div}(\mu \nabla \rho(\mathbf{x}, t) - \chi \rho(\mathbf{x}, t) \nabla c(\mathbf{x}, t)) + F(\rho, c; \mathbf{x}, t), \\ \frac{\partial c}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= \Delta c(\mathbf{x}, t) - c(\mathbf{x}, t) + \rho(\mathbf{x}, t) + G(\rho, c; \mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (8.31)$$

où ρ est la densité de particules, c la concentration de la substance chimique, μ le coefficient de diffusion des cellules, et χ la chimiosensibilité.

Dans les deux exemples que nous traitons, nous considérons des conditions aux bords de Neumann homogènes, que nous traitons en utilisant l'équation (5.27) introduite dans le Chapitre 5, et nous initialisons les fonctions à partir des solutions ρ_{sol} et c_{sol} supposées connues, $\rho(\mathbf{x}, 0) = \rho_{sol}(\mathbf{x}, 0)$ et $c(\mathbf{x}, 0) = c_{sol}(\mathbf{x}, 0)$. Pour les constantes relatives à la méthode, nous choisissons $\tau_1 = \tau_2 = 0.8$, et un pas de temps $\Delta t = \Delta x^2$. Pour traiter ces équations, nous définissons les fonctions correctives S_j^1 et S_j^2 par:

$$\begin{aligned} S_j^1(\mathbf{x}, t) &= w_j \left(-\frac{1}{\tau_1} \left(\frac{\mu}{C_s^2 \Delta t} + \frac{1}{2} - \tau_1 \right) \mathbf{e}_j \nabla \rho(\mathbf{x}, t) - \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{\tau_1 \Delta t C_s^2} \mathbf{e}_j \nabla c(\mathbf{x}, t) \right), \\ S_j^2(\mathbf{x}, t) &= w_j \left(-\frac{1}{\tau_2} \left(\frac{1}{C_s^2 \Delta t} + \frac{1}{2} - \tau_2 \right) \mathbf{e}_j \nabla c(\mathbf{x}, t) \right). \end{aligned} \quad (8.32)$$

Dans le premier exemple, nous considérons un problème aux données et aux solutions connues. Dans le second, nous nous intéressons à la dynamique d'un exemple aux données réalistes.

4.1 Benchmarks et estimation numérique de l'erreur

Pour ce premier exemple, $\Omega = (0; 1) \times (0; 1)$, et nous définissons les opérateurs F et G telles que ρ_{sol} et c_{sol} soient les solutions du système (8.31). Ces solutions sont définies pour tout $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T)$ par:

$$\begin{aligned} \rho_{sol}(\mathbf{x}, t) &= t(x^2(x-1)^2)(y^2(y-1)^2), \\ c_{sol}(\mathbf{x}, t) &= t(\cos(\pi x) + \cos(\pi y)). \end{aligned} \quad (8.33)$$

On choisit également $\mu = 1/12$ et $\chi = 1$. Les résultats obtenus sont présentés sur les Figures 8.1 et 8.2.

Estimation de l'ordre de convergence

Dans un premier temps et comme nous l'avons fait pour les autres méthodes, nous nous intéressons à l'évolution de l'erreur relative en fonction du pas d'espace $\Delta \mathbf{x}$ (Figure 8.3). Pour cela, nous le faisons varier entre $1/25$ et $1/200$ et nous relevons l'erreur relative pour $t = 0.5$ et pour $t = 1$. Nous obtenons ainsi une pente moyenne passant de 1.1157 à 0.9959 entre $t = 0.5$ et $t = 1$ pour

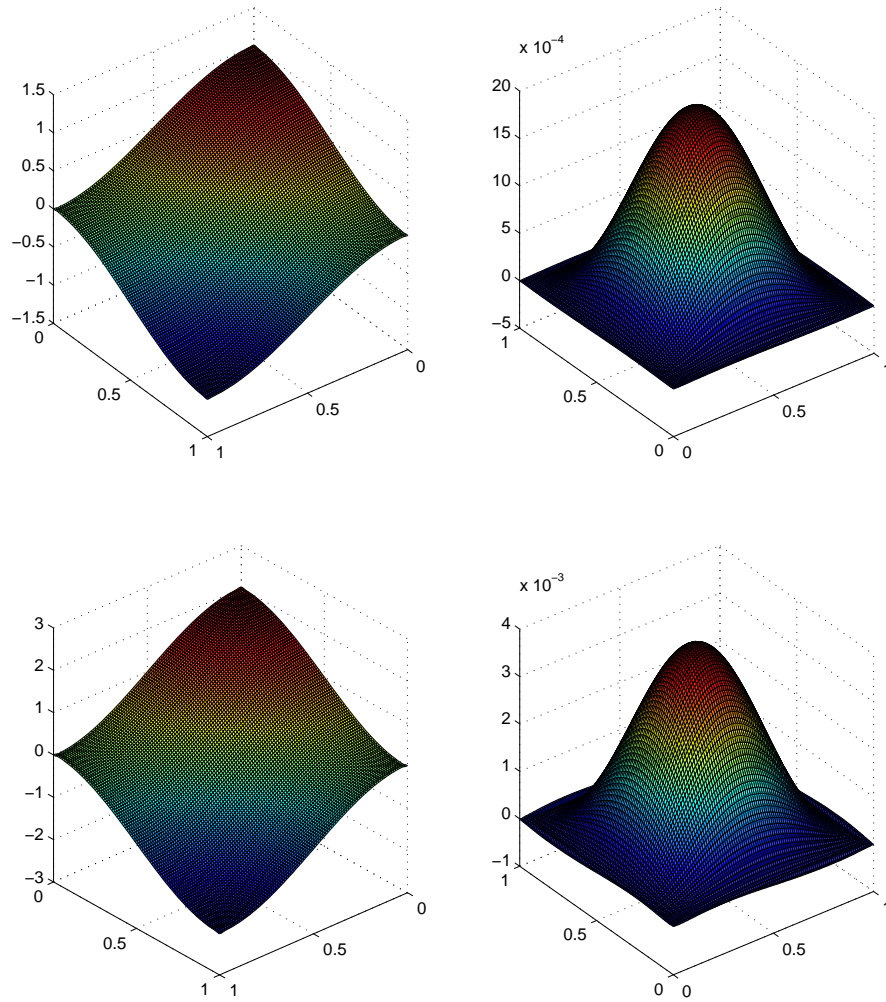


Figure 8.1: Courbe de ρ (droite) et c (gauche) pour $t = 0.5$ (en haut) et $t = 1$ (en bas) avec $\Delta x = 1/100$.

ρ et de 1.1915 à 1.1719 pour la concentration c . Comme le montre le Tableau 8.1, les erreurs relatives, calculées par rapport à la norme $\|\cdot\|_{L^2(\Omega)}$, diminuent proportionnellement à la finesse de la discrétisation. Par ailleurs, celles-ci évoluent légèrement entre $t = 0.5$ et $t = 1$ à cause d'un nombre plus important d'itérations, et donc d'erreurs d'interpolation aux bords. Par ailleurs, nous constatons que l'approximation de ρ est moins bonne que celle de c . Cette différence provient du terme $\rho \nabla c$ présent dans la première équation. On utilise donc l'approximation de ρ dans la construction même des fonctions S_j^1 , alors que les fonctions S_j^2 ne font intervenir que des constantes. Ainsi, nous obtenons une convergence globale d'ordre 1 en espace et 0.5 en temps d'après la relation $\Delta t = \Delta x^2$.

Influence des paramètres

Nous voulons maintenant étudier l'influence des perturbations faites sur les opérateurs F et G sur ces erreurs relatives. Comme nous l'avons fait dans le cas d'équations elliptiques (Chapitre 7) ou

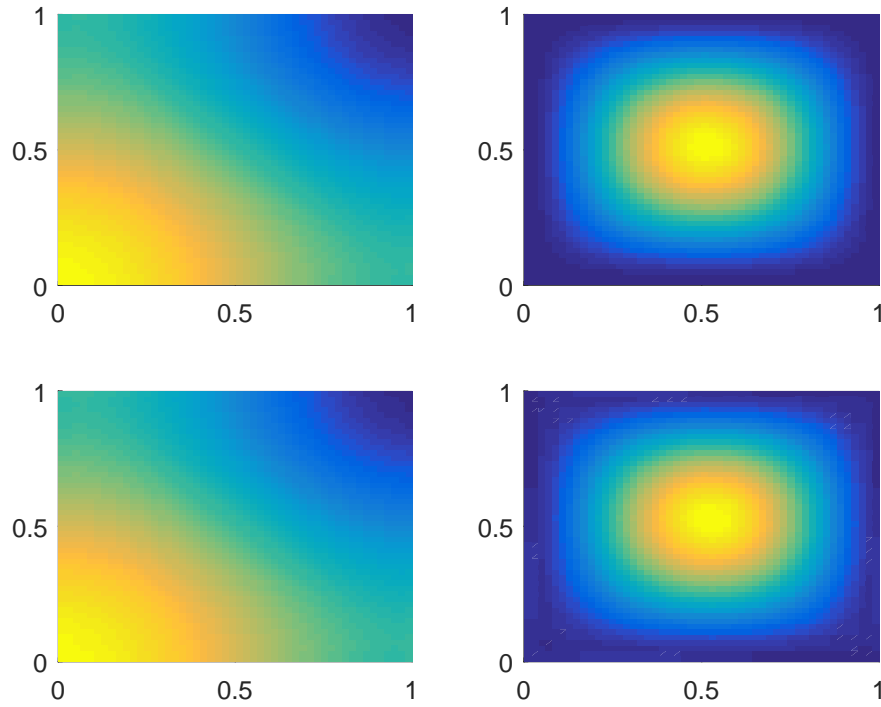


Figure 8.2: Vue de dessus des courbe de ρ (droite) et c (gauche) pour $t = 0.5$ (en haut) et $t = 1$ (en bas) avec $\Delta x = 1/100$.

$t = 0.5$	Δx	Err_ρ	Err_c	$t = 1$	Δx	Err_{ρ_1}	Err_{ρ_2}
	1/25	0.0424	0.0104		1/25	0.1180	0.0139
	1/50	0.0151	0.0061		1/50	0.0557	0.0085
	1/75	0.0107	0.0027		1/75	0.0417	0.0038
	1/100	0.0072	0.0026		1/100	0.0282	0.0036
	1/150	0.0048	0.0015		1/150	0.0191	0.0021
	1/200	0.0037	0.0010		1/200	0.0145	0.0014

Table 8.1: Relation entre la discrétisation et l'erreur relative à ρ et c .

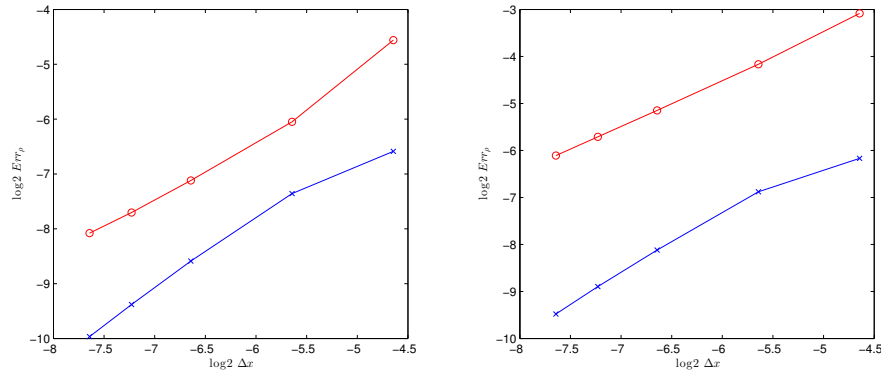


Figure 8.3: Relation entre l'erreur relative et la discrétisation à $t = 0.5$ (gauche) et $t = 1$ (droite) pour ρ (cercles rouges) et c (croix bleues), , pentes de l'ordre de 1 à 1.5.

P_F	$t = 0.5$		$t = 1$		P_G	$t = 0.5$		$t = 1$	
	Err_ρ	Err_c	Err_ρ	Err_c		Err_ρ	Err_c	Err_ρ	Err_c
0	0.0151	0.0061	0.0557	0.0085	0	0.0151	0.0061	0.0557	0.0085
5	0.0518	0.0061	0.0759	0.0085	5	0.0158	0.0514	0.0520	0.0585
10	0.1002	0.0061	0.1153	0.0085	10	0.0164	0.1000	0.0611	0.1000
15	0.1490	0.0061	0.1614	0.0085	15	0.0170	0.1506	0.0639	0.1507

Table 8.2: Variation de l'erreur en fonction de $P_F(en\%)$ (à gauche) et de $P_G(en\%)$ (à droite).

d'équations de réaction-diffusion (Chapitre 6), l'étude de ces perturbations est importante en vue de la Partie III dans laquelle nous nous intéressons à des systèmes d'équations couplées. Pour cela, nous choisissons $\Delta \mathbf{x} = 1/50$ et conservons les autres paramètres. Comme le montre le Tableau 8.2, nous obtenons à nouveau des évolutions d'erreur relatives proportionnelles au pourcentage de perturbation du second membre tout en conservant la stabilité de la méthode. Conformément aux résultats obtenus sans perturbation, la perturbation portant sur la première équation influe sur l'approximation de ρ mais est négligeable pour c . À l'inverse, la présence du terme $\rho \nabla c$ dans la première équation induit également une erreur sur ρ lorsque l'on perturbe l'opérateur G dans la seconde équation. L'erreur commise sur l'approximation de c se retrouve donc également lors de la résolution de la première équation.

4.2 Application à un problème réel

Nous allons maintenant traiter un problème réel et comparer nos résultats avec ceux obtenus par Y. Epshteyn [59]. Pour cela, nous choisissons F et G nuls, $\mu = 1$ et $\chi = 1$. On se place dans $\Omega = (-0.5; 0.5) \times (-0.5; 0.5)$ et nous initialisons les densités ρ et c telles que:

$$\rho(x, y, 0) = 1000 \exp(-100((x - 0.15)^2 + (y - 0.15)^2)), \quad c(x, y, 0) = 0. \quad (8.34)$$

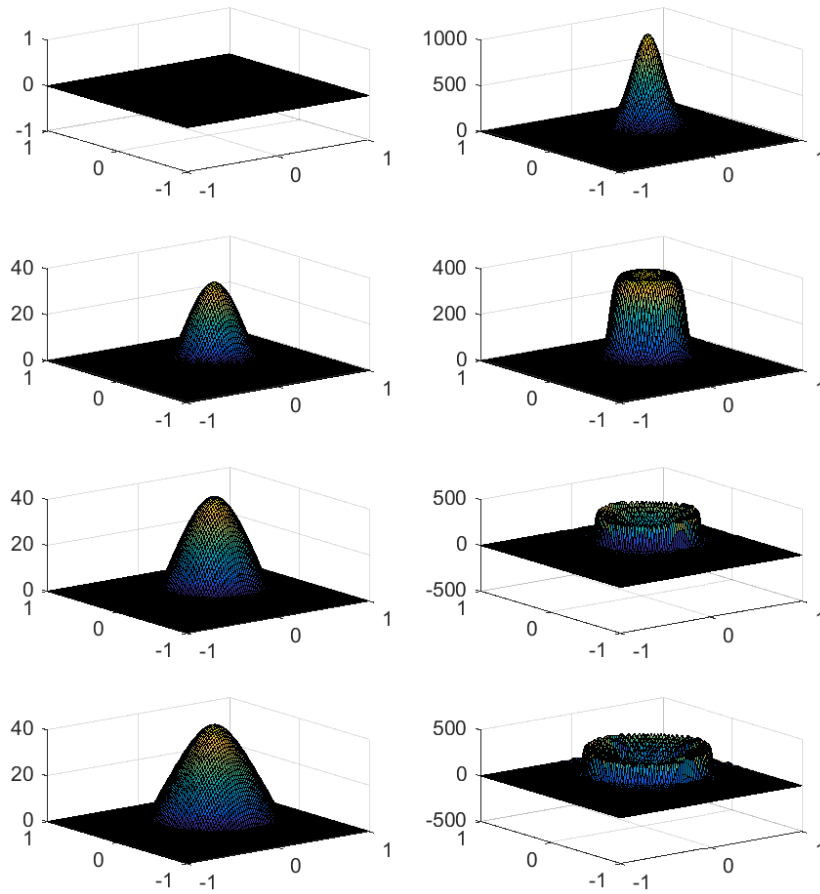


Figure 8.4: Courbe de c (gauche) et de ρ (droite) pour $t = 0$, $t = 0.05$, $t = 0.1$ et $t = 0.150$ (de haut en bas) avec $\Delta x = 1/100$.

$\Delta \mathbf{x}$	Err_ρ	Err_c
1/30	0.4291	0.2014
1/50	0.0901	0.0406
1/70	0.00331	0.0150
1/100	0.00117	0.054
1/150	0.0037	0.0018
1/200	0.0017	0.0008

Table 8.3: Erreur à posteriori par rapport à ρ_{app} et c_{app} à $t = 0.1$.

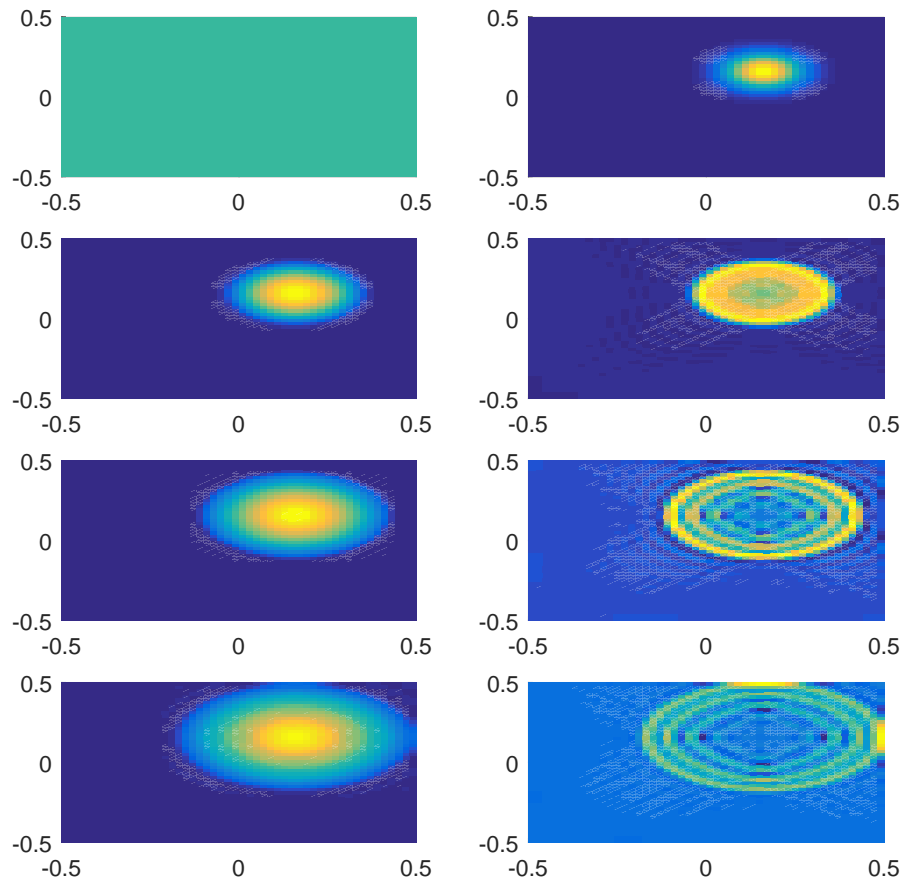


Figure 8.5: Vue de dessus des courbes de c (gauche) et de ρ (droite) pour $t = 0$, $t = 0.05$, $t = 0.1$ et $t = 0.150$ (de haut en bas) avec $\Delta x = 1/100$.

Estimation de l'ordre de convergence

Comme le montrent les Figures 8.4 et 8.5, nous obtenons une solution ρ comportant de très fortes pentes et un changement rapide de forme entre $t = 0$ et $t = 0.05$ avant de se propager à la manière des ondulations observables lors de la chute d'un corps sur une surface de fluide au repos. La concentration c atteint quant à elle un pic entre $t = 0$ et $t = 0.05$ avant de se diffuser tout en conservant son maximum.

Pour avoir une estimation de la précision et de la stabilité de notre méthode, nous estimons les erreurs à posteriori. Pour cela, nous allons effectuer une simulation allant jusqu'à $t = 0.1$ et considérer les solutions approchées obtenues avec $\Delta \mathbf{x} = 1/250$, notées ρ_{app} et c_{app} , comme étant la solution de référence. Nous calculons ensuite l'erreur obtenue à un instant t fixé telle que:

$$Err_{\rho} = \frac{\|\rho_{app} - \rho\|_{L^2(\Omega)}}{\|\rho_{app}\|_{L^2(\Omega)}}. \quad (8.35)$$

Comme le montre le Tableau 8.3, nous obtenons des résultats d'ordre de grandeurs comparables à ceux obtenus avec l'exemple aux données connues, soit une convergence globale d'ordre 1 en espace et 0.5 en temps d'après la relation $\Delta t = \Delta \mathbf{x}^2$. Ces résultats sont comparés avec une solution approchée, dont l'erreur exacte n'est pas connue. On note également que les erreurs sont plus importantes pour la fonction ρ que pour la fonction c , encore une fois à cause du terme $c\nabla\rho$ présent dans la première équation du système (8.31). Enfin, pour cet exemple, une discrétisation plus grossière que $\Delta \mathbf{x} = 1/30$ induit une divergence du modèle. Cela est dû aux changements rapides de formes et d'ordre de grandeur des solutions ρ et c . Cela se traduit par des erreurs Err_{ρ} et Err_c très importantes pour $\Delta \mathbf{x} = 1/30$.

Influence des paramètres

Nous nous intéressons maintenant à l'influence des paramètres μ et χ sur l'évolution du système. Nous avons donc dans un premier temps fait varier μ entre 2 et 8 (Figures 8.6-8.8). Ce changement accélère la décroissance des deux fonctions c et ρ . Le changement est important concernant la fonction ρ et faible pour la fonction c . Nous retrouvons un comportement similaire en faisant varier la fonction χ (Figures 8.9-8.11), mais cette fois c'est la fonction c qui est impactée par le paramètre χ , tandis que l'impact est négligeable concernant ρ .

Conclusion

Ce chapitre nous a permis d'adapter une LBM au traitement de systèmes d'équations différentielles. En particulier, nous nous sommes intéressés à des systèmes constitués de deux équations de type réaction-diffusion, comme c'est le cas pour le modèle de Patlak-Keller-Segel. A nouveau, l'ordre de convergence en espace se situe entre 1 et 2, et les perturbations des termes sources apportent des erreurs proportionnelles au coefficient de perturbation. La stabilité de la méthode est donc vérifiée.

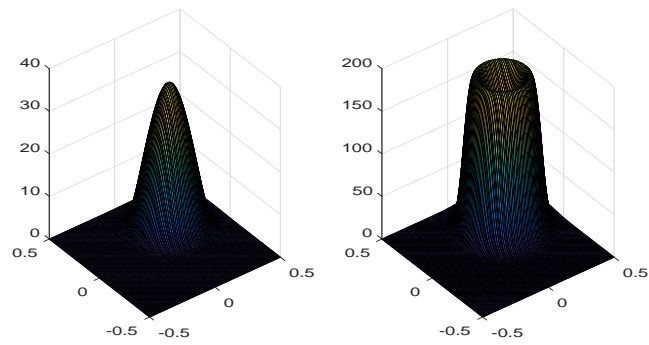


Figure 8.6: Evolution de c (gauche) et de ρ (droite) à $t = 0.1$ pour $\chi = 1$ et $\mu = 2$.

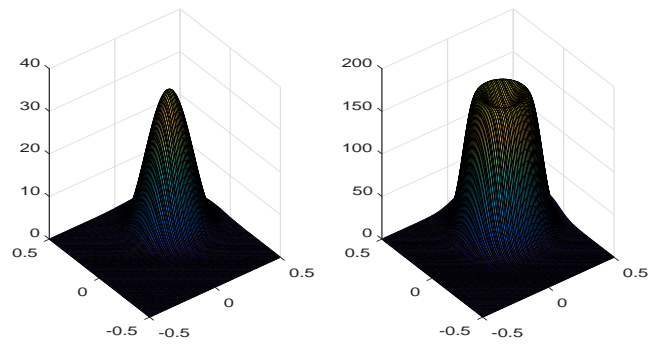


Figure 8.7: Evolution de c (gauche) et de ρ (droite) à $t = 0.1$ pour $\chi = 1$ et $\mu = 4$.

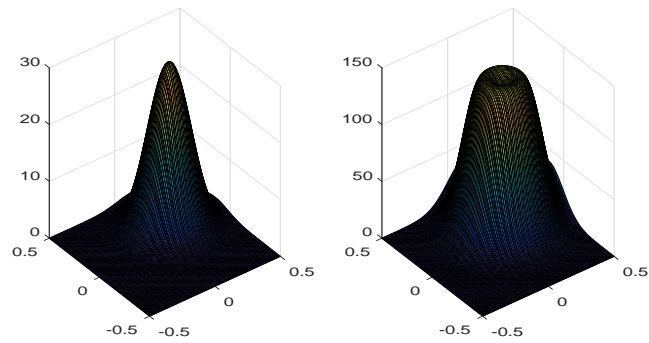


Figure 8.8: Evolution de c (gauche) et de ρ (droite) à $t = 0.1$ pour $\chi = 1$ et $\mu = 8$.

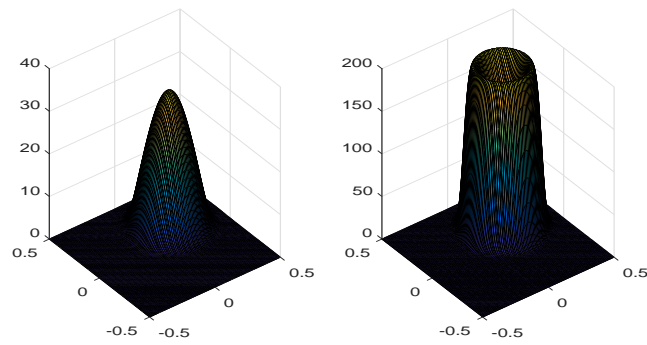


Figure 8.9: Evolution de c (gauche) et de ρ (droite) à $t = 0.1$ pour $\mu = 1$ et $\chi = 2$.

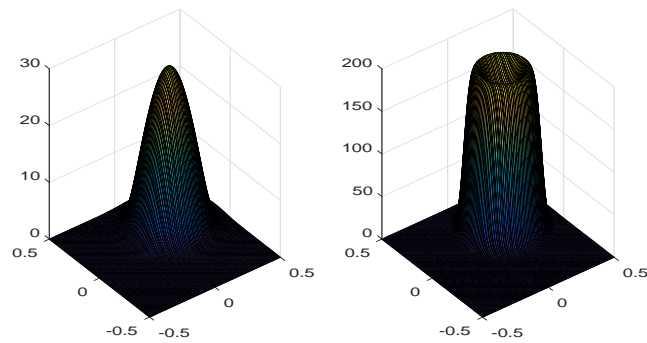


Figure 8.10: Evolution de c (gauche) et de ρ (droite) à $t = 0.1$ pour $\mu = 1$ et $\chi = 4$.

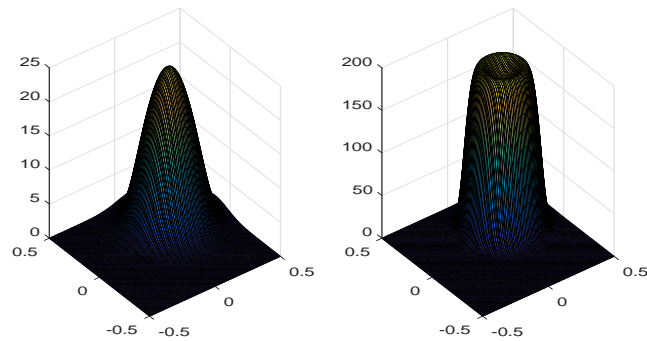


Figure 8.11: Evolution de c (gauche) et de ρ (droite) à $t = 0.1$ pour $\mu = 1$ et $\chi = 8$.

9 Méthode de Boltzmann pour des équations différentielles à variables complexes

Dans ce dernier chapitre nous nous intéressons au traitement de problèmes à variables complexes. Pour cela, nous adaptons notre méthode en nous basant sur la méthode proposée dans [122] afin de simuler l'évolution d'amplitudes des fonctions d'ondes ρ dans le cadre d'un problème d'optique. Ces amplitudes sont régies par l'équation de Schrödinger non-linéaire. Les phénomènes de diffraction et de dispersion y sont modélisés à travers le laplacien, et les non-linéarités dues à la relation entre l'indice de réfraction et l'intensité lumineuse sont modélisés par l'opérateur $F(\rho)$. Dans notre cas, nous traitons le cas d'équation focalisante [124], [82], avec les données présentées dans [66]. Ce chapitre a été notamment motivé par une présentation donnée à la 4e journée IRMAR-FOTON du 12 novembre 2015 dans le cadre d'étude de phénomènes de *self-trapping*.

1 Définition du problème

On considère le problème non-linéaire de réaction-diffusion à variables complexes suivant (pour $\mathbf{x}, t \in \mathcal{Q} = \Omega \times (0, T)$):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \operatorname{div} \mathbf{B}(\rho) = \operatorname{div}(\nu \nabla D(\rho)) + F(\rho; \mathbf{x}, t), \quad (9.1)$$

où $\Omega \subset \mathbb{C}^2$, $T > 0$, $\mathbf{B} = (B_1, B_2)$ est un opérateur non-linéaire de transport, D est un opérateur non-linéaire de diffusion, $\nu = \nu(\mathbf{x}, t)$ est le coefficient de diffusion. F est un opérateur non-linéaire de type source. On suppose que ρ respecte la conditions aux bords de type Robin, pour $\mathbf{x} \in \Sigma = \partial\Omega \times (0, T)$:

$$\alpha_1 \rho(\mathbf{x}, t) + \alpha_2 \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}, t) = F_\rho(\mathbf{x}, t), \quad (9.2)$$

où F_ρ est une fonction connue, et $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$. La fonction ρ vérifie également la condition initiale:

$$\rho(\mathbf{x}, 0) = \rho^0(\mathbf{x}), \quad (9.3)$$

où ρ^0 est une fonction connue. En reprenant les variables définies par les équations(4.3), (4.4) et (4.5) dans la section 1 du Chapitre 4, on obtient facilement l'équation adimensionnelle suivante

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial \tilde{t}}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) + \tilde{\operatorname{div}} \tilde{\mathbf{B}}(\tilde{\rho}) = \tilde{\operatorname{div}} \left(\tilde{\nu} \tilde{\nabla} \tilde{D}(\tilde{\rho}) \right) + \tilde{F}(\tilde{\rho}; \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}). \quad (9.4)$$

Dans la suite on omettra les "˜" afin d'alléger les notations.

2 Définition de la méthode

La méthode de Boltzmann associée à ce type d'équation fait intervenir deux équations de Boltzmann sur réseau. Elles portent respectivement sur la partie réelle g et la partie imaginaire h des fonctions de répartition particulière f telle que:

$$f_j(\mathbf{x}, t) = g_j(\mathbf{x}, t) + ih_j(\mathbf{x}, t). \quad (9.5)$$

Nous appliquons également cette notation aux fonctions de répartition d'équilibre f_j^{eq} et aux termes source F_j , en associant respectivement les fonctions g_j^{eq} et G_j à la partie réelle de f_j^{eq} et F_j , et les fonctions h_j^{eq} et H_j à la partie imaginaire de f_j^{eq} et F_j :

$$f_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = g_j^{eq}(\mathbf{x}, t) + ih_j^{eq}(\mathbf{x}, t), \quad (9.6)$$

$$F_j(\mathbf{x}, t) = G_j(\mathbf{x}, t) + iH_j(\mathbf{x}, t), \quad (9.7)$$

La partie réelle de l'équation de Boltzmann sur réseau est donnée par:

$$\begin{aligned} g_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) = & g_j(\mathbf{x}, t) - \omega_1 (g_j(\mathbf{x}, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \omega_2 (h_j(\mathbf{x}, t) - h_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) \\ & + \Delta t G_j(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right) G_j(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (9.8)$$

et sa partie imaginaire est donnée par:

$$\begin{aligned} h_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j \Delta t, t + \Delta t) = & h_j(\mathbf{x}, t) - \omega_2 (g_j(\mathbf{x}, t) - g_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) - \omega_1 (h_j(\mathbf{x}, t) - h_j^{eq}(\mathbf{x}, t)) \\ & + \Delta t H_j(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla \right) H_j(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (9.9)$$

Dans ces deux équations les variables ω_1 et ω_2 sont liées au taux de relaxation τ par la relation:

$$\omega_1 + i\omega_2 = \frac{1}{\tau} = \omega, \quad (9.10)$$

avec $\tau = \tau_1 + i\tau_2$ tel que:

$$\tau_1 = \frac{\nu_1}{C_s^2 \Delta t} + \frac{1}{2}, \quad \tau_2 = \frac{\nu_2}{C_s^2 \Delta t}, \quad (9.11)$$

où $\nu_1 = \Re(\nu)$ et $\nu_2 = \Im(\nu)$. Nous définissons les fonctions f_j^{eq} et F_j par:

$$\begin{aligned} f_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = & w_j \left(\rho(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{C_s^2} (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{B}(\rho)) \right. \\ & \left. + \frac{1}{2C_s^4} (\mathbf{C}(\rho) - C_s^2 \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{I}_d) : (\mathbf{e}_j \mathbf{e}_j - C_s^2 \mathbf{I}_d) \right), \end{aligned} \quad (9.12)$$

et

$$F_j(\mathbf{x}, t) = w_j F(\rho; \mathbf{x}, t) \quad (9.13)$$

Ainsi, comme dans le Chapitre 6, on a les propriétés:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^8 f_j(\mathbf{x}, t) &= \sum_{j=0}^8 f_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t), \\ \sum_{j=0}^8 F_j(\mathbf{x}, t) &= F(\rho; \mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (9.14)$$

$$\sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j f_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{B}(\rho), \quad \sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j F_j(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (9.15)$$

et

$$\sum_{j=0}^8 \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j f_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{C}(\rho). \quad (9.16)$$

Proposition 9.1 .

Soient f_j^{eq} les fonctions de distribution d'équilibre définies par l'équation (9.6), F_j les termes sources définis par l'équation (9.7) vérifiant les propriétés (9.14)-(9.16), et ω_1 et ω_2 les taux de relaxation définis par l'équation (9.11). Alors la résolution des deux équations de Boltzmann sur réseau (9.9)-(9.8) permet de recomposer les quantités macroscopiques solutions de l'équation de type réaction-diffusion non-linéaire à variables complexes (9.1) avec une erreur de l'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$.

Proof. Comme dans le cas des équations couplées Chapitre 8, nous aurons des fonctions de recombinaison associées à chacune des équations de Boltzmann sur réseau (9.8) et (9.9). Les fonctions $\mathcal{P}_j^{(n)}$ sont associées à la partie réelle et les fonctions $\mathcal{Q}_j^{(n)}$ à la partie imaginaire. Le but est de montrer que les compositions $\mathcal{P}_j^{(n)} + i\mathcal{Q}_j^{(n)}$ permet de retrouver le développement de Chapman-Enskog défini dans le Chapitre 6 pour des équations de type réaction-diffusion à valeurs réelles. Afin d'obtenir une précision d'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$, compte tenu de la nature du problème nous prendrons un développement d'ordre 1 en espace et d'ordre 2 en temps. Soit:

$$\begin{aligned} g_j &= g_j^{(0)} + \varepsilon g_j^{(1)} + \varepsilon^2 g_j^{(2)} + \mathcal{O}(\varepsilon^3), \\ h_j &= h_j^{(0)} + \varepsilon h_j^{(1)} + \varepsilon^2 h_j^{(2)} + \mathcal{O}(\varepsilon^3), \\ G_j &= \varepsilon G_j^{(1)}, \quad H_j = \varepsilon H_j^{(1)}, \\ \frac{\partial}{\partial t} &= \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2}, \quad \nabla = \varepsilon \nabla_1, \end{aligned} \quad (9.17)$$

où les fonctions de répartitions $g_j^{(n)}$ et $h_j^{(n)}$ vérifient l'équation (4.13) pour $n > 0$, et où $g_j^{(0)} = g_j^{eq}$ et $h_j^{(0)} = h_j^{eq}$. A partir de ce développement, on définit les fonctions $\mathcal{P}_j^{(n)}$ et $\mathcal{Q}_j^{(n)}$ pour $n = 0, 1, 2$ telles que:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_j^{(0)} &= \omega_1 \left(g_j^{(0)} - g_j^{eq} \right) - \omega_2 \left(h_j^{(0)} - h_j^{eq} \right), \quad \mathcal{Q}_j^{(0)} = \omega_2 \left(g_j^{(0)} - g_j^{eq} \right) + \omega_1 \left(h_j^{(0)} - h_j^{eq} \right), \\
\mathcal{P}_j^{(1)} &= \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{eq} + \omega_1 g_j^{(1)} - \omega_2 h_j^{(1)} - \Delta t G_j^{(1)}, \\
\mathcal{Q}_j^{(1)} &= \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) h_j^{eq} + \omega_2 g_j^{(1)} + \omega_1 h_j^{(1)} - \Delta t H_j^{(1)}, \\
\mathcal{P}_j^{(2)} &= \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{(1)} + \left(\Delta t \frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 \right) g_j^{eq} \\
&\quad + \omega_1 g_j^{(2)} - \omega_2 h_j^{(2)} - \frac{\Delta t^2}{2} \left(\mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 + \frac{\partial}{\partial t_1} \right) G_j^{(1)}, \\
\mathcal{Q}_j^{(2)} &= \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) h_j^{(1)} + \left(\Delta t \frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 \right) h_j^{eq} \\
&\quad + \omega_2 g_j^{(2)} + \omega_1 h_j^{(2)} - \frac{\Delta t^2}{2} \left(\mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 + \frac{\partial}{\partial t_1} \right) H_j^{(1)}.
\end{aligned} \tag{9.18}$$

Par conséquent (d'après les définitions des fonctions f_j , F_j , τ et ω), on a :

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_j^{(0)} + i\mathcal{Q}_j^{(0)} &= \omega_1 \left(g_j^{(0)} - g_j^{eq} \right) - \omega_2 \left(h_j^{(0)} - h_j^{eq} \right) + i \left(\omega_2 \left(g_j^{(0)} - g_j^{eq} \right) + \omega_1 \left(h_j^{(0)} - h_j^{eq} \right) \right) \\
&= \omega_1 \left(g_j^{eq} + ih_j^{eq} - \left(g_j^{(0)} + ih_j^{(0)} \right) \right) + \omega_2 \left(h_j^{(0)} - ig_j^{(0)} - \left(h_j^{eq} - ig_j^{eq} \right) \right) \\
&= \omega_1 \left(g_j^{eq} + ih_j^{eq} - \left(g_j^{(0)} + ih_j^{(0)} \right) \right) + \frac{\omega_2}{i} \left(g_j^{(0)} + ih_j^{(0)} - \left(g_j^{eq} + ih_j^{eq} \right) \right) \\
&= \omega_1 \left(g_j^{eq} + ih_j^{eq} - \left(g_j^{(0)} + ih_j^{(0)} \right) \right) - \frac{\omega_2}{i} \left(g_j^{eq} + ih_j^{eq} - \left(g_j^{(0)} + ih_j^{(0)} \right) \right) \\
&= (\omega_1 + i\omega_2) \left(f_j^{eq} - f_j^{(0)} \right) \\
&= \frac{1}{\tau} \left(f_j^{eq} - f_j^{(0)} \right),
\end{aligned} \tag{9.19}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_j^{(1)} + i\mathcal{Q}_j^{(1)} &= \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{eq} + \omega_1 g_j^{(1)} - \omega_2 h_j^{(1)} - \Delta t G_j^{(1)} \\
&\quad + i \left(\Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) h_j^{eq} + \omega_2 g_j^{(1)} + \omega_1 h_j^{(1)} - \Delta t H_j^{(1)} \right) \\
&= \omega_1 \left(g_j^{(1)} + ih_j^{(1)} \right) - \omega_2 \left(h_j^{(1)} + ig_j^{(1)} \right) - \Delta t \left(G_j^{(1)} + iH_j^{(1)} \right) \\
&\quad + \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) \left(g_j^{eq} + ih_j^{eq} \right) \\
&= \frac{1}{\tau} f_j^{(1)} - \Delta t F_j^{(1)} + \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) f_j^{eq},
\end{aligned} \tag{9.20}$$

et enfin, à l'ordre 2 nous retrouvons aussi la même expression que pour des équations différentielles

non-linéaires à variables réelles:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_j^{(2)} + i\mathcal{Q}_j^{(2)} &= \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{(1)} + \left(\Delta t \frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 \right) g_j^{eq} \\
&\quad + \omega_1 g_j^{(2)} - \omega_2 h_j^{(2)} - \frac{\Delta t^2}{2} \left(\mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 + \frac{\partial}{\partial t_1} \right) G_j^{(1)}, \\
&\quad + i \left(\Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) h_j^{(1)} + \left(\Delta t \frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right)^2 \right) h_j^{eq} \right. \\
&\quad \left. + \omega_2 g_j^{(2)} + \omega_1 h_j^{(2)} - \frac{\Delta t^2}{2} \left(\mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 + \frac{\partial}{\partial t_1} \right) H_j^{(1)} \right)
\end{aligned} \tag{9.21}$$

En suivant le même raisonnement comme pour obtenir la fin de la preuve de la Proposition 6.1, on obtient avec une erreur d'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$:

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta t^2}{2} \left(\mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 + \frac{\partial}{\partial t_1} \right)^2 g_j^{eq} &= \frac{\Delta t}{2} \left(\mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 + \frac{\partial}{\partial t_1} \right) \left(-\omega_1 g_j^{(1)} + \omega_2 h_j^{(1)} + \Delta t G_j^{(1)} \right). \\
\frac{\Delta t^2}{2} \left(\mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 + \frac{\partial}{\partial t_1} \right)^2 h_j^{eq} &= \frac{\Delta t}{2} \left(\mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 + \frac{\partial}{\partial t_1} \right) \left(-\omega_2 g_j^{(1)} - \omega_1 h_j^{(1)} + \Delta t H_j^{(1)} \right).
\end{aligned} \tag{9.22}$$

On utilise cette substitution dans l'équation précédente (9.21) pour obtenir:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_j^{(2)} + i\mathcal{Q}_j^{(2)} &= \Delta t \left(1 - \frac{\omega_1}{2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) g_j^{(1)} + \Delta t \frac{\partial g_j^{eq}}{\partial t_2} \\
&\quad + \frac{\Delta t \omega_2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) h_j^{(1)} + \omega_1 g_j^{(2)} - \omega_2 h_j^{(2)}, \\
&\quad + i \left(\Delta t \left(1 - \frac{\omega_1}{2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) h_j^{(1)} + \Delta t \frac{\partial h_j^{eq}}{\partial t_2} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\Delta t \omega_2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) \left(g_j^{(1)} + \omega_2 g_j^{(2)} + \omega_1 h_j^{(2)} \right) \right) \\
&= \Delta t \left(1 - \frac{\omega_1}{2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) \left(g_j^{(1)} + i h_j^{(1)} \right) + \Delta t \frac{\partial (g_j^{eq} + i h_j^{eq})}{\partial t_2} \\
&\quad + \frac{\Delta t \omega_2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) \left(h_j^{(1)} - i g_j^{(1)} \right) + \omega_1 \left(g_j^{(2)} + i h_j^{(1)} \right) - \omega_2 \left(h_j^{(2)} - i g_j^{(2)} \right) \\
&= \Delta t \left(1 - \frac{\omega_1}{2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) f_j^{(1)} + \Delta t \frac{\partial f_j^{(eq)}}{\partial t_2} \\
&\quad - i \frac{\Delta t \omega_2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) f_j^{(1)} + \omega_1 f_j^{(2)} + i \omega_2 f_j^{(2)} \\
&= \Delta t \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) f_j^{(1)} + \Delta t \frac{\partial f_j^{(eq)}}{\partial t_2} + \frac{1}{\tau} f_j^{(2)}.
\end{aligned} \tag{9.23}$$

D'après les équations (9.19), (9.20) et (9.23) nous pouvons nous replacer dans le contexte du

développement de Chapman-Enskog du Chapitre 6, tel que:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_j^{(0)} + i\mathcal{Q}_j^{(0)} &= \frac{1}{\tau} \left(f_j^{eq} - f_j^{(0)} \right), \\
\mathcal{P}_j^{(1)} + i\mathcal{Q}_j^{(1)} &= \frac{1}{\tau} f_j^{(1)} - \Delta t F_j^{(1)} + \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) f_j^{eq}, \\
\mathcal{P}_j^{(2)} + i\mathcal{Q}_j^{(2)} &= \Delta t \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_j \cdot \nabla_1 \right) f_j^{(1)} + \Delta t \frac{\partial f_j^{(eq)}}{\partial t_2} + \frac{1}{\tau} f_j^{(2)}.
\end{aligned} \tag{9.24}$$

On retrouve les équations (6.27) définies dans le Chapitre 6. On obtient ainsi avec une erreur de l'ordre de $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$:

$$\begin{aligned}
\sum_{j=0}^8 \left(\left(\mathcal{P}_j^{(0)} + i\mathcal{Q}_j^{(0)} \right) + \varepsilon \left(\mathcal{P}_j^{(1)} + i\mathcal{Q}_j^{(1)} \right) + \varepsilon^2 \left(\mathcal{P}_j^{(2)} + i\mathcal{Q}_j^{(2)} \right) \right) \\
= \varepsilon \left(\frac{\partial \rho}{\partial t_1} + \operatorname{div}_1 \mathbf{B}(\rho) - F^{(1)} \right) + \varepsilon^2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial t_2} \rho - \operatorname{div}_1(\nu \nabla_1 D(\rho)) \right) \\
= \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} \right) \rho + \varepsilon \operatorname{div}_1 \mathbf{B}(\rho) - \varepsilon^2 \operatorname{div}_1(\nu \nabla_1 D(\rho)) - \varepsilon F^{(1)} \\
= \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{B}(\rho) - \operatorname{div}(\nu \nabla D(\rho)) - F(\rho) \\
= 0,
\end{aligned} \tag{9.25}$$

ce qui fait la preuve. \square

3 Application à l'équation de Schrödinger non-linéaire

Afin de valider notre méthode de Boltzmann sur réseau pour le traitement d'équation à solution dans \mathbb{C} , nous nous plaçons dans un domaine $\tilde{\Omega} = (0, 1) \times (0, 1) \times (0, 1)$. Nous considérons l'équation de Schrödinger non-linéaire, dont les résultats d'existence et d'unicité de la solution ont été démontrés par Tosio Kato (voir [88], [127]). L'équation de Schrödinger non-linéaire est définie pour tout $\mathbf{x} \in \tilde{\Omega}$ par:

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial z}(x, y, z) + \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi(x, y, z) + \lambda |\Psi(x, y, z)|^2 \Psi(x, y, z) = 0. \tag{9.26}$$

Nous étudions alors les solutions en évoluant selon l'axe z au cours du temps t . Cela revient à effectuer un changement de variable où l'on se place dans un domaine $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ dans un intervalle de temps $(0, 1)$. On peut donc réécrire l'équation (9.26), pour $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, 1)$, telle que:

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \Delta \Psi(\mathbf{x}, t) + \lambda |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 \Psi(\mathbf{x}, t) = 0. \tag{9.27}$$

Enfin, nous multiplions l'équation (9.27) par i afin d'obtenir l'équation:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t}(\mathbf{x}, t) = i \Delta \Psi(\mathbf{x}, t) + i \lambda |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 \Psi(\mathbf{x}, t), \tag{9.28}$$

où nous avons des conditions aux bords de Dirichlet pour $\mathbf{x} \in \partial\Omega$

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = A \exp^{-i(2\pi m x)} \operatorname{sech} \left(2\pi m \left(x - \frac{1}{2} \right) + 8m^2 \pi^2 t \right),$$

que nous traitons en utilisant l'équation (5.27) introduite dans le Chapitre 5, et où la condition initiale est

$$\Psi(\mathbf{x}, 0) = A \exp^{-i(2\pi m x)} \operatorname{sech} \left(2\pi m \left(x - \frac{1}{2} \right) \right).$$

Pour valider nos résultats, nous choisissons $\tau_1 = \frac{1}{2}$ et $\tau_2 = \frac{1}{C_s^2 \Delta t}$. On définit les fonctions d'équilibre f_j^{eq} par:

$$f_j^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_j(\Psi(\mathbf{x}, t)), \quad (9.29)$$

et les fonctions F_j par:

$$F_j(\mathbf{x}, t) = w_j(i\lambda |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 \Psi(\mathbf{x}, t)), \quad (9.30)$$

et nous choisissons λ le scalaire lié à l'amplitude A et à un paramètre de fréquence m de l'onde tel que $\lambda = -8\pi^2 \frac{m^2}{A^2}$. Les phénomènes dits de *self-trapping* sont observables pour $\lambda < 0$, on parle alors d'équation de Schrödinger focalisante dans le cadre de problèmes d'optique. Si l'on définit $\lambda > 0$, l'équation sera défocalisante, c'est par exemple le cas des condensats de Bose-Einstein. L'intensité du faisceau lumineux $\mathcal{I}(t)$ est liée à la fonction d'onde Ψ par:

$$\mathcal{I}(t) = \int_{\Omega} |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}. \quad (9.31)$$

La solution de l'équation (9.28), notée Ψ_{sol} , est

$$\Psi_{sol}(\mathbf{x}, t) = A \exp^{-i(2\pi m x)} \operatorname{sech} \left(2\pi m \left(x - \frac{1}{2} \right) + 8m^2 \pi^2 t \right). \quad (9.32)$$

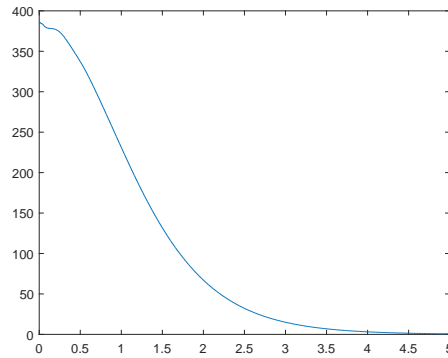


Figure 9.1: Evolution de l'intensité \mathcal{I} au cours du temps.

Estimation de l'ordre de convergence

Nous commençons par effectuer une série de simulations en choisissant $m = 0.1$ et $A = 20$. Comme le montre la Figure 9.1, celle-ci décroît progressivement avec le temps, traduisant la perte d'intensité lumineuse que l'on peut observer selon l'axe z en faisant traverser un tube à un faisceau lumineux.

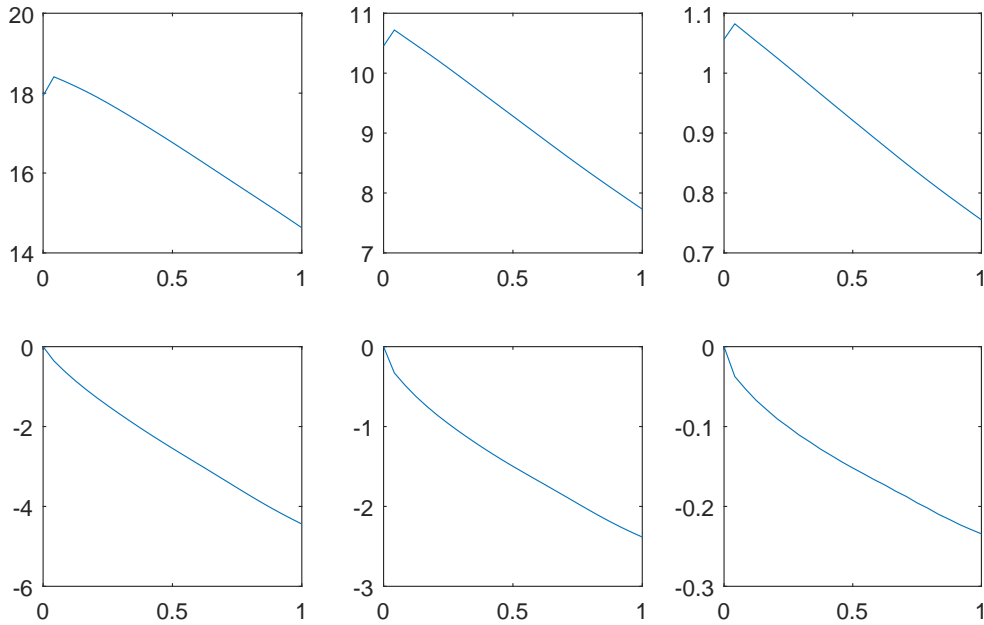


Figure 9.2: Evolution de Ψ au cours du temps: partie réelle (en haut), partie imaginaire (en bas), à $t = 0.5$ (gauche), $t = 2$ (milieu) et $t = 5$ (droite), selon les points $\mathbf{x} = (0.5, y)$.

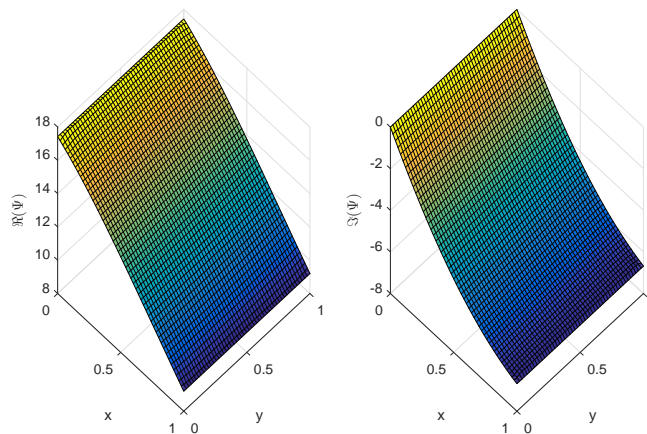


Figure 9.3: Partie réelle et imaginaire de Ψ à $t = 1$.

Nous nous intéressons plus spécifiquement à la fonction Ψ elle-même, et en particulier à sa

t=0.5	Δx	$Err_{\Re(\Psi)}$	$Err_{\Im(\Psi)}$	t=1	Δx	$Err_{\Re(\Psi)}$	$Err_{\Im(\Psi)}$
	1/25	0.0072	0.0215		1/25	0.0084	0.0151
	1/50	0.0032	0.0127		1/50	0.0038	0.0056
	1/75	0.0023	0.0088		1/75	0.0023	0.0037
	1/100	0.0020	0.0067		1/100	0.0018	0.0031
	1/150	0.0017	0.0045		1/150	0.0013	0.0026
	1/200	0.0034	0.0016		1/200	0.0012	0.0022

Table 9.1: Relation entre la discrétisation et l'erreur relative pour les parties réelles et imaginaires de Ψ .

partie réelle et à sa partie imaginaire, dont l'évolution est présentée dans les Figures 9.2-9.3. Ces figures mettent en valeur la nature auto-focalisante de l'équation, et l'on constate que l'intensité \mathcal{I} tend bien vers 0 en temps long. Comme le montre le Tableau 9.1 et la Figure 9.4, l'erreur relative, selon la norme $\|\cdot\|_{L^2(\Omega)}$ est plus importante pour $t = 1$ que pour $t = 0.5$ pour la partie réelle pour une discrétisation trop grossière ($\Delta x \geq 1/75$), tandis qu'elle diminue pour une discrétisation plus fine, ou dans le cas de la partie imaginaire. Les pentes d'erreurs passent ainsi pour la partie réelle de 1.1699 à 1.2107 pour $t = 0.5$ et de 1.1444 à 0.9120 pour $t = 1$, et de 0.7595 à 0.9743 pour $t = 0.5$ et de 1.4310 à 0.8507 pour $t = 1$ pour la partie imaginaire.

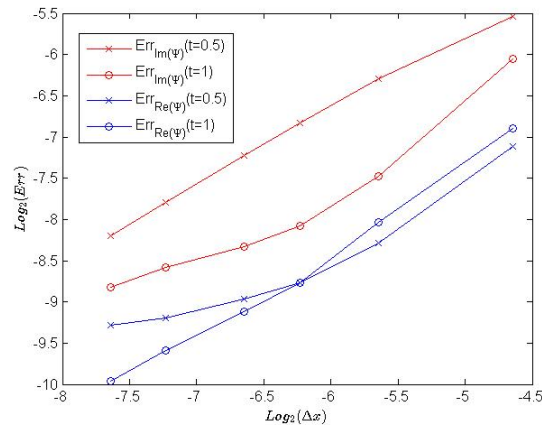
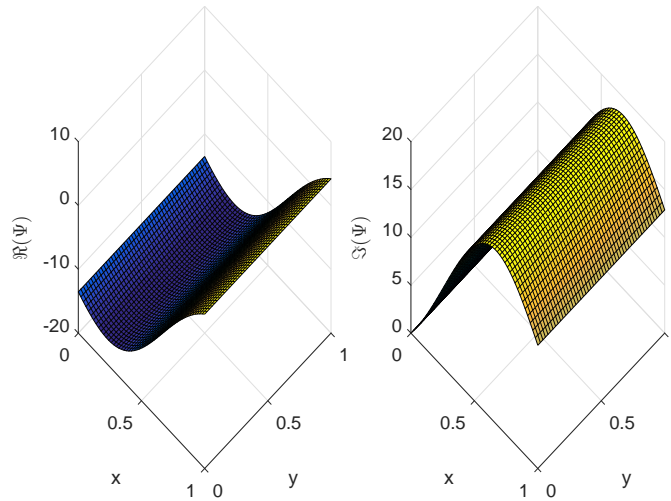
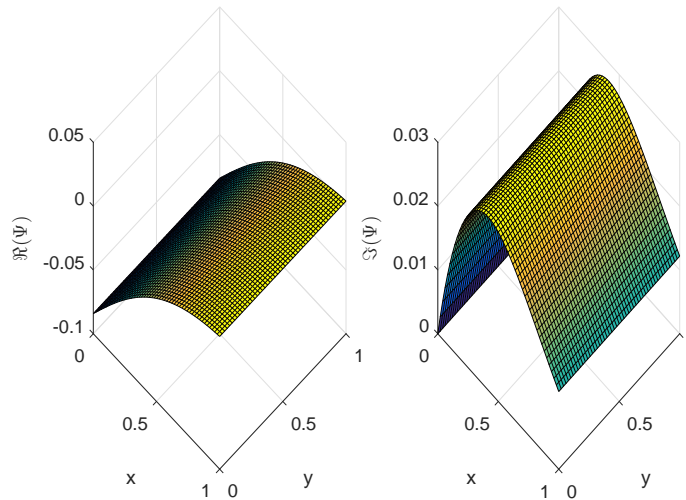


Figure 9.4: Relation entre l'erreur relative et le pas d'espace, pentes de l'ordre de 1, pentes de l'ordre de 1.

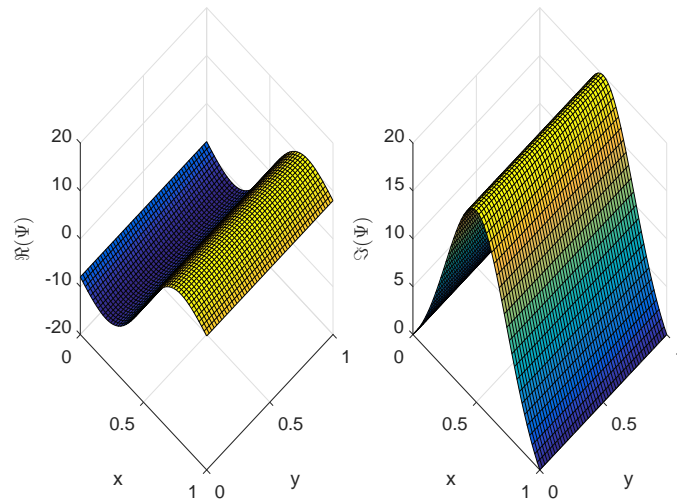
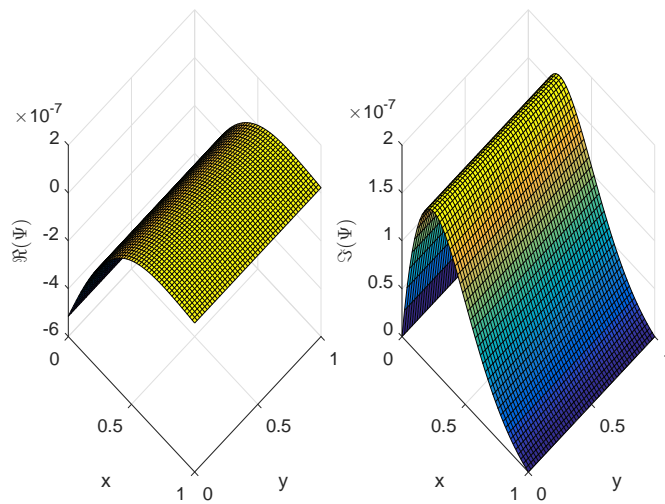
Influence des paramètres

Enfin, on s'intéresse aux paramètres A et m déterminant respectivement l'amplitude et la fréquence des ondes. Le paramètre A ne modifie que l'amplitude de la solution de manière linéaire, d'après la définition (9.32). Il est en revanche intéressant d'observer les variations dans le comportement des ondes induites par le paramètre m . Comme le montre les Figures 9.5-9.8, plus le paramètre m est grand et plus la convergence des parties réelles et imaginaires vers 0 est rapide, et donc plus l'intensité \mathcal{I} tendra rapidement vers 0. En outre, on constate que ce paramètre augmente la fréquence des ondes, et nous avons pratiquement une période complète pour $m = 0.5$ tandis que nous n'avons qu'une partie de la période dans le cas où $m = 0.3$.

Figure 9.5: Partie réelle et imaginaire de Ψ à $t = 0$ avec $m = 0.3$.Figure 9.6: Partie réelle et imaginaire de Ψ à $t = 1$ avec $m = 0.3$.

Conclusion

Dans ce dernier chapitre de la Partie III, nous avons proposé une dernière adaptation de LBM pour traiter des équations à variables complexes. Les résultats obtenus permettent de valider la méthode avec un ordre de convergence en espace de 1, et le comportement observé est réaliste. Cette application n'a pas été davantage développée car nous n'avons pas immédiatement besoin de traiter des applications à variables complexes par la suite. Néanmoins, cette dernière application nous a permis de vérifier l'adaptabilité de notre méthode.

Figure 9.7: Partie réelle et imaginaire de Ψ à $t = 0$ avec $m = 0.5$.Figure 9.8: Partie réelle et imaginaire de Ψ à $t = 1$ avec $m = 0.5$.

Part III

Modélisation et analyse mathématique et numérique de problèmes réalistes en électrophysiologie

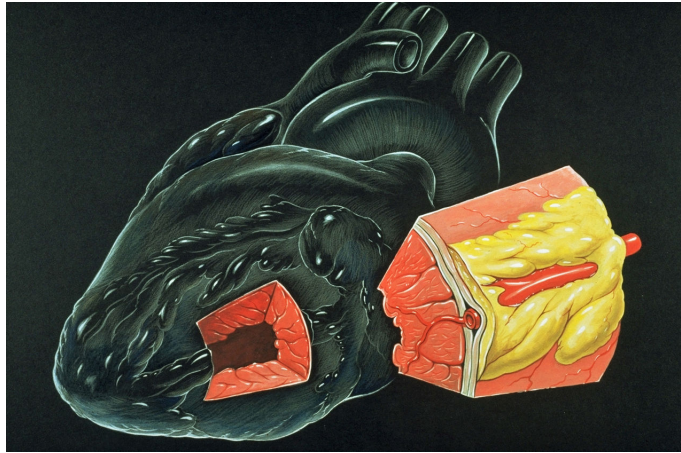


Figure 9.9: Vue en coupe du myocarde.

Dans cette dernière partie, nous nous intéressons à un problème réaliste d'électrocardiographie. En particulier, nous étudions le comportement de potentiels électriques au sein du myocarde. Le myocarde est le tissu musculaire responsable des pulsations du coeur par le biais de contractions rythmées (voir Figure 9.9). Ces pulsations sont engendrées par les ouvertures et fermetures de canaux ioniques de sodium (Na^+) et de potassium (K^+). Ces échanges ioniques induisent des différences de charges électriques de part et d'autre de la membrane. Ces changements activent les potentiels d'actions, qui sont responsables des contractions musculaires entraînant les pulsations du coeur (voir [43], [97]). Ces différents phénomènes ioniques et électriques sont modélisés par le système bidomaine. Ce dernier est composé d'une équation parabolique et d'une équation elliptique couplées permettant d'étudier le potentiel électrique transmembranaire ρ , et le potentiel électrique sortant ρ_e . Ces deux équations font intervenir un opérateur ionique \mathcal{I}_{ion} permettant de tenir compte des changements de concentrations en ions sodium et potassium. Ces changements de concentrations sont quant à eux exprimés à l'aide d'une équation aux dérivées ordinaires portant sur la variable ionique U .

Nous introduisons dans un premier temps la méthode de Boltzmann permettant de traiter le système bidomaine dans le Chapitre 10. Ce premier travail fait suite à une présentation donnée dans le cadre du *2015 AMMCS-CAIMS Congress*, à Waterloo, Canada. Ce chapitre a été publié dans le livre de la conférence, *Mathematical and Computational Approaches in Advancing Modern Science and Engineering* aux éditions Springer, en 2016 [46]. Cette méthode de Boltzmann est détaillée (développement de Chapman-Enskog, adimensionnement, simulations détaillées) dans le Chapitre 11. Ce chapitre est tiré de l'article *Coupled lattice Boltzmann method for numerical simulations of fully coupled heart and torso bidomain system in electrocardiology* publié dans le *Journal of Coupled System and Multiscale Dynamics*, American Scientific Publishers, en 2016 [48], et est complété par quelques simulations réalisés sur un domaine Ω plus réaliste. Notre but dans ce chapitre est de tenir compte du couplage existant entre les potentiels électriques définis au sein du myocarde, et ceux définis au sein du thorax. Dans ces deux chapitres 10 et 11, nous utilisons la méthode mise en place dans le Chapitre 8 dans le cadre de systèmes d'équations couplées. Nous traitons toutefois l'équation elliptique d'après la méthode développée dans la Section 7. Dans le cadre du Chapitre 11, nous ajoutons dans un deuxième temps l'équation elliptique relative aux

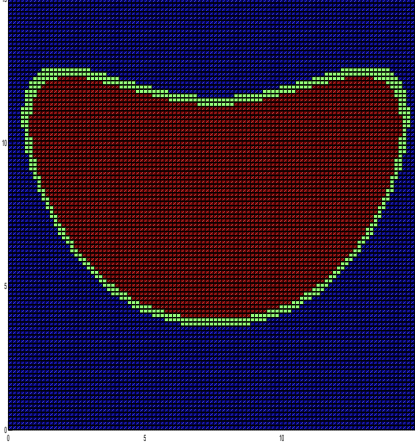


Figure 9.10: Représentation du domaine Ω (intérieur rouge), de bord $\partial\Omega$ (vert).

potentiels électriques dans le thorax.

Pour pouvoir traiter des cas plus réalistes incluant des retards (voir [13, 15, 32, 33, 34, 67, 80, 115, 117, 131] et les bibliographies associées), nous nous intéressons dans le Chapitre 12 à l'existence et à l'unicité de solutions pour un système bidomaine incluant des opérateurs de retard (en nous appuyant sur les résultats présentés dans [11, 20, 30, 25, 44, 129]). Ces opérateurs permettent de tenir compte de l'influence des états antérieurs du système ou des informations parvenant après un délai au point \mathbf{x} étudié à l'instant t . Une fois l'existence et l'unicité des solutions démontrées, nous présentons et analysons dans le Chapitre 13 une série de simulations numériques.

Dans ces chapitres, nous commençons par traiter des exemples numériques définis pour un domaine Ω carré. Puis, nous effectuons des simulations pour valider nos modèles pour un domaine à la géométrie quelconque. Pour cela, nous définissons un domaine Ω dont la forme se rapproche d'une coupe 2D du myocarde. Nous construisons pour cela un domaine dont le bord $\partial\Omega$ est défini à partir de polynômes. Ainsi, $\mathbf{x} = (x, y) \in \partial\Omega$ si:

$$|x - a|^3 + (y - b - c|x - d|^2)^2 - e = 0, \quad (9.33)$$

où comme le montre la Figure 9.10, nous obtenons un domaine approchant la coupe 2D d'un coeur.

10 Coupled Lattice Boltzmann Modeling of Bidomain type models in Cardiac Electrophysiology.

Ce travail a fait l'objet d'une publication dans "Mathematical and Computational Approaches in Advancing Modern Science and Engineering, Springer" en 2016 (cf [46])

abstract: In this work, a new coupling Lattice Boltzmann Model (LBM) in simulation of cardiac electrophysiology is developed in order to capture the detailed activities of macro- to micro-scale transport processes. The propagation of electrical activity in the human heart is mathematically modelled by bidomain type systems. As transmembrane potential evolves, we take into account domain anisotropical properties using intracellular and extracellular conductivity, such as in a pacemaker or an electrocardiogram, in both parallel and perpendicular directions to the fibers. The bidomain system represents multi-scale, stiff and strongly nonlinear coupled reaction-diffusion models that consists of a set of ordinary differential equations coupled with a set of partial differential equations. Due to dynamic and geometry complexity, numerical simulation and implementation of bidomain type systems are extremely challenging conceptual and computational problems but are very important in many real-life and biomedical applications. This paper suggests a new modified LBM scheme, reliable, efficient, stable and easy to implement in the context of such bidomain systems. The numerical results demonstrate the effectiveness and accuracy of our approach using general methods for bidomain type systems and show good agreement with analytical solutions and numerical results reported in the literature.

1 Introduction

Computational cardiac electrophysiological modeling is an important fields for applied mathematical research. Indeed, nowadays, heart and cardiovascular diseases are still the leading cause of death and disability all over the world. That is why we need to improve our knowledge about heart behavior, and more particularly about its electrical behavior. Consequently we want strong methods to compute electrical fluctuations in the myocardium to prevent cardiac disorders (as arrhythmias). We modelize electrical behavior of the heart in the myocardium with the bidomain system, derived from Ohm's law. This biophysical model of electrical cardiac activity links electrophysiological cell models, at small scales, and myocardial tissue mechanics, metabolism and blood

flow at large scales. In mathematical viewpoint, bidomain system leads us to compute intracellular and extracellular electrical potentials ρ_i and ρ_e with taking into account the cellular membrane dynamics U . This is a system of non-linear partial differential equations (PDEs) coupled with ordinary differential equations (ODEs). The PDEs describe the propagation of the electrical potentials and ODEs describe the electrochemical processes. During last years a lot of studies about bidomain models have led to results about well-posedness, existence and uniqueness of solutions (see e.g., [11], [25] and the references therein), and several numerical methods based on methods as finite difference method or finite element method are used to solve these models (see e.g., [121] and the references therein). In this paper, we propose a new modified Lattice Boltzmann Method (LBM) which is simple to implement, effective, accurate and well suited to bidomain systems. LBM is based on microscopic models and mesoscopic kinetic equations. Indeed, traditional numerical methods as finite difference method or finite element method directly solve governing equations for deriving macroscopic variable, whereas LBM is based on the particle (the discrete) distribution function and numerical solving the continuous Boltzmann transport equation. Then the macroscopic variables of the bidomain system can be recovered from the discrete equations through the multi-scaling Chapman-Enskog expansion procedure. LBM was originated from Boltzmann's kinetic theory of gases (70s), and attracts more and more attentions for simulating complex fluid flows since 90s. More recently, LBM has been extended successfully to simulate different types of reaction-diffusion equation as Keller-Segel chemotaxis model [135], or Poisson equation [38]. This paper is organized as follows: in Section 2 we recall briefly the derivation of the bidomain model. In Section 3 we present and describe the new modified LBM method. In Section 4, the validity of this method is demonstrated by comparing the numerical solution to the exact solution of bidomain model with a classical FitzHugh-Nagumo model (FHN), and convergence of solution is established. Some interesting numerical simulations with realistic data, including the bidomain model with a modified FHN model, are also carried out in this section. This paper is ended by a conclusion and some further works.

2 The bidomain Model

The bidomain model of cardiac tissue is expressed mathematically by the following steady-state of coupled partial differential equations governing the electrical potentials (in the physical region Ω occupied by the excitable cardiac tissue, which is an open, bounded, and connected subset of \mathbf{R}^d , $d \leq 3$ and during a time interval $(0, T)$)

$$\operatorname{div}(K_i \nabla \rho_i) = I_m - \kappa f_{is}, \quad \operatorname{div}(K_e \nabla \rho_e) = -I_m - \kappa f_{es}, \quad (10.1)$$

where ρ_i and ρ_e are the intracellular and extracellular potentials, respectively; $K_i(x)$ and $K_e(x)$ are the conductivity tensors describing the anisotropic intracellular and extracellular conductive media; $f_{is}(x, t)$ and $f_{es}(x, t)$ are the respective externally applied current sources. The transmembrane current density is described by I_m and is given by the following expression:

$$I_m = \kappa \left(c_m \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathcal{I}_{ion} \right), \quad (10.2)$$

where ρ is the transmembrane potential, which is defined as $\rho = \rho_i - \rho_e$, κ is the ratio of the membrane surface area to the volume occupied by the tissue, c_m term is the transmembrane capacitance time unit area. The tissue is assumed to be passive, so the capacitance c_m can be assumed to be not a function of the state variables. The nonlinear operator $\mathcal{I}_{ion}(x, t; \rho, U)$ describes the sum of transmembrane ionic currents across the cell membrane with U the electrophysiological ionic state variables (which describe e.g., the dynamics of ion-channel and ion concentrations in different cellular compartments). These variables satisfy the following ODE (with H a nonlinear operator)

$$\frac{\partial U}{\partial t} = H(x, t; \rho, U). \quad (10.3)$$

From (10.1), (10.2) and (10.3), the bidomain model can be formulated in terms of the state variables ρ , ρ_e and U as follows (in $\mathcal{Q} = \Omega \times (0, T)$)

$$\begin{aligned} \kappa(c_m \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathcal{I}_{ion}(\cdot; \rho, U)) - \operatorname{div}(K_i \nabla \rho) &= \operatorname{div}(K_e \nabla \rho_e) + \kappa f_{is}, \\ -\operatorname{div}((K_e + K_i) \nabla \rho_e) &= \operatorname{div}(K_i \nabla \rho) + \kappa(f_{es} + f_{is}), \\ \frac{\partial U}{\partial t} &= H(\cdot; \rho, U). \end{aligned} \quad (10.4)$$

The operators \mathcal{I}_{ion} and H which describe electrophysiological behavior of the system have usually the following form (affine functions with respect to U)

$$\mathcal{I}_{ion}(\cdot; \rho, U) = I_1(\cdot; \rho) + I_2(\cdot; \rho)U, \quad H(\cdot; \rho, U) = H_0(\cdot; \rho) + \lambda(\cdot)U. \quad (10.5)$$

To close the system we impose the following boundary conditions

$$(K_i \nabla(\rho + \rho_e)) \cdot \mathbf{n} = \zeta_i, \quad (K_e \nabla \rho_e) \cdot \mathbf{n} = \zeta_e \quad \text{on } \Sigma = \partial\Omega \times (0, T), \quad (10.6)$$

where \mathbf{n} being the outward normal to $\Gamma = \partial\Omega$ and ζ_i and ζ_e are the intra- and extra-cellular currents per unit area applied across the boundary, and the following initial conditions (in Ω)

$$\rho(t = 0) = \rho_0, \quad U(t = 0) = U_0. \quad (10.7)$$

Such problems have compatibility conditions determining whether there are any solutions to the PDEs. This is easily found by integrating the second equation of (10.4) over the domain and using the divergence theorem with the boundary conditions (10.6) (a.e. in $(0, T)$). Then (for compatibility reasons), we require the following condition

$$\int_{\Gamma} (\zeta_i + \zeta_e) d\Gamma + \kappa \int_{\Omega} (f_{es} + f_{is}) dx = 0. \quad (10.8)$$

Moreover, the function ρ_e is defined within a class of equivalence, regardless of a time-dependent function. This function can be fixed, for example by setting the Gauge condition (a.e. in $(0, T)$)

$$\int_{\Omega} \rho_e dx = 0. \quad (10.9)$$

Under some hypotheses for the data and parameters of the system and some regularity of operators \mathcal{L}_{ion} and H , system (10.4) with (10.6)-(10.7) and under the conditions (10.8)-(10.9) is a well-posed problem (for more details see [11]).

3 Numerical method and algorithm

In this section, a numerical method is presented for the bidomain system (10.4) in two space dimensions. For this, we introduce a new coupled modified LBM for solving the coupled system of nonlinear parabolic and elliptic equations (i.e. the first and the second equations of (10.4)). Then we treat the ODE satisfied by ionic state by applying Gronwall Lemma to obtain an integral formulation, and by using a quadrature rule to approximate the obtained integral. In the sequel, without loss of generality, we assume that $c_m = 1$ and $\kappa = 1$, and the terms K_i , K_e to be constants.

3.1 LBM for coupled parabolic and elliptic equations

In this first part, we develop and describe the new modified LBM to solve the following system (which corresponds to two first parts of (10.4))

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} - \operatorname{div}(K_i \nabla(\rho + \rho_e)) &= F(\cdot; \rho, \rho_e), \\ -\operatorname{div}(K_i \nabla \rho + (K_i + K_e) \nabla \rho_e) &= G(\cdot; \rho, \rho_e), \end{aligned} \quad (10.10)$$

where F and G are non linear operators.

LBE for general reaction-diffusion equations

To begin, we introduce the LBM to solve the following reaction-diffusion equation with the macroscopic variable Φ

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{x}, t) - \operatorname{div}(K \nabla \Phi(\mathbf{x}, t)) = H(\mathbf{x}, t; \Phi). \quad (10.11)$$

The evolution equation of the LBM for (10.11) is given by

$$\frac{\partial}{\partial t} h(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) + \mathbf{e} \cdot \nabla h(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) = Q(h) + P(\mathbf{x}, t), \quad (10.12)$$

where $h(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})$ is the distribution function of particle moving with velocity \mathbf{e} at position \mathbf{x} and time t , P is an external force and Q is the Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) collision operator, defined by

$$Q(h) = -\frac{1}{\tau} (h(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) - h^{eq}(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})),$$

where h^{eq} is the equilibrium distribution function and τ is the dimensionless relaxation time. LBM leads us to approximate (10.12) to recover reaction-diffusion equation (10.11) with Chapman-Enskog expansion. For that, we discretize Q in time and space. Then we introduce a lattice size cell Δx and a lattice time step size Δt , and we define streaming lattice speed $c = \Delta x / \Delta t$.

The $D2Q9$ lattice, which involves 9 velocity vectors, is considered for applied lattice scheme, which is the most used scheme for two-dimensional model. Figure 10.1 shows a typical lattice node

of $D2Q9$ model with velocities \mathbf{e}_i for various directions defined by

$$\mathbf{e}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_{i=1,2,3,4} = c \begin{pmatrix} \cos \left((i-1) \frac{\pi}{2} \right) \\ \sin \left((i-1) \frac{\pi}{2} \right) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_{i=5,6,7,8} = \sqrt{2}c \begin{pmatrix} \cos \left((i-\frac{9}{2}) \frac{\pi}{2} \right) \\ \sin \left((i-\frac{9}{2}) \frac{\pi}{2} \right) \end{pmatrix}.$$

For each particle on the lattice, we associate the discrete distribution functions h_i and h_i^{eq} (in the mesoscopic level), and the discrete operator H_i of H for $i = 0, \dots, 8$. Then, the form of the Lattice Boltzmann Equation (LBE) with an external force by introducing BGK approximations can be written as follows

$$\begin{aligned} h_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) &= h_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} (h_i(\mathbf{x}, t) - h_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) \\ &\quad + \Delta t H_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial}{\partial t} H_i(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (10.13)$$

The key steps in LBM, which is directly derived from LBE (10.13), are the collision and streaming processes (shown on Figure 10.2) which are given by

$$h_i^{col}(\mathbf{x}, t) = h_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} (h_i(\mathbf{x}, t) - h_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \Delta t H_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial}{\partial t} H_i(\mathbf{x}, t), \quad (10.14)$$

$$h_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = h_i^{col}(\mathbf{x}, t). \quad (10.15)$$

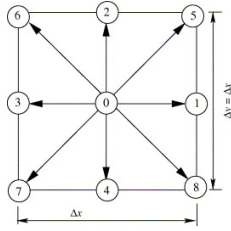


Figure 10.1: Particle velocities for D2Q9 LBM

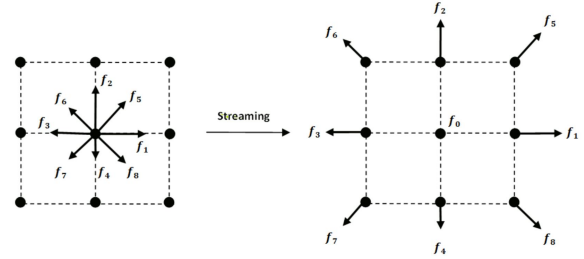


Figure 10.2: streaming process of a lattice node

From Chapman-Enskog expansion analysis, the above LBM can recover to the reaction-diffusion equation (10.11) if we take $h_i^{eq} = w_i \Phi$, $H_i = w_i H$ and the initial distribution at $t = 0$: $h_i(\mathbf{x}, 0) = h_i^{eq}(\mathbf{x}, 0)$. This analysis is based on the following properties:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^8 h_i^{eq}(\mathbf{x}, t) &= \sum_{i=0}^8 h_i(\mathbf{x}, t) = \Phi(\mathbf{x}, t) \text{ (macroscopic variable)}, \\ \sum_{i=0}^8 H_i(\mathbf{x}, t) &= H(\mathbf{x}, t), \quad \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i h_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i H_i(\mathbf{x}, t) = 0, \\ \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i h_i^{eq}(\mathbf{x}, t) &= \frac{c^2}{3} \Phi(\mathbf{x}, t) \mathbf{I}_d, \quad \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i H_i(\mathbf{x}, t) = \frac{c^2}{3} H(\mathbf{x}, t) \mathbf{I}_d. \end{aligned} \quad (10.16)$$

Remark 10.1 .

During streaming and collision processes, in order to satisfy boundary conditions, the boundary nodes need special treatments on distribution functions, which are essential to stability and accuracy

of the method.

Coupled modified LBM

To introduce our modified LBM, we have to take into account the coupled terms which link reaction-diffusion equation and elliptic equation in the system (10.10). As in [135], in order to take into account this coupling, we introduce two correction terms $S_i = w_i(\Psi_1(K_i\nabla\rho) + \Psi_2(K_i\nabla\rho_e))$ and $S_i^e = w_i(\Psi_1^e(K_i\nabla\rho) + \Psi_2^e((K_i + K_e)\nabla\rho_e))$, where the functions Ψ_1, Ψ_2, Ψ_1^e and Ψ_2^e are determined by Chapman-Enskog expansions. Then, we can solve the reaction-diffusion equation with a first LBE where the distribution function f leads to recover ρ . We construct exactly the same LBM than developed in section 3.1. So we choose $f_i^{eq} = w_i\rho$, $F_i = w_iF$ and $\tau = -\frac{3K_i}{c^2\Delta t} + \frac{1}{2}$ to satisfy previous properties (10.16). Finally, we add the corrector term S_i as follows

$$\begin{aligned} f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i\Delta t, t + \Delta t) &= f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \Delta t F_i(\mathbf{x}, t) \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial}{\partial t} F_i(\mathbf{x}, t) + \Delta t S_i(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (10.17)$$

Hence, the macroscopic variable ρ , defined as : $\sum_{i=0}^8 f_i(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t)$.

For the elliptic equation, the LBM developed is based on the LBM employed in [38]. The first step is to introduce a new time variable r as $\lim_{r \rightarrow \infty} \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t) = \rho_e(\mathbf{x}, t)$. Then, the equilibrium distribution function is defined as

$$g_i^{eq}(\mathbf{x}, r) = \begin{cases} w_i \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t) & \text{for } i \neq 0, \\ (w_0 - 1) \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t) & \text{for } i = 0 \end{cases}$$

and we can deduce that $\sum_{i=0}^8 g_i^{eq}(\mathbf{x}, r) = 0$, $\frac{1}{1-w_0} \sum_{i=1}^8 g_i^{eq}(\mathbf{x}, r) = \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t)$. Finally, as for previous LBE (10.17), we add the corrector term S_i^e and we obtain the following LBE (to recover ρ_e)

$$\begin{aligned} g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i\Delta r, r + \Delta r; t) &= g_i(\mathbf{x}, r; t) - \frac{1}{\tau_e} (g_i(\mathbf{x}, r; t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, r; t)) \\ &\quad + \Delta t G_i(\mathbf{x}, r; t) + \Delta t S_i^e(\mathbf{x}, r; t). \end{aligned} \quad (10.18)$$

Hence, the macroscopic variable ρ_e , defined as : $\frac{1}{1-w_0} \sum_{i=0}^8 g_i(\mathbf{x}, r; t) = \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t)$.

3.2 Treatment of ODE

Now, we present briefly the method to solve ODE satisfy by ionic state U , with initial condition $U(\mathbf{x}, 0) = U_0(\mathbf{x})$. According to (10.4) and the form of H given in (10.5) by $H(\mathbf{x}, t; \rho, U) = H_0(\mathbf{x}, t; \rho) + \lambda U(\mathbf{x}, t)$, with λ assumed to be a constant, and by using Gronwall Lemma we can deduce:

$$U(\mathbf{x}, t + \Delta t) = U(\mathbf{x}, t)e^{-\lambda\Delta t} + e^{-\lambda t} \int_t^{t+\Delta t} H_0(\mathbf{x}, s; \rho(s))e^{\lambda s} ds.$$

Then, according to approximation of derived integral by trapezoidal method between t and $t + \Delta t$ we obtain the following approximation of U denoted also by U

$$U(\cdot, t + \Delta t) = U(\cdot, t)e^{-\lambda\Delta t} + \frac{\Delta t}{2} (H_0(\cdot, t + \Delta t; \rho(t + \Delta t))e^{\lambda\Delta t} + H_0(\cdot, t; \rho(t))). \quad (10.19)$$

Finally, after non-dimensionalization, mesh definition and initialization of initial conditions, parameters and data, the proposed algorithm to solve the bidomain system can be summarized as follows

1. Initialization: $t=0$.
2. LBE according to time t by using (10.17) to compute $\rho(\mathbf{x}, t + \Delta t)$.
3. Trapezoidal method by using (10.19) to compute $U(\mathbf{x}, t + \Delta t)$.
4. Loop on new time variable r :
 - (a) LBE according to time r by using (10.18) to compute $\tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r + \Delta r; t + \Delta t)$ an approximation of $\rho_e(\mathbf{x}, t + \Delta t)$.
 - (b) If convergence criteria is not reached, set $r = r + \Delta r$ and go back to 4a.
5. Set $\rho_e(\mathbf{x}, t + \Delta t) := \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t + \Delta t)$.
6. If $t \neq T$, set $t := t + \Delta t$ and go back to 2.

4 Numerical simulation and applications

To validate the capacity of our new coupled LBM to deal with 2D bidomain systems, several situations are numerically simulated. In the first study, we consider the bidomain system with homogeneous Neumann boundary conditions and with a classical FitzHugh-Nagumo model (FHN), in which non linear operators are defined as

$$\mathcal{I} = -1/\alpha_1(\rho - \rho^3/3 - U), \quad H = \alpha_2(\rho - \beta_1 U + \beta_2), \quad (10.20)$$

where α_1 , α_2 , β_1 , β_2 are positive constant parameters respectively called excitation rate constant, recovery rate constant, recovery decay constant and excitation decay constant. First, we consider the system with known analytical solution in order to validate and verify the accuracy and stability of the method. And second, we consider the system with realistic data as in [121] and we estimate the influence of both constants α_1 and α_2 on the dynamic of the system.

t=0.5	Δx	Err_ρ	Err_U	t=1	Δx	Err_ρ	Err_U
	1/30	0.1914	0.0005		1/30	1.7618	0.0009
	1/50	0.0389	0.0002		1/50	0.4559	0.0003
	1/70	0.0116	7.97e-5		1/70	0.1654	0.0001
	1/100	0.0050	4.48e-5		1/100	0.0790	7.92e-5
	1/150	0.0016	1.99e-5		1/150	0.0284	3.52e-5
	1/200	0.0007	1.12e-5		1/200	0.0138	1.99e-5

Table 10.1: Relation between relative error and lattice spacing for ρ and U .

In the last application we solve and analyze the dynamic of the system in realistic situation and with the following modified FHN model (see e.g., [121])

$$\mathcal{I} = 0.0004(\rho + 85)(U + (\rho + 70)(\rho - 40)), \quad H = 0.63(\rho + 85) - 0.013U. \quad (10.21)$$

Nota Bene: If the exact solution ϕ_{sol} is known, we can measure the efficiency of method with the following L^2 relative error: $Err_\phi = \frac{\|\phi_{sol} - \phi\|_{L^2}}{\|\phi_{sol}\|_{L^2}}$.

For simplicity, we assume that the domain is a square region $\Omega = [0; 1] \times [0; 1]$ and the final time is fixed $T = 1$.

4.1 Benchmark problem and validation

In this first application, we take $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 1$, $\beta_1 = 1$, $K_i = 1$ and $K_e = 1$, and we set $\beta_2(x, y, t) = -\rho^{sol}(x, y, t) + 2e^t \cos(\pi(x + y))$. The initial conditions are $\rho(\mathbf{x}, 0) = 0$, $\rho_e(\mathbf{x}, 0) = 0$, $U(\mathbf{x}, 0) = \cos(\pi(x + y))$ and we choose \mathcal{I} , I_i and I_e to close the problem according to solution and compatibility conditions. The exact solution is given by : $\rho^{sol}(x, y, t) = tx^2(x - 1)^2y^2(y - 1)^2$, $\rho_e^{sol}(x, y, t) = t(\cos(\pi x) + \cos(\pi y))$, and $U^{sol}(x, y, t) = e^t \cos(\pi(x + y))$.

To study the convergence, we have constructed a sequence of meshes with decreasing spatial step Δx between 1/30 and 1/200 and $\Delta t = \Delta x^2$. We just care about relative error on ρ and U at $t = 0.5$ and $t = 1$. Indeed, the chosen convergence criteria (for the iterative method to approach ρ_e) involves a constant error because this criteria is not defined in function of lattice size cell. We present on Figure 10.3 (at $t = 0.5$ and $t = 1$) the convergence curves, $\log(Error)$ versus Δx , for ρ and U . We observe that the slope of error curves for ρ passes approximately from 3 to 2.5 and the slope of error curves for U is approximately equal to 2. This shows that our numerical error estimates are agree with theoretical postulated error estimates, and indicate the good performance of our proposed method.

4.2 Problem with realistic data

The second computations have been made to test performance of our method in realistic data case and to analyze dynamic of the system according to FHN models: a classical model (10.20) and a modified model (10.21). Here, we take $\Delta x = 1/50$ and $\Delta t = \Delta x^2$.

First data setting

In this first application, we consider the classical FHN model (10.20) with fixed $\beta_1 = 0.5$ and $\beta_2 = 1$ and we study the effect of parameters α_1 and α_2 . We assume $K_i = K_e = 1$ and we consider the following initial conditions $\rho(x, y, 0) = -1.28791 + \sin(x)$, $\rho_e(x, y, 0) = 0$, $U(x, y, 0) = -0.5758$.

Table 10.2: Relaxation time of ρ according to α_1 and α_2 variations.

α_1	α_2	Relaxation time	α_2	α_1	Relaxation time
0.2	0.01	0.4700	0.2	0.01	0.0396
	0.05	0.4704		0.05	0.1568
	0.1	0.4716		0.1	0.2764
	0.5	0.4988		0.5	0.9168

The parameters α_1 and α_2 control the dynamic between transmembrane potential ρ and the ionic state U . In order to study the propagation of an electrical wave through the cardiac tissue, we analyze the relaxation time of ρ . In Table 10.2, we observe that α_2 has negligible impact on this relaxation time. Conversely, figure 10.4 and table 10.2 show that tiny α_1 value leads to near-infinite slope values when potential ρ peaks and relaxes.

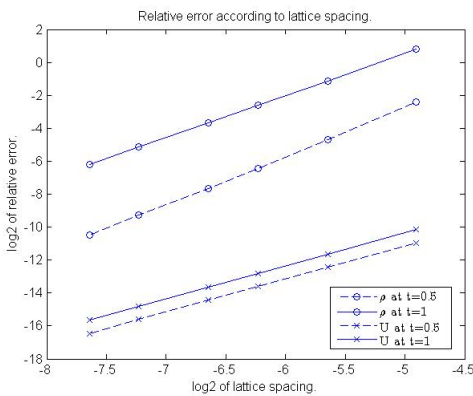


Figure 10.3: Error curves for ρ and U

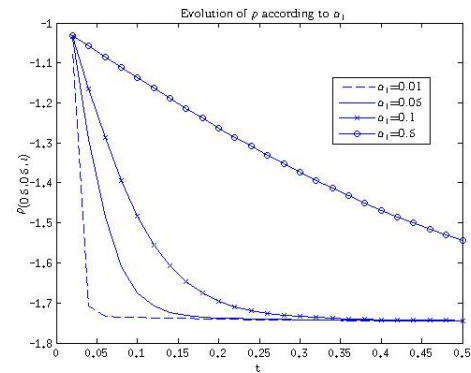


Figure 10.4: $\rho(0.5, 0.5, t)$ with $\alpha_1 = 0.01$ to 0.5 , $\alpha_2 = 0.2$

Second data setting

In this final application, we consider the modified FHN model (10.21) which is more realistic than the classical model (10.20) because of a product between ρ and U . We assume $K_i = 1.75$ and $K_e = 7$ and we consider the following initial conditions : $\rho(x, y, 0) = -85 + 100(1 - \sin(xy))$, $\rho_e(x, y, 0) = 0$, $U(x, y, 0) = 0$.

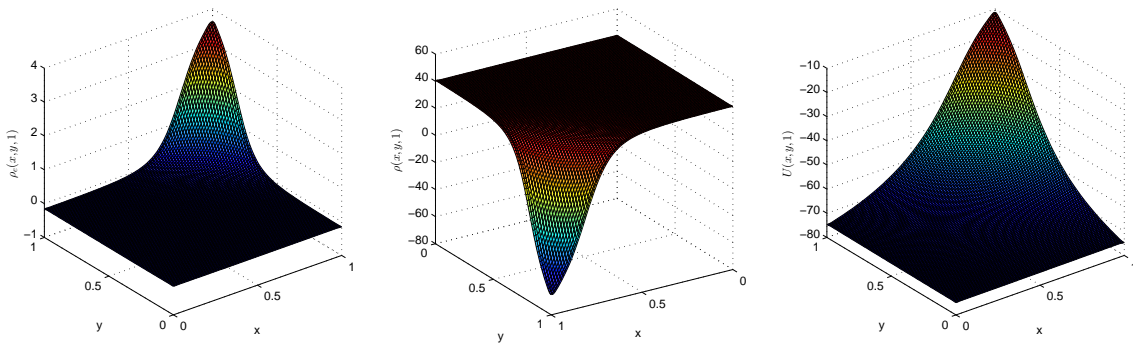


Figure 10.5: Evolution of ρ_e , ρ and U at $t = 1$ with $\Delta x = 1/50$

Figure 8 shows a color visualization of the simulation for ρ , ρ_e and U at final time $t = T$. The analyze we have done before is still valid.

5 Conclusion

An efficient and stable coupled LBM to solve a two-dimensional bidomain model of cardiac tissue is developed. From the Chapman-Enskog expansion analysis, the bidomain system which is a coupled of reaction-diffusion, elliptic and EDO equations, can be correctly recovered by our new LBM. This method is easy to implement and easy to parallelize. This new coupled LBM method will be shown in a forthcoming paper for more general coupled models with complex geometries. It would be interesting to use this developed method with observations coming from experimental data and a more complete description of the biophysical model of electrical cardiac activity. Moreover, it is clear that, to get even closer to a more realistic calculation, it is necessary to study in the future this method coupled with optimization technique and robust control problems by using the approach developed in [14].

11 Coupled Lattice Boltzmann Method for Numerical Simulations of Fully Coupled Heart and Torso Bidomain System in Electrocardiology

Ce travail a fait l'objet d'une publication dans "Journal of Coupled System and Multiscale Dynamics, American Scientific Publishers," en 2016 (cf [48]).

Après avoir présenté ce travail sur l'application de la LBM à un problème d'électrophysiologie cardio-vasculaire où le système bidomaine est complété par une équation de type elliptique décrivant le comportement du potentiel électrique dans le thorax, nous élargissons ces résultats avec quelques simulations dans lesquelles le domaine représentant le coeur a une géométrie plus réaliste.

Abstract: In this work, a modified coupling Lattice Boltzmann Model (LBM) in simulation of cardiac electrophysiology is developed in order to capture the detailed activities of macro-to micro-scale transport processes. The propagation of electrical activity in the human heart through torso is mathematically modeled by bidomain type systems. As transmembrane potential evolves, we take into account domain anisotropical properties using intracellular and extracellular conductivity, such as in a pacemaker or an electrocardiogram, in both parallel and perpendicular directions to the fibers. The bidomain system represents multi-scale, stiff and strongly nonlinear coupled reaction-diffusion models that consist of a set of ordinary differential equations coupled with a set of partial differential equations. Due to dynamic and geometry complexity, numerical simulation and implementation of bidomain type systems are extremely challenging conceptual and computational problems but are very important in many real-life and biomedical applications. This paper suggests a modified LBM scheme, reliable, efficient, stable and easy to implement in the context of such bidomain systems. Numerical tests to confirm effectiveness and accuracy of our approach are provided and the propagation of electrophysiological waves in the heart is analyzed.

Keywords: Coupled Lattice Boltzmann, Heart-torso coupling, coupled nonlinear parabolic/elliptic PDEs, bidomain models, Ionic models, cardiac electrophysiology, .

1 Introduction

Computational cardiac electrophysiological modeling is now an important field in applied mathematics. Indeed, nowadays, heart and cardiovascular diseases are still the leading cause of death and disability all over the world. That is why we need to improve our knowledge about heart behavior, and more particularly about its electrical behavior. Consequently we want strong methods to compute electrical fluctuations in the torso region to prevent cardiac disorders (as arrhythmias).

In this work, coupling Lattice Boltzmann Models (LBM) in simulation of cardiac electrophysiology are developed in order to capture the detailed activities of macro- to micro-scale transport processes. The propagation of electrical activity in the human heart is mathematically modeled by bidomain type systems in heart, derived from Ohm's law, and is coupled with a general Laplace equation in surrounding tissues across the torso. As heart is embedded in the torso, the dynamic of electrical potential in torso have to be treated in detail to obtain expected behavior in myocardium (the muscle tissue of the heart) for several applications such as in a pacemaker or an electrocardiogram. The muscle tissue of the ventricles and atria are composed of fibers which is oblong like cylinders and formed by thick and thin protein filaments. Each fiber is connected to neighboring fibers with a step-like surface. Because of these connections, the electrical current passes from cell to cell and its direction is therefore determined by the orientation of the fibers. This makes the myocardial tissue anisotropic, and we use intracellular and extracellular conductivity, with two tensors respectively called \mathcal{K}_{ic} and \mathcal{K}_{ec} , in both parallel and perpendicular directions to those fibers to taking into account the anisotropy. So, even if this tissue has a granular nature and is composed of multiple individual cells, we can consider this tissue as continuous anisotropic domain which can be likened to a functional syncytium. This biophysical model of electrical cardiac activity links electrophysiological cell models, at small scales, and myocardial tissue mechanics, metabolism and blood flow at large scales. Indeed, myocardium fibers have a higher conductivity than normal muscle fibers. That is because the heart cells are surrounded by a plasma membrane which induces a different chemical and electrical intracellular and extracellular behavior. There is notably a higher intracellular potassium concentration than in the extracellular fluid. This difference induces an outflow of potassium which can be traduced by a difference of distribution charge, called the transmembrane potential ρ . External electrical stimulus control ion channels gates in the membrane, and intracellular and extracellular ionic concentration changes while the transmembrane potential leaves its resting state (see e.g. [43], [97] and the references therein).

So, the bidomain system represents multi-scale, stiff and strongly nonlinear coupled reaction-diffusion models (governing the dynamics at cellular and tissue levels) that consists of a set of ordinary differential equations coupled with a set of partial differential equations in myocard to compute extracellular potential ρ_e , transmembrane potential ρ and ionic variable U , which are linked to the Laplace equation in torso to compute torso potential ρ_T with Robin type boundary conditions between torso and extra-cellular potentials. During last years a lot of studies about bidomain models have led to results about well-posedness, existence and uniqueness of solutions (see e.g., [11], [25] and the references therein), and several numerical methods based on methods as finite difference method or finite element method are used to solve these models (see e.g., [121] and the references therein).

However, there exist several models to simulate electrical behavior in electrophysiology based

on Hodgkin-Huxley equations to approximate the electrical characteristics of excitable cells such as neurons and cardiac myocytes. In order to have a simple and quite realistic model, we choose 2-variable phenomenological Mitchell-Schaeffer (MS) model [104] to capture ionic phenomena. This model derived from Fenton-Karma 3-variable model [63] is interesting because of its simplicity. In the same time, it has already shows its accuracy and its realism. Due to dynamic and geometry complexity, numerical simulation and implementation of bidomain type systems are extremely challenging conceptual and computational problems but are very important in many real-life and biomedical applications. This work presents a modified coupled LBM scheme, reliable, efficient, stable and easy to implement in the context of such bidomain systems with Neumann type boundary conditions in complex geometry boundaries. LBM was originated from Boltzmann's kinetic theory of gases (70s), and attracts more and more attentions for simulating complex fluid flows since 90s. More recently, LBM has been extended successfully to simulate different types of parabolic reaction-diffusion equation as Keller-Segel chemotaxis model [135] and monodomain model in cardiac electrophysiology [35], or Poisson equation [38]. The concept of LBM, which is efficient in terms of parallelization, is based on Boltzmann equations which describe the evolution of particles in kinetic theory. LBM has two main phases: one, local, which models the collision between particles and the second, along each direction of interpolation, which models the transport phase. We demonstrate that solving Lattice Boltzmann Equations (LBE) is equivalent to solving governing bidomain system with Chapman-Enskog perturbation expansion [39]. This ansatz leads us to decompose the particular distributions f around equilibrium state in different scales of perturbation with introduction of dimensionless Knudsen number ε which is a ratio between the particular mean free path length to a representative physical length scale. So, for every distribution function we can rewrite distribution function f as $f = f^{eq} + \varepsilon f^{(1)} + \varepsilon^2 f^{(2)} + \dots$. Then, the main point of Chapman-Enskog expansion is to match LBE with Taylor series with including the decomposition in order to recompose the governing bidomain system. Finally, we propose two applications in simplified square domains for heart and torso. On the one hand, numerical results demonstrate the effectiveness and accuracy of our approach using general methods for bidomain type systems with full known data and chosen analytical solution. On the other one, we treat the model with realistic data to show good agreement with numerical results and potential behavior reported in the literature (see e.g., [31], [114]).

The paper is structured as follows: first, in Section 2 we introduce the full coupled heart and torso bidomain system and the MS ionic model. Then, in Section 3 after some generalities about LBM, we develop our modified coupled LBM for numerical simulations of the considered model and investigate its asymptotic behavior as ε goes to zero. The validity of this method is demonstrated in Section 4 by comparing the numerical solution to the known exact solution, and convergence of solution is established. Finally, the propagation of electrophysiological waves in the heart is studied.

2 The bidomain Model

The full coupled heart and torso bidomain model of cardiac tissue is expressed mathematically by the following time dependent system of coupled partial differential equations governing the electrical potentials in the physical region $\Omega = \Omega_H \cup \Omega_T$, which is an open, bounded, and connected

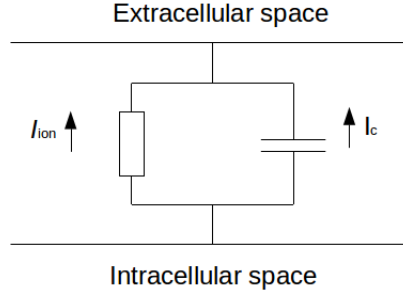


Figure 11.1: Modeling of the membrane as resistor and capacitor coupled in parallel.

subset of \mathbf{R}^d , $d \leq 3$ and during a time interval $(0, T)$. The two spaces Ω_H and Ω_T are the regions occupied by the excitable myocardium tissue (the heart muscle) and the thorax, respectively.

First, we will introduce the bidomain model in myocard Ω_H . Propagation of electrical potential is modeled by:

$$\operatorname{div}(\mathcal{K}_{ic} \nabla \rho_i) = I_m - \kappa f_{is}, \quad \operatorname{div}(\mathcal{K}_{ec} \nabla \rho_e) = -I_m - \kappa f_{es}, \quad (11.1)$$

where ρ_i and ρ_e are the intracellular and extracellular potentials, respectively; \mathcal{K}_{ic} and \mathcal{K}_{ec} are the conductivity tensors describing the anisotropic intracellular and extracellular conductive media; $f_{is}(x, t)$ and $f_{es}(x, t)$ are the respective externally applied current sources after they passed through the thorax. The transmembrane current density is described by I_m and is given by the following expression:

$$I_m = \kappa \left(c_m \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathcal{I}_{ion} \right), \quad (11.2)$$

where ρ is the transmembrane potential, which is defined as $\rho = \rho_i - \rho_e$, κ is the ratio of the membrane surface area to the volume occupied by the tissue, c_m term is the transmembrane capacitance time unit area. We can assimilate this membrane to a simple electrical circuit with a resistor associate to the ionic current (\mathcal{I}_{ion}) and a capacitor associate to the capacitive current ($I_c = c_m \frac{\partial \rho}{\partial t}$) in parallel (Figure 11.1). The tissue is assumed to be passive, so the capacitance c_m can be assumed to be not a function of the state variables. The nonlinear operator $\mathcal{I}_{ion}(x, t; \rho, U)$ describes the sum of transmembrane ionic currents across the cell membrane with U the electrophysiological ionic state variable (which describes e.g., the dynamics of ion-channel and ion concentrations in different cellular compartments). These variables satisfy the following ODE (with H_{ion} a nonlinear operator)

$$\frac{\partial U}{\partial t} = H_{ion}(x, t; \rho, U). \quad (11.3)$$

From (11.1), (11.2) and (11.3), the bidomain model can be formulated in terms of the state variables ρ , ρ_e and U as follows (in $\mathcal{Q}_H = \Omega_H \times (0, T)$)

$$\begin{aligned} \kappa \left(c_m \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathcal{I}_{ion}(\cdot; \rho, U) \right) - \operatorname{div}(\mathcal{K}_{ic} \nabla \rho) &= \operatorname{div}(\mathcal{K}_{ic} \nabla \rho_e) + \kappa f_{is}, \\ -\operatorname{div}((\mathcal{K}_{ec} + \mathcal{K}_{ic}) \nabla \rho_e) &= \operatorname{div}(\mathcal{K}_{ic} \nabla \rho) + \kappa (f_{es} + f_{is}), \\ \frac{\partial U}{\partial t} &= H_{ion}(\cdot; \rho, U). \end{aligned} \quad (11.4)$$

The operators \mathcal{I}_{ion} and H_{ion} which describe electrophysiological behavior depends on the considered cell ionic model. We can choose physiological ionic models (e.g Djabella and Sorine [54] or Luo and Rudy [98]), phenomenological models (e.g Fenton-Karma [63], Fitzhugh-Nagumo [65], or Mitchell-Schaeffer [104]). In our case, we choose the phenomenological two-variable classical model proposed by Mitchell and Schaeffer as:

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_{ion}(\mathbf{x}, t; \rho, U) &= I_1(\mathbf{x}, t; \rho) + I_2(\mathbf{x}, t; \rho)U, \\ H_{ion}(\mathbf{x}, t; \rho, U) &= \begin{cases} \lambda_1(\mathbf{x})U + H_0(\mathbf{x}, t) & \text{if } \rho \leq \rho_{gate}, \\ \lambda_2(\mathbf{x})U & \text{if } \rho > \rho_{gate}, \end{cases}\end{aligned}\quad (11.5)$$

where operators I_1 , I_2 , functions λ_1 , λ_2 and H_0 depend of given parameters and where ρ_{gate} is a given activation threshold.

Then, under the assumption that the heart is isolated from its surrounding (e.g. non-coupled with the thorax), we will search ρ_T which is electrical potential in thorax with solving propagation equation (in $\mathcal{Q}_T = \Omega_T \times (0, T)$):

$$-div(\mathcal{K}_T \nabla \rho_T) = f_T, \quad (11.6)$$

where \mathcal{K}_T is the conductivity tensor describing the anisotropic conductivity in thorax, and f_T is the applied current source.

To close the system, we impose the following boundary conditions on $\Sigma = \partial\Omega_H \times (0, T)$

$$(\mathcal{K}_{ic} \nabla(\rho + \rho_e)) \cdot \mathbf{n} = \zeta_i, \quad (\mathcal{K}_{ec} \nabla \rho_e) \cdot \mathbf{n} = \zeta_e, \quad (11.7)$$

and on $\Sigma_T = \Gamma_T \times (0, T)$ where $\Gamma_T = \partial\Omega_T \setminus \partial\Omega_H$:

$$(\mathcal{K}_T \nabla \rho_T) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (11.8)$$

where \mathbf{n} being the outward normal to $\Gamma = \partial\Omega_H$ and ζ_i and ζ_e are the intra- and extra-cellular currents per unit area applied across the boundary, and the following initial conditions (in Ω_H)

$$\rho(t=0) = \rho_0, \quad U(t=0) = U_0. \quad (11.9)$$

Such problems have compatibility conditions determining whether there are any solutions to the PDEs. This is easily found by integrating the second equation of (11.4) over the domain and using the divergence theorem with the boundary conditions (11.7) (a.e. in $(0, T)$). Then (for compatibility reasons), we require the following condition

$$\int_{\Gamma} (\zeta_i + \zeta_e) d\Gamma + \kappa \int_{\Omega_H} (f_{es} + f_{is}) dx = 0. \quad (11.10)$$

Moreover, the function ρ_e is defined within a class of equivalence, regardless of a time-dependent function. This function can be fixed, for example by setting the following condition (a.e. in $(0, T)$)

$$\int_{\Omega_H} \rho_e dx = 0. \quad (11.11)$$

Under some hypotheses for the data and parameters of the system and some regularity of operators

\mathcal{I}_{ion} and H_{ion} , system (11.4) with (11.7)-(11.9) and under the conditions (11.10)-(11.11) is a well-posed problem (for more details see [11, 25]).

We respect the following boundary conditions on Σ :

$$(\mathcal{K}_{ic}\nabla\rho + (\mathcal{K}_{ic} + \mathcal{K}_{ec})\nabla\rho_e).\mathbf{n} = (\mathcal{K}_T\nabla(\rho_T)).\mathbf{n}, \quad (11.12)$$

which induce the following boundary condition:

$$(\mathcal{K}_T\nabla\rho_T).\mathbf{n} = \zeta_e + \zeta_i \quad \text{on } \Sigma. \quad (11.13)$$

Remark 11.1 .

In order to guarantee the well-posedness of system (11.4)-(11.9) (under some hypotheses for data and some regularity of the nonlinear operators), we can use the following regularized version of ionic operators H_{ion} , given by (11.5), (see e.g., [30])

$$H_r(\mathbf{x}, t; \rho, U) = (-\lambda_2(\mathbf{x}) + (\lambda_2(\mathbf{x}) - \lambda_1(\mathbf{x}))h_\infty(\rho))(U(\mathbf{x}, t) - h_\infty(\rho)) - (H_0(\mathbf{x}, t) + \lambda_1(\mathbf{x}))h_\infty(\rho),$$

where $h_\infty(\rho)$ is given by

$$h_\infty(\rho) = \frac{1}{2} \left(1 - \tanh \left(\frac{\rho - \rho_{gate}}{r_g} \right) \right),$$

with r_g a positive parameter. We can deduce that

$$\lim_{r_g \rightarrow 0} h_\infty(\rho) = \begin{cases} 1 & \text{if } \rho < \rho_{gate}, \\ 0 & \text{if } \rho > \rho_{gate}, \end{cases}$$

To illustrate the convergence of H_r to H_{ion} , we consider, e.g., the following functions

$$\lambda_1(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mathcal{T}_{open}}, \lambda_2(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mathcal{T}_{close}},$$

$$H_0(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\mathcal{T}_{open}(\rho_{max} - \rho_{min})^2}.$$

with $\rho_{gate} = -67mV$, $\mathcal{T}_{open} = 100ms$, $\mathcal{T}_{close} = 120ms$, and we choose $U(\mathbf{x}, t) = 10^{-3}$. As Figure 11.2 shows for different parameters r_g , $\lim_{r_g \rightarrow 0} H_r(\rho, U) = H_{ion}(\rho, U)$. \square

3 Numerical method and algorithm

In this section, a numerical method is presented for the bidomain system (11.4) in two space dimensions. For this, we introduce a coupled modified LBM for solving the coupled system of nonlinear parabolic and elliptic equations (i.e. the first and second equations of (11.4)). Then we treat the ODE satisfied by ionic state by applying Gronwall Lemma to obtain an integral formulation, and by using a quadrature rule to approximate the obtained integral.

In the sequel, without loss of generality, we assume $c_m = 1$ and $\kappa = 1$. Moreover we assume $\mathcal{K}_{ic} = K_{ic}\mathbf{I}_d$, $\mathcal{K}_{ec} = K_{ec}\mathbf{I}_d$, $\mathcal{K}_T = K_T\mathbf{I}_d$, with \mathbf{I}_d identity matrix and K_{ic} , K_{ec} , K_T constants.

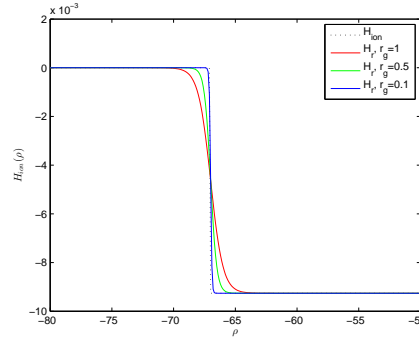


Figure 11.2: Operator H_{ion} and regularized operator H_r for $r_g = 1$, $r_g = 0.5$, $r_g = 0.1$.

3.1 LBM for coupled parabolic and elliptic equations

In this first part, we develop and describe the modified LBM to solve the following system (which corresponds to two first parts of (11.4) and elliptic equation in thorax (11.6))

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho}{\partial t} - \text{div}(K_{ic} \nabla(\rho + \rho_e)) &= F(\cdot; \rho, \rho_e), \text{ in } \mathcal{Q}_H \\
 -\text{div}(K_{ic} \nabla \rho + (K_{ic} + K_{ec}) \nabla \rho_e) &= G(\cdot; \rho, \rho_e), \text{ in } \mathcal{Q}_H \\
 -\text{div}(K_T \nabla \rho_T) &= H(\cdot; \rho_T), \text{ in } \mathcal{Q}_T
 \end{aligned} \tag{11.14}$$

where F , G and H are given nonlinear operators.

Before introducing the coupled LBM for system (11.14), it is important to explain the main steps of this method and to give some definitions about discretization and operators in case of a general reaction-diffusion equation.

LBM for general reaction-diffusion equations

Let us introduce the LBM for solving the following reaction-diffusion equation (with the macroscopic variable Θ)

$$\frac{\partial \Theta(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \text{div}(K(\mathbf{x}, t) \nabla \Theta(\mathbf{x}, t)) = \Phi(\mathbf{x}, t; \Theta), \tag{11.15}$$

where Φ is a non linear operator and K is a diffusion coefficient. The evolution equation of the LBM for (11.15) is given by the following continuous Boltzmann equation [24]:

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})}{\partial t} + \mathbf{e} \cdot \nabla \phi(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) = \mathcal{J}(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) \tag{11.16}$$

with

$$\Theta(\mathbf{x}, t) = \int \phi(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) d\mathbf{e}, \tag{11.17}$$

where $\mathcal{J}(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) = Q_{col}(\phi(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})) + P(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})$, $\phi(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})$ is the distribution function of the single particle moving with velocity \mathbf{e} at position \mathbf{x} and time t , P is the distribution type function of particle of macroscopic external force Φ moving with velocity \mathbf{e} and Q_{col} is the Bhatnagar-Gross-

Krook (BGK) collision operator defined by (see [19]):

$$Q_{col}(\phi(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})) = -\frac{1}{\tau(\mathbf{x}, t)} (\phi(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) - \phi^{eq}(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})), \quad (11.18)$$

where ϕ^{eq} is the Maxwell-Boltzmann equilibrium distribution function and τ is the dimensionless relaxation time.

LBM leads us to approximate (11.16) to recover reaction-diffusion equation (11.15) with Chapman-Enskog expansion. In the method of Chapman-Enskog the distribution function ϕ is expanded as : $\phi = \phi^{(0)} + \epsilon\phi^{(1)} + \epsilon^2\phi^{(2)} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \epsilon^k \phi^{(k)}$, which can be regarded as a power series in a small variable ϵ or an expression that keeps track of the relative orders of magnitude of the different terms through the scaling parameter ϵ (the so-called Kundsen number). The distribution functions $\phi^{(0)}$, $\phi^{(1)}$ and $\phi^{(2)}$ represent the zero, first and second approximation to the distribution function ϕ , and so on.

Remark 11.2 .

It is important to note that ϕ^{eq} is an exact solution of the Chapman-Enskog's zero-order approximation of the Boltzmann equation (see [75]). □

The numerical solution of Boltzmann equation (11.16) requires to discretize the configuration spaces, velocities and time. For that, we discretize $\mathcal{Q} = \Omega \times (0, T)$ in time and space. Then we consider a regular lattice \mathcal{L} with typical mesh size Δx and time step size Δt , and we define streaming lattice speed $c = \Delta x / \Delta t$ and lattice sound speed C_s by $3C_s^2 = c^2$. We note $(\mathbf{e}_i)_{i=0, N-1}$ the discrete set of N admissible particle velocities (the magnitude of each \mathbf{e}_i depends on the speed c) and we assume that for each node \mathbf{x} of lattice \mathcal{L} , and each \mathbf{e}_i , the point $\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t$ is also a node of the lattice \mathcal{L} . For the latter, we use the so-called $D2QN$ LBM scheme (i.e., 2-dimensional and N velocity vectors).

Remark 11.3 .

Since the velocities \mathbf{e}_i are constant vectors in space-time variables, then, for sufficiently regular scalar function Ξ , we have

$$\mathbf{e}_i \cdot \nabla \Xi = \text{div}(\mathbf{e}_i \Xi). \quad (11.19)$$

□

First, we consider the finite discrete-velocity system of the Boltzmann equation with the finite discrete velocity \mathbf{e}_i , for $i = 0, N - 1$ (by discretizing the velocity space by the discrete set of microscopic velocities)

$$\frac{\partial \phi_i(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla \phi_i(\mathbf{x}, t) = \mathcal{J}_i(\mathbf{x}, t) \quad (11.20)$$

where, for each particle on the lattice, we associate discrete functions, for $i = 0, N - 1$, $\phi_i(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}_i)$, $\phi_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \phi^{eq}(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}_i)$ and $\mathcal{J}_i(\mathbf{x}, t) = \mathcal{J}(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}_i)$, and the discrete operator Φ_i of Φ , which describes the probability of streaming in one particular direction.

The aim of the so-called LBM scheme is to compute the distribution function of particle $(\phi_i(\mathbf{x}, t))_{i=0, N}$ for $\mathbf{x} \in \mathcal{L}$ and discrete values of time t by solving the discretization of the Boltzmann's equation (11.20) in two steps (for each time): collision and streaming processes. Then, by

using a second order time integration scheme to approximate (11.20) (by limiting physical space to a lattice and velocity space to the discrete set of microscopic velocities), we can obtain

$$\begin{aligned} \phi_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = & \phi_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau(\mathbf{x}, t)} (\phi_i(\mathbf{x}, t) - \phi_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) \\ & + \Delta t \Phi_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla \right) \Phi_i(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (11.21)$$

which can be decomposed into the two key sub-steps i.e. collision and streaming. The collision process is local in space and is given for each node \mathbf{x} by:

$$\begin{aligned} \phi_i^{col}(\mathbf{x}, t) = & \phi_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau(\mathbf{x}, t)} (\phi_i(\mathbf{x}, t) - \phi_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) \\ & + \Delta t \Phi_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla \right) \Phi_i(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (11.22)$$

Then we can formally summarize the streaming step as a translation in post-collision distribution function fields. For each node, the post-collision distribution function $\phi_i^{col}(\mathbf{x}, t)$ will replace post-collision distribution function of the neighbor node $\phi_i^{col}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t)$ according to velocity \mathbf{e}_i (Fig. 11.4). So, streaming process is given for each velocity \mathbf{e}_i and in a step time Δt by:

$$\phi_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = \phi_i^{col}(\mathbf{x}, t) \quad (\text{the propagation of Lattice Boltzmann scheme}). \quad (11.23)$$

Finally, we recover governing macroscopic variable Θ by a summation of microscopic particle distribution function ϕ_i , $i = 1, N$ as follows (which is a discrete approximation of the integral given in (11.17))

$$\sum_{i=0}^N \phi_i(\mathbf{x}, t) = \Theta(\mathbf{x}, t), \quad \text{for } \mathbf{x} \in \mathcal{L} \text{ and discrete values of time } t. \quad (11.24)$$

In this paper, we consider the popular two-dimensional $D2Q9$ lattice, which involves 9 velocity vectors (i.e. $N = 9$). The microscopic velocities \mathbf{e}_i , for $i = 0, 8$ in $D2Q9$ are given as (see Figure 11.3)

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_0 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{e}_i &= c \begin{pmatrix} \cos \left((i-1) \frac{\pi}{2} \right) \\ \sin \left((i-1) \frac{\pi}{2} \right) \end{pmatrix}, \quad \text{for } i = 1, 2, 3, 4, \\ \mathbf{e}_i &= \sqrt{2}c \begin{pmatrix} \cos \left((i-\frac{9}{2}) \frac{\pi}{2} \right) \\ \sin \left((i-\frac{9}{2}) \frac{\pi}{2} \right) \end{pmatrix}, \quad \text{for } i = 5, 6, 7, 8. \end{aligned}$$

According to the expression of the microscopic velocities \mathbf{e}_i , we prove easily that

$$\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i = \sum_{i=0}^8 w_i \mathbf{e}_i = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (11.25)$$

and

$$\sum_{i=0}^8 w_i \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i = C_s^2 \mathbf{I}_d, \quad (11.26)$$

where the weight vector $\mathbf{w} = (w_0, \dots, w_8)$ is defined by

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^8 w_i &= 1, \quad w_0 = 4/9, \\ w_1 = w_2 = w_3 = w_4 &= 1/9 \text{ and } w_5 = w_6 = w_7 = w_8 = 1/36. \end{aligned} \quad (11.27)$$

Remark 11.4 .

With using D2Q9 model, we define a 9-speed square lattice with square elements. It is also possible to use D2Q7 model to obtain a 7-speed hexagonal lattice with triangular elements or to define other types of quadrature if it is needed. In all cases, we have to care about geometric properties. Indeed, respect summations (11.25) and (11.26) is necessary to obtain a convergent method. \square

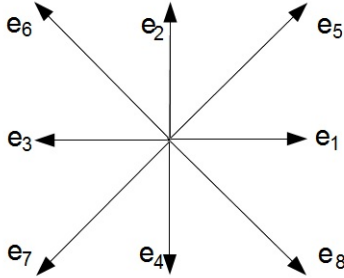


Figure 11.3: Particle velocities for D2Q9 LBM

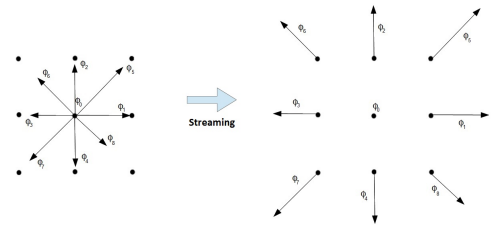


Figure 11.4: Streaming process of a lattice node

Remark 11.5 .

During streaming and collision processes, in order to satisfy boundary conditions, the boundary nodes need special treatments on distribution functions, which are essential to stability and accuracy of the method. We use extrapolation methods [69] and modified bounce-back methods [137], [95], [136]. \square

LBM for coupled system

In this part, we detail the modified coupled LBM presented in [46] , adapted from [135] with introducing LBM for elliptic equations proposed in [38]. We begin with the introduction of three Lattice Boltzmann type equations, which are associated to the three equations of the coupled system of parabolic and elliptic equations (11.14), respectively. Then, we define discrete equilibrium functions, source terms, nonlinear operators and relaxation time associated to each equation as in previous section. So, we associate the repartition functions of particle moving with velocity \mathbf{e}_i , with $i = 0, \dots, 8$, f_i , g_i and h_i for ρ , ρ_e and ρ_T , respectively.

The discrete LBM equation for the first equation of (11.14), which is parabolic, can be given

by (at node \mathbf{x} and time variable t)

$$\begin{aligned}
f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) &= f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_1(\mathbf{x}, t)} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) \\
&\quad + \Delta t S_i^1(\mathbf{x}, t; \nabla \rho, \nabla \rho_e) \\
&\quad + \Delta t F_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla \right) F_i(\mathbf{x}, t), \tag{11.28}
\end{aligned}$$

where $\tau_1(\mathbf{x}, t)$ is the dimensionless relaxation factor, $F_i(\mathbf{x}, t)$ is the discrete source term associated to operator $F(\mathbf{x}, t; \rho, \rho_e)$, $S_i^1(\mathbf{x}, t; \nabla \rho, \nabla \rho_e)$ is a link function (between the first and second equations of (11.14)) related to gradients $\nabla \rho$ and $\nabla \rho_e$.

For the two elliptic equations of (11.14), for a fixed time t , the discrete pseudo-time-stepping LBM equations can be given (at node \mathbf{x} and pseudo time variables r and s)

$$\begin{aligned}
g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta r, r + \Delta r; t) &= g_i(\mathbf{x}, r; t) - \frac{1}{\tau_2(\mathbf{x}, t)} (g_i(\mathbf{x}, r; t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, r; t)) \\
&\quad + \Delta r S_i^2(\mathbf{x}, r; t, \nabla \rho, \nabla \tilde{\rho}_e) \\
&\quad + \Delta r G_i(\mathbf{x}, r; t) + \frac{\Delta r^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla \right) G_i(\mathbf{x}, r; t), \tag{11.29}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
h_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta s, s + \Delta s; t) &= h_i(\mathbf{x}, s; t) - \frac{1}{\tau_3(\mathbf{x}, t)} (h_i(\mathbf{x}, s; t) - h_i^{eq}(\mathbf{x}, s; t)) \\
&\quad + \Delta s H_i(\mathbf{x}, s; t) + \frac{\Delta s^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial s} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla \right) H_i(\mathbf{x}, s; t), \tag{11.30}
\end{aligned}$$

where Δr and Δs are given time-steps, $\tau_2(\mathbf{x}, t)$ and $\tau_3(\mathbf{x}, t)$ are the dimensionless relaxation factors, $g_i(\mathbf{x}, r; t)$ and $h_i(\mathbf{x}, s; t)$ are the distribution functions of particle moving with velocity \mathbf{e}_i at node \mathbf{x} and times r and s , $G_i(\mathbf{x}, r; t)$ and $H_i(\mathbf{x}, s; t)$ are the discrete source terms associated respectively to operators $\tilde{G}(\mathbf{x}, r; t, \rho, \tilde{\rho}_e)$ and $\tilde{H}(\mathbf{x}, s; t, \tilde{\rho}_T)$. The term $S_i^2(\mathbf{x}, r; t, \nabla \rho, \nabla \tilde{\rho}_e)$ is the second link function (between the first and second equations of (11.14)) related to gradients $\nabla \rho$ and $\nabla \tilde{\rho}_e$.

Then, after each time step, we obtain new particular repartitions which lead us to recover governing macroscopic potentials ρ , $\tilde{\rho}_e$ and $\tilde{\rho}_T$ with following summations:

$$\sum_{i=0}^8 f_i(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t), \tag{11.31}$$

$$\frac{1}{1 - w_0} \sum_{i=0}^8 g_i(\mathbf{x}, r; t) = \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t), \tag{11.32}$$

$$\frac{1}{1 - w_0} \sum_{i=0}^8 h_i(\mathbf{x}, s; t) = \tilde{\rho}_T(\mathbf{x}, s; t). \tag{11.33}$$

The two elliptic equations of system (11.14) associated to the pseudo time variables r and s

induce subroutines in order to reach the following convergence:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t) = \rho_e(\mathbf{x}, t), \quad (11.34)$$

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \tilde{\rho}_T(\mathbf{x}, s; t) = \rho_T(\mathbf{x}, t), \quad (11.35)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \tilde{G}(\mathbf{x}, r; t, \rho, \tilde{\rho}_e) = G(\mathbf{x}, t; \rho, \rho_e) \quad (11.36)$$

and

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \tilde{H}(\mathbf{x}, s; t, \tilde{\rho}_T) = H(\mathbf{x}, t; \rho_T). \quad (11.37)$$

Now we define equilibrium functions, source terms functions, linked functions and the three dimensionless factors τ_1, τ_2, τ_3 . The local equilibrium distribution functions are given by ($\forall i = 0, \dots, 8$)

$$f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_i \rho(\mathbf{x}, t), \quad (11.38)$$

$$g_i^{eq}(\mathbf{x}, r; t) = \begin{cases} w_i \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t) & \text{for } i \neq 0, \\ (w_0 - 1) \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t) & \text{for } i = 0 \end{cases} \quad (11.39)$$

$$h_i^{eq}(\mathbf{x}, s; t) = \begin{cases} w_i \tilde{\rho}_T(\mathbf{x}, s; t) & \text{for } i \neq 0, \\ (w_0 - 1) \tilde{\rho}_T(\mathbf{x}, s; t) & \text{for } i = 0. \end{cases} \quad (11.40)$$

According to (11.25) and (11.26), we can prove easily that

$$\sum_{i=0}^8 f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t), \quad (11.41)$$

$$\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11.42)$$

$$\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = C_s^2 \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{I}_d, \quad (11.43)$$

$$\sum_{i=0}^8 g_i^{eq}(\mathbf{x}, r; t) = 0, \quad (11.44)$$

$$\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i g_i^{eq}(\mathbf{x}, r; t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11.45)$$

$$\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i g_i^{eq}(\mathbf{x}, r; t) = C_s^2 \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t) \mathbf{I}_d, \quad (11.46)$$

$$\sum_{i=0}^8 h_i^{eq}(\mathbf{x}, s; t) = 0, \quad (11.47)$$

$$\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i h_i^{eq}(\mathbf{x}, s; t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11.48)$$

$$\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i h_i^{eq}(\mathbf{x}, s; t) = C_s^2 \tilde{\rho}_T(\mathbf{x}, s; t) \mathbf{I}_d. \quad (11.49)$$

Remark 11.6 .

There is no uniqueness of equilibrium function definition. According to implementation choices and type of PDE, we can choose more complex forms which are more efficient in term of implementation. This choice only depends on the definitions of link functions S_i^1 and S_i^2 , and time relaxations τ_1 and τ_2 . Indeed, we can take into account nonlinear diffusion operators in relaxation terms τ_1 and τ_2 , and we can merge equilibrium and link functions (see e.g. [132]). \square

Then, we can define the source terms F_i , G_i and H_i , which are discrete approximations of nonlinear operator and source terms of system (11.14), as follows ($\forall i = 0, \dots, 8$)

$$F_i(\mathbf{x}, t) = w_i F(\mathbf{x}, t; \rho, \rho_e), \quad (11.50)$$

$$G_i(\mathbf{x}, r; t) = w_i \tilde{G}(\mathbf{x}, r; t, \rho, \tilde{\rho}_e), \quad (11.51)$$

$$H_i(\mathbf{x}, s; t) = w_i \tilde{H}(\mathbf{x}, s; t, \tilde{\rho}_T). \quad (11.52)$$

According again to (11.25) and (11.26), we can derive the following relations

$$\sum_{i=0}^8 F_i(\mathbf{x}, t) = F(\mathbf{x}, t; \rho, \rho_e), \quad (11.53)$$

$$\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i F_i(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11.54)$$

$$\sum_{i=0}^8 G_i(\mathbf{x}, r; t) = \tilde{G}(\mathbf{x}, r; t, \rho, \tilde{\rho}_e), \quad (11.55)$$

$$\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i G_i(\mathbf{x}, r; t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11.56)$$

$$\sum_{i=0}^8 H_i(\mathbf{x}, t) = \tilde{H}(\mathbf{x}, s; t, \tilde{\rho}_T), \quad (11.57)$$

$$\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i H_i(\mathbf{x}, s; t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (11.58)$$

Similarly, we define the first link function S_i^1 associate to the first equation of (11.14) and equation (11.28) by ($\forall i = 0, \dots, 8$)

$$S_i^1(\mathbf{x}, t; \nabla \rho, \nabla \rho_e) = w_i (\beta_\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_i \cdot \nabla \rho_e(\mathbf{x}, t) + \alpha_\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_i \cdot \nabla \rho(\mathbf{x}, t)), \quad (11.59)$$

and the second link function S_i^2 associate to the second equation of (11.14) and equation (11.29) as ($\forall i = 0, \dots, 8$)

$$S_i^2(\mathbf{x}, r; t, \nabla \rho, \nabla \tilde{\rho}_e) = w_i (\beta_{\rho_e}(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_i \cdot \nabla \rho(\mathbf{x}, t) + \alpha_{\rho_e}(\mathbf{x}, t) \mathbf{e}_i \cdot \nabla \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t)), \quad (11.60)$$

where we choose $\alpha_\rho, \alpha_{\rho_e}, \beta_\rho, \beta_{\rho_e}$ to be:

$$\alpha_\rho(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_1(\mathbf{x}, t)C_s^2\Delta t} \left(K_{ic}(\mathbf{x}, t) + C_s^2\Delta t \left(\frac{1}{2} - \tau_1(\mathbf{x}, t) \right) \right), \quad (11.61)$$

$$\beta_\rho(\mathbf{x}, t) = \frac{-K_{ic}(\mathbf{x}, t)}{\tau_1(\mathbf{x}, t)C_s^2\Delta t}, \quad (11.62)$$

$$\alpha_{\rho_e}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_2(\mathbf{x}, t)C_s^2\Delta r} \left((K_{ic}(\mathbf{x}, t) + K_{ec}(\mathbf{x}, t)) + C_s^2\Delta r \left(\frac{1}{2} - \tau_2(\mathbf{x}, t) \right) \right), \quad (11.63)$$

$$\beta_{\rho_e}(\mathbf{x}, t) = \frac{-K_{ic}(\mathbf{x}, t)}{\tau_2(\mathbf{x}, t)C_s^2\Delta r}. \quad (11.64)$$

Remark 11.7 .

As values α_ρ and α_{ρ_e} defined by the equations (11.61) and (11.64) depend on relaxation factors τ_1 and τ_2 , we can choose them as arbitrary nonzero constants. However, for the relaxation time τ_3 , in order to recover relaxation tensor $K_T \mathbf{I}_d$ in the governing elliptic equation, we can define it as

$$\tau_3(\mathbf{x}, t) = \frac{K_T(\mathbf{x}, t)}{C_s^2\Delta s} + \frac{1}{2}. \quad (11.65)$$

By using the relations (11.25) and (11.26), we can deduce the following properties

$$\sum_{i=0}^8 S_i^1(\mathbf{x}, t; \nabla\rho, \nabla\rho_e) = 0, \quad (11.66)$$

$$\sum_{i=0}^8 S_i^2(\mathbf{x}, r; t, \nabla\rho, \nabla\tilde{\rho}_e) = 0, \quad (11.67)$$

$$\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i S_i^1(\mathbf{x}, t, \nabla\rho, \nabla\rho_e) = C_s^2(\beta_\rho(\mathbf{x}, t)\nabla\rho_e(\mathbf{x}, t) + \alpha_\rho(\mathbf{x}, t)\nabla\rho(\mathbf{x}, t)), \quad (11.68)$$

$$\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i S_i^2(\mathbf{x}, r; t, \nabla\rho, \nabla\tilde{\rho}_e) = C_s^2(\beta_{\rho_e}(\mathbf{x}, t)\nabla\rho(\mathbf{x}, t) + \alpha_{\rho_e}(\mathbf{x}, t)\nabla\tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t)). \quad (11.69)$$

Remark 11.8 .

The link functions S_i^1 and S_i^2 depend on the gradient of functions ρ , ρ_e and $\tilde{\rho}_e$. The approximation of these gradients can be directly derived from Chapman-Enskog expansion with distribution functions f_i and g_i (see the below equations (11.101) and (11.111)), or with a finite difference approximation type method. \square

We can now prove formally that the above coupled LBM recovers the governing macroscopic system (11.14).

Proposition 11.1 .

If local equilibrium distribution functions f_i^{eq} , g_i^{eq} and h_i^{eq} satisfy relations (11.41)-(11.49), source terms F_i , G_i , H_i respect properties given by equations (11.53)-(11.58), properties (11.66)-(11.69)

hold for link functions S_i^1 and S_i^2 , then, for $\tau_3 = \frac{K_T}{C_s^2 \Delta t} + \frac{1}{2}$, the above coupled LBM recover correctly macroscopic system (11.14) through the Chapman-Enskog analysis.

Proof: To derive the macroscopic equation from developed coupled lattice BGK model, the Chapman-Enskog expansion is applied under the assumption of small Kundsens number ϵ (which can be a ratio between a characteristic length L and the particular mean free path l) to determine equilibrium functions, source terms and link functions. Each function is decomposed around its equilibrium state with different scale of perturbations. Then, the difference between associated LBE and Taylor series of the distribution function lead us to recover the governing macroscopic equation.

Before to prove the main result of proposition, we introduce the main steps of demonstration with applying Chapman-Enskog expansion to distribution functions ϕ_i of LBE (11.21) in order to recover governing reaction-diffusion equation (11.15). The macroscopic variable Θ is defined in terms of distribution functions as

$$\Theta = \sum_{i=1}^8 \phi_i = \sum_{i=1}^8 \phi_i^{eq}, \quad \text{with} \quad \sum_{i=1}^8 \mathbf{e}_i \phi_i^{eq} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (11.70)$$

$$\text{and} \quad \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \phi_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = C_s^2 \Theta(\mathbf{x}, t) \mathbf{I}_d.$$

For every distribution functions ϕ_i the Chapman-Enskog expansion is applied with the small parameter ϵ as:

$$\begin{aligned} \phi_i &= \phi_i^{(0)} + \epsilon \phi_i^{(1)} + \epsilon^2 \phi_i^{(2)} + \dots \\ &= \phi_i^{eq} + \epsilon \phi_i^{(1)} + \epsilon^2 \phi_i^{(2)} + \dots, \end{aligned} \quad (11.71)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \epsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2}, \quad (11.72)$$

$$\nabla = \epsilon \nabla_1, \quad \text{div}_1 = \nabla_1 \cdot, \quad (11.73)$$

where t_i is the time scale, for $i = 1, 2$, \mathbf{x}_1 is the space scale and $\nabla_1 = \nabla_{\mathbf{x}_1}$ is the gradient with respect to \mathbf{x}_1 , and we assume that every source term Φ_i take the form

$$\begin{aligned} \Phi_i &= \epsilon \Phi_i^{(1)} + \epsilon^2 \Phi_i^{(2)}, \quad \text{with} \\ \sum_{i=0}^8 \Phi_i^{(n)}(\mathbf{x}, t) &= \Phi^{(n)}(\mathbf{x}, t) \quad \text{and} \\ \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i \Phi_i^{(n)}(\mathbf{x}, t) &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (11.74)$$

Remark 11.9 .

The Chapman-Enskog expansion is usually called multi-scale Chapman-Enskog expansion, because this ansatz lead us to decompose every function according to several perturbation scales. But we take into account the multi-scale nature of a biological or physical problem through the relaxation-time $\tau(\mathbf{x}, t)$ which is related to diffusion properties and nondimensionalization parameters.

Propriété 11.1 .

The functions $\phi_i^{(0)}$ are associated to unperturbed state (i.e.: $\forall i = 0, \dots, 8 : \phi_i^{(0)} = \phi_i^{eq}$). Moreover, since each scale of perturbation is linearly independent of each other, we can deduce that (for all $n \in \mathbb{N}^*$)

$$\sum_{i=0}^8 \phi_i^{(n)} = 0. \quad (11.75)$$

Then, we express the difference between (11.21) and Taylor series of distribution function ϕ_i moving with velocity \mathbf{e}_i . Indeed Taylor series also lead us to approximate the term $\phi_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t)$ as:

$$\phi_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = \phi_i(\mathbf{x}, t) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Delta t^k}{k!} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla \right)^k \phi_i(\mathbf{x}, t), \quad (11.76)$$

where

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla \right)^k = \sum_{n=0}^k \binom{k}{n} \frac{\partial^{k-n}}{\partial t^{k-n}} (\mathbf{e}_i \cdot \nabla)^n,$$

with

$$(\mathbf{e}_i \cdot \nabla)^n = (\mathbf{e}_i \cdot \nabla) (\mathbf{e}_i \cdot \nabla)^{n-1}.$$

So, by using the expressions (11.74)-(11.73), Taylor series (11.76) and discrete LBE (11.21) become ($\forall i = 0, \dots, 8$)

$$\begin{aligned} \phi_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) &= \left(\phi_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) + \varepsilon \phi_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \dots \right) \\ &+ \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Delta t^k}{k!} \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \mathbf{e}_i \cdot (\varepsilon \nabla_1) \right)^k \left(\phi_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) + \varepsilon \phi_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \dots \right) \end{aligned} \quad (11.77)$$

and

$$\begin{aligned} \phi_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) &= \left(1 - \frac{1}{\tau} \right) \left(\phi_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) + \varepsilon \phi_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \dots \right) \\ &+ \frac{1}{\tau} \phi_i^{eq}(\mathbf{x}, t) + \Delta t \left(\varepsilon \Phi_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \varepsilon^2 \Phi_i^{(2)}(\mathbf{x}, t) \right) \\ &+ \frac{\Delta t^2}{2} \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \varepsilon \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) \left(\varepsilon \Phi_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \varepsilon^2 \Phi_i^{(2)}(\mathbf{x}, t) \right). \end{aligned} \quad (11.78)$$

By calculating the difference between relations (11.78) and (11.77), we can obtain

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{\tau} \left(\phi_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) + \varepsilon \phi_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \dots \right) \\ &+ \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Delta t^k}{k!} \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \mathbf{e}_i \cdot (\varepsilon \nabla_1) \right)^k \left(\phi_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) + \varepsilon \phi_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \dots \right) \\ &- \frac{1}{\tau} \phi_i^{eq}(\mathbf{x}, t) - \Delta t \left(\varepsilon \Phi_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \varepsilon^2 \Phi_i^{(2)}(\mathbf{x}, t) \right) \\ &- \frac{\Delta t^2}{2} \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \varepsilon \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) \left(\varepsilon \Phi_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \varepsilon^2 \Phi_i^{(2)}(\mathbf{x}, t) \right), \end{aligned} \quad (11.79)$$

which can be rewritten as follows (according to different scales of ε)

$$0 = \Psi_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) + \varepsilon \Psi_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \varepsilon^2 \Psi_i^{(2)}(\mathbf{x}, t) + \dots, \quad (11.80)$$

where probability density functions $\Psi_i^{(n)}$ regroup all terms of (11.79) in order of ε^n , $n = 0, \dots$, respectively (which are partial differential equations for $n \neq 0$)

$$\Psi_i^{(0)} = \frac{1}{\tau} \left(\phi_i^{(0)} - \phi_i^{eq} \right) = 0, \quad (11.81)$$

$$\Psi_i^{(1)} = \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) \phi_i^{(0)} + \frac{1}{\tau} \phi_i^{(1)} - \Delta t \Phi_i^{(1)} = 0, \quad (11.82)$$

$$\begin{aligned} \Psi_i^{(2)} = & \left(\frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right)^2 + \Delta t \frac{\partial}{\partial t_2} \right) \phi_i^{(0)} + \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) \phi_i^{(1)} \\ & + \frac{1}{\tau} \phi_i^{(2)} - \Delta t \Phi_i^{(2)} - \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) \Phi_i^{(1)} = 0, \end{aligned} \quad (11.83)$$

...

As functions Ψ_i are density probability functions, summation along each velocity \mathbf{e}_i lead us to recover macroscopic functions, noted $\Psi^{(n)}$ at order n . Then, we recover macroscopic functions with

$$\sum_{i=0}^8 \left(\Psi_i^{(0)} + \varepsilon \Psi_i^{(1)} + \dots \right) = \Psi^{(0)} + \varepsilon \Psi^{(1)} + \dots \quad (11.84)$$

and with an order N accuracy as:

$$\Psi^{(0)} + \varepsilon \Psi^{(1)} + \dots + \varepsilon^{N-1} \Psi^{(N-1)} + \mathcal{O}(\varepsilon^N) = \Psi + \mathcal{O}(\varepsilon^N). \quad (11.85)$$

Finally, by retaining terms up to $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$, taking (11.82) times ε plus (11.83) times ε^2 , summing over i and using (11.81), (11.70), (11.72), (11.73) and (11.75), we can obtain, by a suitable choice of equilibrium distribution ϕ_i^{eq} (with similar properties as f_i^{eq} , g_i^{eq} and h_i^{eq} given in (11.41)-(11.49)), source terms Φ_i (with similar properties as F_i , G_i and H_i given in (11.53)-(11.58)) and relaxation time $\tau(\mathbf{x}, t) = \frac{K(\mathbf{x}, t)}{C_s^2 \Delta t} + \frac{1}{2}$, the approximation of the general reaction-diffusion equation (11.15).

In fact, according to (11.74), (11.70), (11.75) and using the relation (11.19), we can prove easily from (11.82) that

$$\Psi^{(1)} = \Delta t \left(\frac{\partial \Theta(\mathbf{x}, t)}{\partial t_1} - \Phi^{(1)}(\mathbf{x}, t) \right). \quad (11.86)$$

To treat the second order terms, we rewrite $\frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right)^2 \phi_i^{eq}$ with using first order term given by (11.82) as:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right)^2 \phi_i^{eq} &= \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) \left(-\frac{1}{\tau} \phi_i^{(1)} + \Delta t \Phi_i^{(1)} \right), \\ &= -\Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) \left(\frac{1}{2\tau} \phi_i^{(1)} \right) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) \Phi_i^{(1)} \end{aligned}$$

and then $\Psi_i^{(2)}$ becomes

$$\begin{aligned} \Psi_i^{(2)} &= \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) \left(\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \phi_i^{(1)} \right) + \frac{1}{\tau} \phi_i^{(2)} \\ &\quad + \Delta t \left(\frac{\partial}{\partial t_2} \right) \phi_i^{eq} - \Delta t \Phi_i^{(2)}. \end{aligned} \quad (11.87)$$

Summing over i the terms of equation (11.87), according again to (11.74),(11.70), (11.75) and using the relation (11.19), we can deduce that

$$\Psi^{(2)} = \Delta t \left(\frac{\partial \Theta(\mathbf{x}, t)}{\partial t_2} - \Phi^{(2)} + \text{div}_1 \left(\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i \phi_i^{(1)} \right) \right).$$

To express $\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i \phi_i^{(1)}$, we use relation (11.82) and properties (11.74),(11.70) (using (11.19))

$$\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i \phi_i^{(1)} = -\tau C_s^2 \Delta t \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \nabla_1 \Theta.$$

According to the expression of τ we can deduce that $\tau C_s^2 \Delta t \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) = K$, and then

$$\Psi^{(2)} = \Delta t \left(\frac{\partial \Theta(\mathbf{x}, t)}{\partial t_2} - \text{div}_1 (K \nabla_1 \Theta(\mathbf{x}, t)) - \Phi^{(2)} \right). \quad (11.88)$$

Then, we can recompose Ψ with using (11.81), (11.85), (11.86) and (11.88) and deduce the following approximation of equation (11.15) as

$$\frac{\partial \Theta(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \text{div}(K(\mathbf{x}, t) \nabla \Theta(\mathbf{x}, t)) - \Phi(\mathbf{x}, t; \Theta) = 0. \quad (11.89)$$

Now, we will follow the previous process and steps for each equation of bidomain system (11.14) and its associate discrete LBE system (11.28)-(11.30). For this, we perform the Taylor expansion on (11.28)-(11.30) up to terms with order of $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$ and we use ansatz given by equations (11.71)-(11.73) where distribution functions f_i , g_i and h_i successively replace ϕ_i with order 2 expansion given by equation (11.71) and we assume that the source terms and link functions F_i, G_i, H_i, S_i^1

and S_i^2 take the form (which are defined like source term Φ_i with order 2 expansion)

$$F_i = \varepsilon F_i^{(1)} + \varepsilon^2 F_i^{(2)}, \text{ with } \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i F_i^{(j)} = 0, \text{ for } j = 1, 2, \quad (11.90)$$

$$S_i^1 = \varepsilon S_i^{1,(1)}, \text{ with } \sum_{i=0}^8 S_i^{1,(1)} = 0, \quad (11.91)$$

$$G_i = \varepsilon G_i^{(1)} + \varepsilon^2 G_i^{(2)}, \text{ with } \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i G_i^{(j)} = 0, \text{ for } j = 1, 2, \quad (11.92)$$

$$S_i^2 = \varepsilon S_i^{2,(1)}, \text{ with } \sum_{i=0}^8 S_i^{2,(1)} = 0, \quad (11.93)$$

$$H_i = \varepsilon H_i^{(1)} + \varepsilon^2 H_i^{(2)}, \text{ with } \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i H_i^{(j)} = 0, \text{ for } j = 1, 2. \quad (11.94)$$

First, we consider the first equation of (11.14) and its associate discrete LBE system (11.28). According to (11.90)-(11.91) and using similar arguments to derive the terms $\Psi_i^{(n)}$ in (11.81)-(11.87), we can obtain the following terms $\mathcal{P}_i^{(n)}$, $n = 0, 2$ (after division by Δt)

$$\mathcal{P}_i^{(0)} = -\frac{1}{\Delta t \tau_1} (f_i^{(0)} - f_i^{eq}) = 0, \quad (11.95)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_i^{(1)} &= \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) f_i^{eq} + \frac{1}{\tau_1 \Delta t} f_i^{(1)} \\ &\quad - S_i^{1,(1)} - F_i^{(1)} = 0, \end{aligned} \quad (11.96)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_i^{(2)} &= \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) f_i^{(1)} \\ &\quad + \left(\frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right)^2 \right) f_i^{eq} \\ &\quad + \frac{1}{\tau_1 \Delta t} f_i^{(2)} - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) F_i^{(1)} - F_i^{(2)} = 0. \end{aligned} \quad (11.97)$$

Summing over i the terms of equation (11.96) and using the fact that $\sum_{i=0}^8 f_i^{(n)} = 0$, for $n \neq 0$, and the relations (11.41), (11.42), (11.53), (11.66), (11.90) and (11.91) we obtain

$$\epsilon \mathcal{P}^{(1)} = \epsilon \sum_{i=0}^8 \mathcal{P}_i^{(1)} = \epsilon \frac{\partial \rho}{\partial t_1} - \varepsilon F^{(1)} = 0. \quad (11.98)$$

By rewriting the equation (11.97) with the equation (11.96), we obtain

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_i^{(2)} &= \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) \left(\left(1 - \frac{1}{2\tau_1}\right) f_i^{(1)} \right) \\ &\quad + \frac{\partial f_i^{eq}}{\partial t_2} + \frac{1}{\tau_1 \Delta t} f_i^{(2)} \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) S_i^{1,(1)} - F_i^{(2)}. \end{aligned} \quad (11.99)$$

Summing over i the terms of equation (11.99) and using the fact that $\sum_{i=0}^8 f_i^{(n)} = 0$, for $n \neq 0$, Remark 11.3 and the relations (11.41), (11.42), (11.53), (11.66), (11.90) and (11.91) we obtain

$$\begin{aligned} \epsilon^2 \mathcal{P}^{(2)} &= \epsilon^2 \sum_{i=0}^8 \mathcal{P}_i^{(2)} = \epsilon^2 \frac{\partial \rho}{\partial t_2} + \operatorname{div} \left(\epsilon \left(1 - \frac{1}{2\tau_1}\right) \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i f_i^{(1)} \right) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} \left(\operatorname{div} \left(\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i S_i^1 \right) \right) - \epsilon^2 F^{(2)}, \end{aligned} \quad (11.100)$$

with $F^{(j)} = \sum_{i=0}^8 F_i^{(j)}$, for $j = 1, 2$.

Now we calculate $(1 - \frac{1}{2\tau_1})\epsilon \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i f_i^{(1)}$. From (11.96) (to express $\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i f_i^{(1)}$) and according to (11.19), (11.54), (11.68), (11.90) and (11.91), we can deduce

$$\left(1 - \frac{1}{2\tau_1}\right)\epsilon \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i f_i^{(1)} = -\left(1 - \frac{1}{2\tau_1}\right) C_s^2 \tau_1 \Delta t \nabla \rho + \tau_1 \Delta t \left(1 - \frac{1}{2\tau_1}\right) \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i S_i^1. \quad (11.101)$$

According to (11.68) and (11.101), the relation (11.100) becomes

$$\begin{aligned} \epsilon^2 \mathcal{P}^{(2)} &= \epsilon^2 \frac{\partial \rho}{\partial t_2} - \epsilon^2 F^{(2)} \\ &\quad + \operatorname{div} \left(C_s^2 \tau_1 \Delta t \left(\beta_\rho \nabla \rho_e + \left(\alpha_\rho + \left(1 - \frac{1}{2\tau_1}\right) \right) \nabla \rho \right) \right). \end{aligned} \quad (11.102)$$

Then (from (11.59), (11.61) and (11.62))

$$\epsilon^2 \mathcal{P}^{(2)} = \epsilon^2 \frac{\partial \rho}{\partial t_2} - \epsilon^2 F^{(2)} - \operatorname{div} (K_{ic} (\nabla \rho + \nabla \rho_e)). \quad (11.103)$$

Consequently, from (11.98) and (11.103), we can recover the macroscopic parabolic equation of (11.14) with

$$0 = \mathcal{P}^{(0)} + \varepsilon \mathcal{P}^{(1)} + \varepsilon^2 \mathcal{P}^{(2)} + \mathcal{O}(\varepsilon^3) = \frac{\partial \rho}{\partial t} - F - \operatorname{div} (K_{ic} (\nabla \rho + \nabla \rho_e)). \quad (11.104)$$

Second, for a fixed time t , we consider the second equation of (11.14) and its associate discrete

pseudo-time-stepping LBM system (11.29) (for pseudo-time variables r with $\frac{\partial}{\partial r} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial r_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial r_2}$ and pseudo-time step Δr). By using similar arguments to derive the terms $\mathcal{P}_i^{(n)}$, $n = 0, 2$, we can obtain the following terms (after division by Δr)

$$\mathcal{Q}_i^{(0)} = -\frac{1}{\Delta t \tau_2} (g_i^{(0)} - g_i^{eq}) = 0, \quad (11.105)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_i^{(1)} &= \left(\frac{\partial}{\partial r_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) g_i^{eq} \\ &\quad + \frac{1}{\tau_2 \Delta r} g_i^{(1)} - S_i^{2,(1)} - G_i^{(1)} = 0, \end{aligned} \quad (11.106)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_i^{(2)} &= \left(\frac{\partial}{\partial r_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) g_i^{(1)} \\ &\quad + \left(\frac{\partial}{\partial r_2} + \frac{\Delta r}{2} \left(\frac{\partial}{\partial r_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right)^2 \right) g_i^{eq} \\ &\quad + \frac{1}{\tau_2 \Delta r} g_i^{(2)} - \frac{\Delta r}{2} \left(\frac{\partial}{\partial r_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) G_i^{(1)} - G_i^{(2)} = 0. \end{aligned} \quad (11.107)$$

Summing over i the terms of equation (11.106) and using the fact that $\sum_{i=0}^8 g_i^{(n)} = 0$, for $n \neq 0$, and the relations (11.44), (11.45) and (11.93) we obtain

$$\mathcal{Q}^{(1)} = -\tilde{G}^{(1)}, \quad (11.108)$$

with $\tilde{G}^{(1)} = \sum_{i=0}^8 G_i^{(1)}$. By rewriting the equation (11.107) with the equation (11.106), we obtain

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_i^{(2)} &= \left(\frac{\partial}{\partial r_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) \left(\left(1 - \frac{1}{2\tau_2} \right) g_i^{(1)} \right) \\ &\quad + \frac{\partial g_i^{eq}}{\partial r_2} + \frac{1}{\tau_2 \Delta r} g_i^{(2)} \\ &\quad + \frac{\Delta r}{2} \left(\frac{\partial}{\partial r_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) S_i^{2,(1)} - G_i^{(2)}. \end{aligned} \quad (11.109)$$

Summing over i the terms of equation (11.109) and using the fact that $\sum_{i=0}^8 g_i^{(n)} = 0$, for $n \neq 0$,

$\sum_{i=0}^8 g_i^{eq} = 0$, Remark 11.3 and the relations (11.44), (11.45) and (11.93) we obtain

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 \mathcal{Q}^{(2)} &= \varepsilon^2 \sum_{i=0}^8 \mathcal{Q}_i^{(2)} = \operatorname{div} \left(\varepsilon \left(1 - \frac{1}{2\tau_2} \right) \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i g_i^{(1)} \right) \\ &\quad + \frac{\Delta r}{2} \left(\operatorname{div} \left(\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i S_i^2 \right) \right) - \varepsilon^2 \tilde{G}^{(2)}, \end{aligned} \quad (11.110)$$

with $\tilde{G}^{(2)} = \sum_{i=0}^8 G_i^{(2)}$.

Now we calculate $(1 - \frac{1}{2\tau_2})\epsilon \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i g_i^{(1)}$. From (11.106) and according to (11.19), (11.54), (11.69), (11.92) and (11.93), we can deduce

$$\left(1 - \frac{1}{2\tau_2}\right)\epsilon \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i g_i^{(1)} = -\left(1 - \frac{1}{2\tau_2}\right)C_s^2\tau_2\Delta r\nabla\tilde{\rho} + \tau_2\Delta r\left(1 - \frac{1}{2\tau_1}\right)\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i S_i^2. \quad (11.111)$$

According to (11.69) and (11.111), the relation (11.110) becomes

$$\epsilon^2\mathcal{Q}^{(2)} = -\epsilon^2\tilde{G}^{(2)} + \operatorname{div}\left(C_s^2\tau_2\Delta r\left(\beta_{\rho_e}\nabla\rho + (\alpha_{\rho_e} + (1 - \frac{1}{2\tau_2}))\nabla\tilde{\rho}_e\right)\right). \quad (11.112)$$

Then (from (11.60), (11.63) and (11.64))

$$\epsilon^2\mathcal{Q}^{(2)} = -\epsilon^2\tilde{G}^{(2)} - \operatorname{div}(K_{ic}\nabla\rho + (K_{ic} + K_{ec})\nabla\tilde{\rho}_e). \quad (11.113)$$

We can now sum the terms of order 0 to 2 to obtain the following equation (from (11.108) and (11.113))

$$0 = \mathcal{Q}^{(0)} + \epsilon\mathcal{Q}^{(1)} + \epsilon^2\mathcal{Q}^{(2)} + \mathcal{O}(\epsilon^3) = -\tilde{G} - \operatorname{div}(K_{ic}\nabla\rho + (K_{ic} + K_{ec})\nabla\tilde{\rho}_e). \quad (11.114)$$

To recover the first elliptic equation of system (11.14), we use the two limits (11.34) and (11.36) to write the following limit: (formally)

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow \infty} & \left(-\tilde{G}(\mathbf{x}, r; t, \rho, \rho_e) - \operatorname{div}(K_{ic}\nabla\rho(\mathbf{x}, t) + (K_{ic} + K_{ec})\nabla\tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t)) \right) \\ & = -G(\mathbf{x}, t; \rho, \rho_e) - \operatorname{div}(K_{ic}\nabla\rho(\mathbf{x}, t) + (K_{ic} + K_{ec})\nabla\rho_e(\mathbf{x}, t)). \end{aligned} \quad (11.115)$$

Finally, we apply the previous method to recover the governing second elliptic equation of the system (11.14). For that, for a fixed time t , we consider the discrete pseudo-time-stepping LBM system (11.30) (for pseudo-time variables s with $\frac{\partial}{\partial s} = \epsilon\frac{\partial}{\partial s_1} + \epsilon^2\frac{\partial}{\partial s_2}$ and pseudo-time step Δs). By using similar arguments to derive the terms $\mathcal{Q}_i^{(n)}$, $n = 0, 2$, we can obtain the following terms (after division by Δs)

$$\mathcal{R}_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau_3\Delta s}\left(h_i^{(0)} - h_i^{eq}\right) = 0, \quad (11.116)$$

$$\mathcal{R}_i^{(1)} = \left(\frac{\partial}{\partial s_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1\right)h_i^{eq} + \frac{1}{\tau_3\Delta s}h_i^{(1)} - H_i^{(1)} = 0, \quad (11.117)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_i^{(2)} & = \left(\frac{\partial}{\partial s_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1\right)h_i^{(1)} \\ & + \left(\frac{\partial}{\partial s_2} + \frac{\Delta s}{2}\left(\frac{\partial}{\partial s_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1\right)^2\right)h_i^{eq} \\ & + \frac{1}{\tau_3\Delta s}h_i^{(2)} - \frac{\Delta s}{2}\left(\frac{\partial}{\partial s_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1\right)H_i^{(1)} - H_i^{(2)} = 0. \end{aligned} \quad (11.118)$$

Summing over i the terms of equation (11.117) and using the fact that $\sum_{i=0}^8 h_i^{(n)} = 0$, for $n \neq 0$, and the relations (11.47) and (11.48) we obtain

$$\varepsilon \mathcal{R}^{(1)} = -\varepsilon \tilde{H}^{(1)}, \quad (11.119)$$

with $\tilde{H}^{(1)} = \sum_{i=0}^8 H_i^{(1)}$.

By rewriting the equation (11.118) with the equation (11.117), we obtain

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_i^{(2)} &= \left(\frac{\partial}{\partial s_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) \left(\left(1 - \frac{1}{2\tau_3}\right) h_i^{(1)} \right) \\ &\quad + \frac{\partial h_i^{eq}}{\partial s_2} + \frac{1}{\tau_3 \Delta r} h_i^{(2)} - H_i^{(2)}. \end{aligned} \quad (11.120)$$

Summing over i the terms of equation (11.120) and using the fact that $\sum_{i=0}^8 h_i^{(n)} = 0$, for $n \neq 0$, $\sum_{i=0}^8 h_i^{eq} = 0$, Remark 11.3 and the relations (11.47) and (11.48) we obtain

$$\varepsilon^2 \mathcal{R}^{(2)} = \varepsilon^2 \sum_{i=0}^8 \mathcal{R}_i^{(2)} = \operatorname{div} \left(\varepsilon \left(1 - \frac{1}{2\tau_3}\right) \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i h_i^{(1)} \right) - \varepsilon^2 \tilde{H}^{(2)}, \quad (11.121)$$

with $\tilde{H}^{(2)} = \sum_{i=0}^8 H_i^{(2)}$.

Now we calculate $\left(1 - \frac{1}{2\tau_3}\right) \varepsilon \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i h_i^{(1)}$. From (11.117) and according to (11.19), (11.58) and (11.65), we can deduce

$$\left(1 - \frac{1}{2\tau_3}\right) \varepsilon \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i h_i^{(1)} = -(1 - \frac{1}{2\tau_3}) C_s^2 \tau_3 \Delta s \nabla \tilde{\rho}_T = -K_T \nabla \tilde{\rho}_T. \quad (11.122)$$

According to (11.122), the relations (11.121) becomes

$$\varepsilon^2 \mathcal{R}^{(2)} = -\varepsilon^2 \tilde{H}^{(2)} - \operatorname{div} (K_T \nabla \tilde{\rho}_T). \quad (11.123)$$

We can now sum the terms of order 0 to 2 to obtain the following equation (from (11.119) and (11.123))

$$0 = \mathcal{R}^{(0)} + \varepsilon \mathcal{R}^{(1)} + \varepsilon^2 \mathcal{R}^{(2)} + \mathcal{O}(\varepsilon^3) = -\tilde{H} - \operatorname{div} (K_T \nabla \tilde{\rho}_T). \quad (11.124)$$

To recover the second elliptic equation of system (11.14), we use the two limits (11.35) and (11.37) to write the following limit (formally):

$$\begin{aligned} \lim_{s \rightarrow \infty} &\left(-\tilde{H}(\mathbf{x}, s; t, \rho_T) - \operatorname{div} (K_T \nabla \tilde{\rho}_T(\mathbf{x}, s; t)) \right) \\ &= -H(\mathbf{x}, t; \rho_T) - \operatorname{div} (K_T \nabla \rho_T(\mathbf{x}, t)). \end{aligned} \quad (11.125)$$

This completes the proof.

3.2 Treatment of ODE

Now, we present briefly the method to solve ODE satisfy by variable V on the interval $[s_1, s_2]$, with initial condition $V(\mathbf{x}, s_1) = V_0(\mathbf{x})$. As:

$$\frac{\partial V(\mathbf{x}, s)}{\partial s} = W(\mathbf{x}, s; V), \quad (11.126)$$

where operator W is defined by

$$W(\mathbf{x}, s; V) = \tilde{W}(\mathbf{x}, s) - \lambda(\mathbf{x})V(\mathbf{x}, s). \quad (11.127)$$

By using Gronwall Lemma we can deduce that

$$V(\mathbf{x}, s_2) = V_0(\mathbf{x})e^{-\lambda(\mathbf{x})(s_2-s_1)} + e^{-\lambda(\mathbf{x})s_1} \int_{s_1}^{s_2} \tilde{W}(\mathbf{x}, s)e^{\lambda(\mathbf{x})s} ds.$$

Then, according to approximation of derived integral by trapezoidal method between t_1 and t_2 we obtain the following approximation of V denoted also by V

$$V(., s_2) = V_0(.)e^{-\lambda(.(s_2-s_1)} + \frac{s_2 - s_1}{2} \left(\tilde{W}(., s_1) + \tilde{W}(., s_2)e^{\lambda(.(s_2-s_1)} \right). \quad (11.128)$$

In our case, we assume that for all $t \in [0; T - \Delta t]$ the ionic function U given by (11.3) looks like V given by (11.127) between t and $t + \Delta t$. So with thin enough discretization, we aim to reach an order 2 convergence space accuracy method to approximate ionic variable U with using relation (11.128).

3.3 Algorithm

After non-dimensionalization, mesh definition and initialization of initial conditions, parameters and data, the proposed algorithm to solve the full coupled heart and torso bidomain system can be summarized as follows

1. Initialization: $t=0$.
2. LBE according to time t by using (11.28) to compute $\rho(\mathbf{x}, t + \Delta t)$.
3. Trapezoidal method by using (11.128) to compute $U(\mathbf{x}, t + \Delta t)$.
4. Loop on new time variable r :
 - (a) LBE according to time r by using (11.29) to compute $\tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r + \Delta r; t + \Delta t)$ (i.e., approximation of $\rho_e(\mathbf{x}, t + \Delta t)$).

(b) If we don't reach the stopping criteria chosen to be:

$$|g_i(\mathbf{x}, r + \Delta r; t) - g_i(\mathbf{x}, r; t)| < C_{\rho_e} \Delta \mathbf{x}^{N_e}, \quad (11.129)$$

where C_{ρ_e} is a chosen constant and N_e the order of accuracy we want, set $r = r + \Delta r$ and go back to (4a).

5. Set $\rho_e(\mathbf{x}, t + \Delta t) := \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t + \Delta t)$.

6. Loop on new time variable s:

(a) LBE according to time s by using (11.30) to compute $\tilde{\rho}_T(\mathbf{x}, s + \Delta s; t + \Delta t)$ (i.e., approximation of $\rho_T(\mathbf{x}, t + \Delta t)$), with taking into account boundary condition (11.12) between ρ_T and ρ_e .

(b) If we don't reach the stopping criteria chosen to be:

$$|h_i(\mathbf{x}, s + \Delta s; t) - h_i(\mathbf{x}, s; t)| < C_{\rho_T} \Delta \mathbf{x}^{N_T}, \quad (11.130)$$

where C_{ρ_T} is a chosen constant and N_T the order of accuracy we want, set $s = s + \Delta s$ and go back to (6a).

7. Set $\rho_T(\mathbf{x}, t + \Delta t) := \tilde{\rho}_T(\mathbf{x}, s; t + \Delta t)$.

8. If $t \neq T$, set $t := t + \Delta t$ and go back to (2).

Remark 11.10 .

In order to parallelize the LBM, the main idea is to treat separately the collision and the streaming phases. The collision step is strictly local and can be computed on each node independently of its neighbors. Then, the streaming is just an exchange of data between its node of origin and the adjacent neighbor along velocity (see e.g. [116], [140], and references therein).

4 Numerical simulation and applications

To validate the capacity of our modified coupled LBM to deal with 2D bidomain systems, several situations are numerically simulated. In this study, we consider the phenomenological two-variable model proposed by Mitchell and Schaeffer [104]. The functions H_{ion} and \mathcal{I}_{ion} are given by:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{ion} &= -\frac{U}{\mathcal{T}_{in}} \frac{(\rho - \rho_{min})^2 (\rho_{max} - \rho)}{\rho_{max} - \rho_{min}} \\ &+ \frac{1}{\mathcal{T}_{out}} \frac{\rho - \rho_{min}}{\rho_{max} - \rho_{min}} \end{aligned} \quad (11.131)$$

and

$$H_{ion} = \begin{cases} \frac{U}{\mathcal{T}_{open}} - \frac{1}{\mathcal{T}_{open}(\rho_{max} - \rho_{min})^2} & \text{if } \rho < \rho_{gate}, \\ \frac{U}{\mathcal{T}_{close}} & \text{if } \rho \geq \rho_{gate}. \end{cases} \quad (11.132)$$

Then, the ionic variable U depends on the change-over voltage ρ_{gate} , the resting potential ρ_{min} , the maximum potential ρ_{max} , and on the time constants for opening, \mathcal{T}_{open} , and closing, \mathcal{T}_{close} . The time constants \mathcal{T}_{in} and \mathcal{T}_{out} are respectively related to the length of depolarization and repolarization phases. These constants are such that

$$\mathcal{T}_{in} < \mathcal{T}_{out} < \min(\mathcal{T}_{open}, \mathcal{T}_{close}).$$

In the sequel, we take the values of the parameters, which are consistent with the analysis and observation reported in Mitchell and Schaeffer [104], given e.g. in [31] (see Table 11.1). Moreover,

Description	name	value (unit)
Cell surface to volume ratio	κ	200 (cm ⁻¹)
transmembrane capacitance	C_m	10 ⁻³ (F/cm ²)
Depolarization length	\mathcal{T}_{in}	4.5 (ms)
Repolarization length	\mathcal{T}_{out}	90 (ms)
Opening time constant	\mathcal{T}_{open}	100 (ms)
Closing time constant	\mathcal{T}_{close}	130 (ms)
Change-over voltage	ρ_{gate}	-67 (mV)
Resting potential	ρ_{min}	-80 (mV)
Maximum potential	ρ_{max}	20 (mV)
Activation time	\mathcal{T}_{act}	10 (ms)
Time-delay	\mathcal{T}_d	20 (ms)

Table 11.1: Cell membrane parameters.

we assume that the domain heart-torso is in a square region $\Omega = [-L_T/2; L_T/2] \times [-L_T/2; L_T/2] = \Omega_H \cup \Omega_T$, where $\Omega_H = [0; L_H] \times [0; L_H]$ and $\Omega_T = \Omega \setminus \Omega_H$, where L_H and L_T are respectively heart and torso lengths (Figure 11.5).

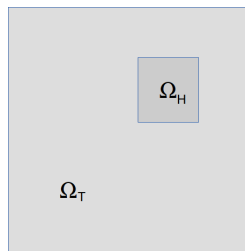


Figure 11.5: Heart-torso domain.

Nota Bene: If the exact solution ϕ_{sol} is known, we can measure the efficiency of method with the following L^2 relative error:

$$Err_\phi = \frac{\|\phi_{sol} - \phi\|_{L^2(\Omega)}}{\|\phi_{sol}\|_{L^2(\Omega)}}.$$

4.1 Benchmark problem and validation

In this first analysis, we investigate the accuracy and spatial convergence rate of the proposed modified LBM for which we postulate that the error estimates of the method is of order 2 in space and of order 1 in time (for sufficiently regular solution). We assume $L_H = 1$, $L_T = 3$ and $T = 1$, and we take $K_{ic} = 1$, $K_{ec} = 1$, $\xi_i = 0$, $\xi_e = 0$, $\rho(\mathbf{x}, t = 0) = 0$ and $U(\mathbf{x}, t = 0) = \cos(\pi(x + y))$. Moreover the source terms F_ρ , F_{ρ_e} and F_{ρ_T} are added to parabolic-elliptic system (11.4) and elliptic equation in thorax (11.6), respectively, to ensure that the function $(\rho, \rho_e, U, \rho_T)$ given by (with $\mathbf{x} = (x, y)$) :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = tx^2(x - 1)^2y^2(y - 1)^2, \quad \rho_e(\mathbf{x}, t) = t(\cos(\pi x) + \cos(\pi y)), \quad U(\mathbf{x}, t) = e^t \cos(\pi(x + y))$$

$$\rho_T(\mathbf{x}, t) = K_{ic}\rho(x, y, t) + (K_{ic} + K_{ec})\rho_e(x, y, t)$$

is the exact solution of system (11.4)-(11.6) (with appropriate source term).

To study the convergence, we have constructed a sequence of meshes with decreasing spatial step $\Delta \mathbf{x}$ between $1/25$ and $1/200$ and $\Delta t = \Delta x^2$. Figures 11.6 ,11.8, 11.7, 11.9 show respectively numerical solution of ρ , ρ_e , U and ρ_T at $t = 1$ for the step $\Delta \mathbf{x} = 1/100$.

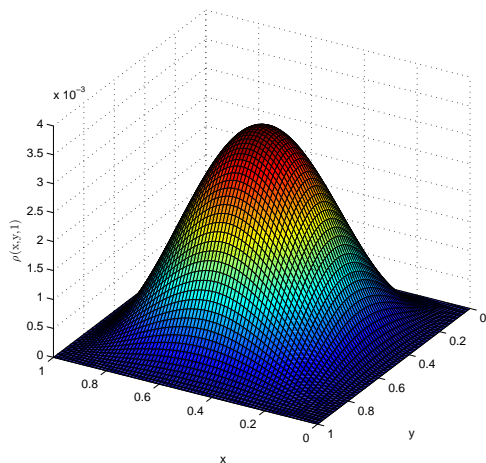


Figure 11.6: Potential ρ in Ω_H at $t = 1$.

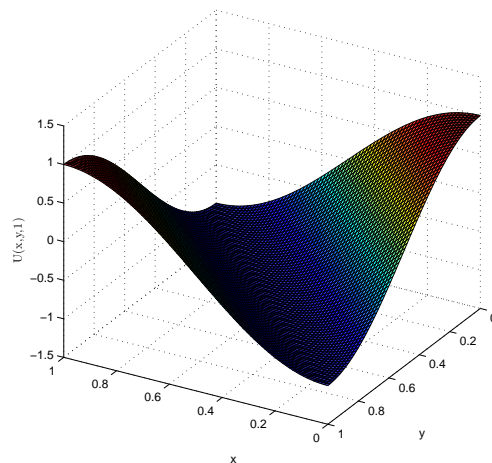


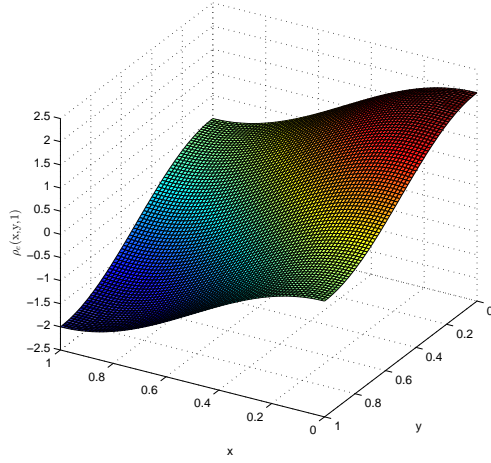
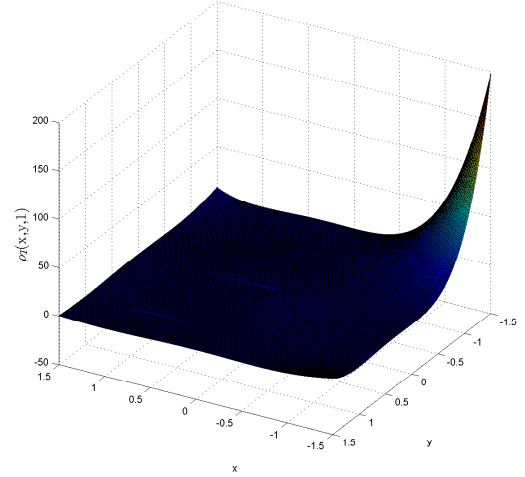
Figure 11.7: Ionic variable U in Ω_H at $t = 1$

Since, the chosen stopping criteria for the iterative method to approach ρ_e and ρ_T involves a constant error (because this criteria is not defined in function of lattice size cell), then we analyze only the numerical estimate of relative error of approximation of ρ and U .

We present on Figures 11.10 and 11.11 (at $t = 0.5$ and $t = 1$) the convergence curves, $\log(\text{Error})$ versus Δx , for ρ and U (numerical values can be found in Table 11.2). We observe that the slope of error curves for ρ passes approximately from 1.5 to 2 and the slope of error curves for U is approximately equal to 2. This shows that our numerical error estimates agree with the postulated error estimates, and indicate the good performance of our method.

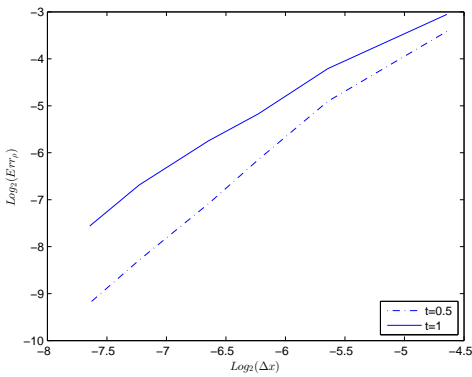
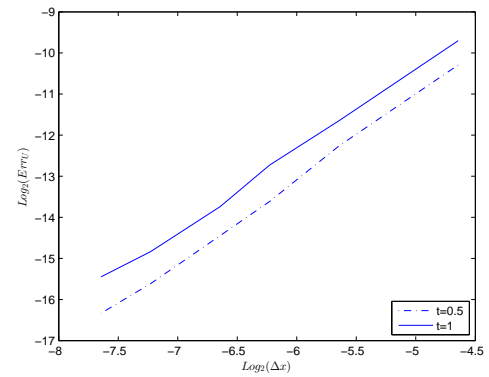
Remark 11.11 .

We notice that the two elliptic equations have relative errors which depend on convergence criteria

Figure 11.8: Potential ρ_e in Ω_H at $t = 1$.Figure 11.9: Potential ρ_T in Ω_T at $t = 1$

t=0.5	Δx	Err_ρ	Err_U
	1/25	0.0937	7.972×10^{-4}
	1/50	0.0334	2.039×10^{-4}
	1/75	0.0141	7.971×10^{-5}
	1/100	0.0074	4.483×10^{-5}
	1/150	0.0032	1.990×10^{-5}
	1/200	0.0017	1.121×10^{-5}

t=1	Δx	Err_ρ	Err_U
	1/25	0.1204	0.0012
	1/50	0.0541	3.117×10^{-4}
	1/75	0.0277	1.471×10^{-4}
	1/100	0.0187	7.314×10^{-5}
	1/150	0.0097	3.417×10^{-5}
	1/200	0.0053	2.237×10^{-5}

Table 11.2: Relation between relative error and lattice spacing for ρ and U .Figure 11.10: Error curves with respect to spatial step Δx for ρ in Ω_T at $t = 0.5$ and $t = 1$.Figure 11.11: Error curves with respect to spatial step Δx for U in Ω_T at $t = 0.5$ and $t = 1$.

given in (11.129) and (11.130) with $C_{\rho_e} = C_{\rho_T} = 1$ and $N_T = N_e = 2$. These criteria lead to a 10^{-2} order relative error for both solutions of elliptic equations. \square

4.2 Study of an action potential in heart and torso

With this second set of data, we aim to reproduce an expected electrical wave propagation in heart and torso. For that, we apply an external density current within source term f_{is} in a short time scale ($t \in [0, T_{act}]$) which represents external applied current (electroshock for example). This applied current involves action potentials (AP) which are generated by the movement of ions into and out of cardiac cells (i.e. biological manifestation of electrical cells excitation) with diffusion in torso region. This potential leads us then to study the evolution of the transmembrane potential ρ and ionic variable U . The purpose of the next analysis is to derive the following standard four phases of the action potential (see e.g. [28] and references therein).

- **Phase I: Depolarization.** In a short time scale (order of \mathcal{T}_{in}), transmembrane potential (TMP) changes from its resting state ρ_{min} to its maximum ρ_{max} when cells are depolarized. This sudden change induces opening of ionic channels, so ionic variable U leaves its equilibrium state to falling down.
- **Phase II: Excited phase.** In a long time scale (order of \mathcal{T}_{open}), TMP ρ begins to fall slowly. During this phase, ionic channels are open and ionic variable U goes to its minimum.
- **Phase III: Repolarization.** In a short time scale (order of \mathcal{T}_{out}), TMP goes back towards resting potential of ρ_{min} to prepare the cells for a new cycle of depolarization. During this phase, ionic channels are gradually inactivated. That induces inversion of ionic variable slope.
- **Phase IV: Recovery period.** In a long time scale (order of \mathcal{T}_{close}), TMP reaches the resting potential ρ_{min} . During this time, ionic variable slowly goes back to its equilibrium state and ionic channels are closed at resting TMP.

To reproduce this behavior, we take the values of the parameters given in Table 11.1, we choose discretization parameters $\Delta \mathbf{x} = 1/50$, $\Delta t = \Delta \mathbf{x}^2$ and convergence criteria parameters $C_{\rho_e} = C_{\rho_T} = 1$ and $N_e = N_T = 3$, we fix $L_H = 15cm$ and $L_T = 45cm$, and we fix $K_i = 0.003S.cm^{-1}$, $K_e = 0.003S.cm^{-1}$ and $K_T = 0.009S.cm^{-1}$, and we choose the initial data as follows:

$$\rho(\mathbf{x}, 0) = \rho_{min}, \quad U(\mathbf{x}, 0) = \frac{1}{(\rho_{max} - \rho_{min})^2}. \quad (11.133)$$

Moreover, in order to model electrical excitation within the myocardium (due to heart beat or external applied current), we apply a given external stimulus during a short time scale ($0 < t - \mathcal{T}_d < T_{act}$, where \mathcal{T}_d is a time-delay), and we define f_{is} as ($\mathbf{x} = (x, y)$)

$$f_{is}(\mathbf{x}, t) = I_{app} \chi_H(\mathbf{x}) \chi_{[0, T_{act}]}(t - \mathcal{T}_d) \chi_{prop}(\mathbf{x}, t - \mathcal{T}_d) \Phi(\mathbf{x}), \quad (11.134)$$

where I_{app} is the amplitude of the external applied stimulus with $I_{app} = 10^4$, and the functions χ_H , $\chi_{[0, T_{act}]}$ and χ_{prop} are defined by

$$\chi_H(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{if } \mathbf{x} \in \Omega_H, \\ 0 & \text{else} \end{cases}, \quad \chi_{[0, T_{act}]}(t) = \begin{cases} 1 & \text{if } t < T_{act}, \\ 0 & \text{else} \end{cases} \quad (11.135)$$

$$\chi_{[0, T_{act}]}(t) = \begin{cases} 1 & \text{if } t < T_{act}, \\ 0 & \text{else} \end{cases} \quad (11.136)$$

$$\chi_{prop}(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{if } x + y < 2t/T_{act}, \\ 0 & \text{else.} \end{cases} \quad (11.137)$$

The last characteristic is associated to wave propagation as a diagonal which evolves from left bottom corner to right top corner. The function Φ , which corresponds to the shape of the electrical wave, is defined by

$$\Phi(\mathbf{x}) = 1 - \frac{1}{L_H} \left(x - \frac{L_H}{2} \right)^2 - \frac{1}{L_H} \left(y - \frac{L_H}{2} \right)^2. \quad (11.138)$$

Figure 11.12 shows how the transmembrane potential ρ taken in the middle point of domain Ω_H evolves according to the AP (after electrical wave passage), and we recover clearly the four phases. We present on Figure 11.13 the ionic behavior in this middle point with evolution of ionic variable U .

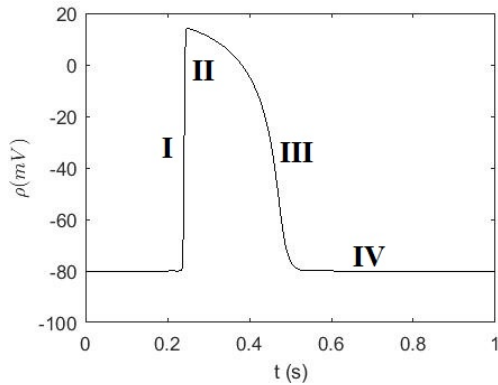


Figure 11.12: Evolution of transmembrane potential ρ in middle of the heart (with four phases of AP).

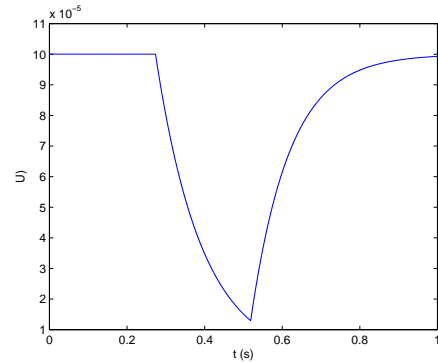


Figure 11.13: Evolution of ionic variable U in middle of the heart.

However, we can see these main phases with 3-dimensional representation of ρ and U at different moments. In a first time, at $t = 0.3s$, the AP involves depolarization of the left bottom corner (Figure 11.14) of Ω_H and ionic variable U begins to fall down (Figure 11.15). Then, at $t = 0.5s$ (Figure 11.16), the electrical wave has covered more than the half of heart domain and we can see the different phases of AP: the left bottom corner is already on his recovery period (Phase IV), whereas its neighborhood is on the repolarization phase (Phase III) and we observe the plateau inherent to excited phase (Phase II) just behind the depolarized area (Phase I). In term of ionic variable, we also see the four phases with the activation of ionic channels in left bottom corner at $t = 0.3s$ (Figure 11.15). At $t = 0.5s$ (Figure 11.17), as for transmembrane potential, we can identify the four phases during the propagation of the electrical wave through domain Ω_H .

Figures 11.18 and 11.20 show that these four phases are visible through the extracellular potential ρ_e at respectively $t = 0.3s$ and $t = 0.5s$. Then, as Figures 11.24 to 11.27 show for $\Delta \mathbf{x} = 1/30$ to $1/100$ in middle points of Ω_H and Ω_T , there is a few perturbation in the numerical solution, when a sudden change arises, due to chosen stopping criteria. This noise is tending to disappear totally with thinner discretization. Finally, we present on Figures 11.19 and 11.21 the diffusion of

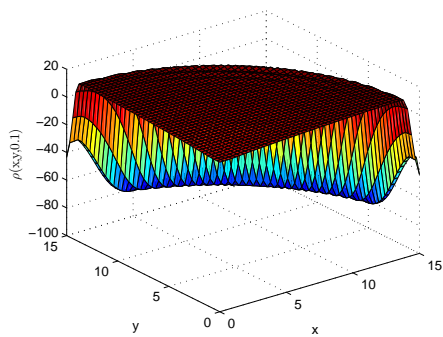


Figure 11.14: Potential ρ in Ω_H at $t = 0.3s$.

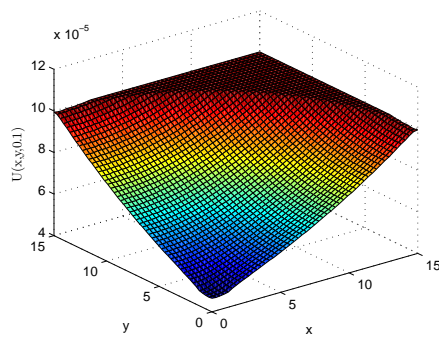


Figure 11.15: Ionic variable U in Ω_H at $t = 0.3s$

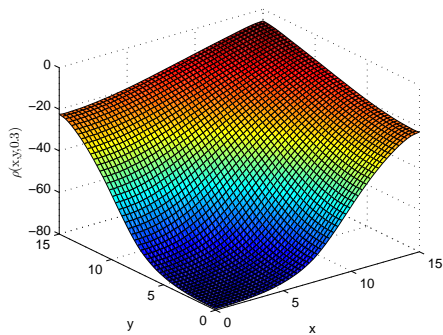


Figure 11.16: Potential ρ in Ω_H at $t = 0.5s$.

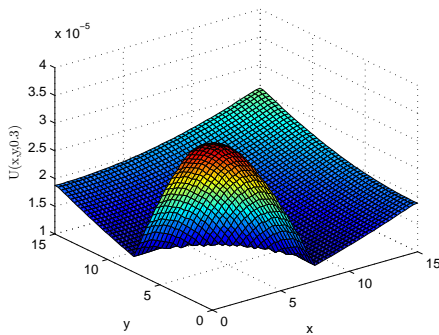


Figure 11.17: Ionic variable U in Ω_H at $t = 0.5s$

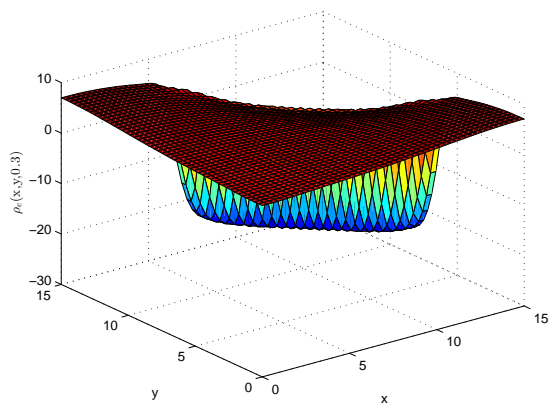


Figure 11.18: Potential ρ_e in Ω_H at $t = 0.3s$.

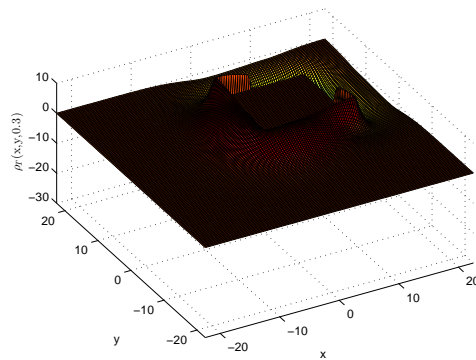
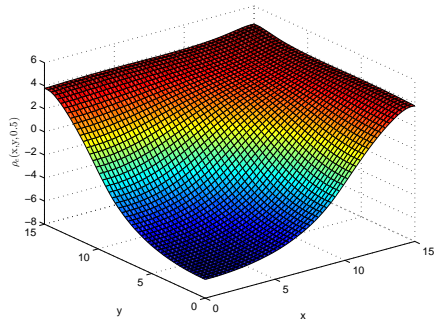
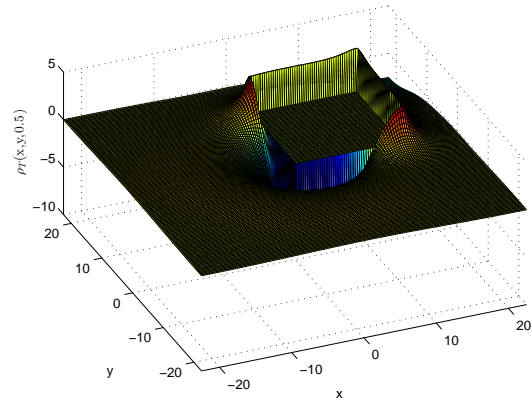


Figure 11.19: Potential ρ_T in Ω_T at $t = 0.3s$

Figure 11.20: Potential ρ_e in Ω_H at $t = 0.5s$.Figure 11.21: Potential ρ_T in Ω_T at $t = 0.5s$

the electrical wave in the torso at $t = 0.3s$ and $t = 0.5s$.

To complete the analysis, we study the relationship between the transmembrane potential ρ and ionic variable U , and their mutual influence. For this, we introduce the following normalized terms

$$\rho_N = \frac{\rho - \rho_{min}}{|\rho_{max} - \rho_{min}|}, \quad U_N = \frac{U - U_{min}}{|U_{max} - U_{min}|}. \quad (11.139)$$

We can see the correlation between transmembrane potential and ionic movements through the cell membrane in Figure 11.22. In particular, we clearly see that ionic variable begins to converge slowly to its equilibrium state at the beginning of the recovery period whereas transmembrane potential is already close to its equilibrium.

Finally, in Figure 11.23 we perform the phase plan curve of ρ_N and U_N . After initialization at $t = 0ms$, the point A corresponds to equilibrium state (i.e. $\rho = \rho_{min}$ and $U = 1/(\rho_{max} - \rho_{min})^2$). We observe that ρ grows to ρ_{max} in a shorter time scale before the ionic variable U starts to fall down (because $\rho > \rho_{gate}$). This depolarization phase (Phase I) leads us to point B . Then, between points B and C , we are in the excited phase (Phase II) which numerically corresponds to $\mathcal{I}_{ion}(\rho, U) = 0$. After point C , ρ goes fast to ρ_{min} while U varies slightly (Phase III). Finally, from point D to the end, ρ is near to its resting state and U goes back to its equilibrium state (Phase IV).

These analyzes led us to verify the efficiency of our coupled modified LBM. Indeed, expected behavior of the interactions between electrical potentials and ionic movements in heart-torso coupling (which is a critical numerical issue), has been demonstrated by the different simulations. The four phases of the AP are clearly reproduced. Our method remained stable and robust even if the solutions of elliptic equations contain some very local noises due to stopping criteria and sudden changes in dynamics.

5 Conclusion and commentary

An efficient and stable coupled LBM to solve a two-dimensional heart-torso coupled bidomain model is developed. From the Chapman-Enskog expansion analysis, the bidomain system which

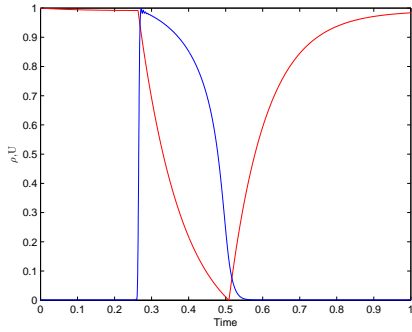


Figure 11.22: Evolution of ρ_N and U_N in the middle of heart.

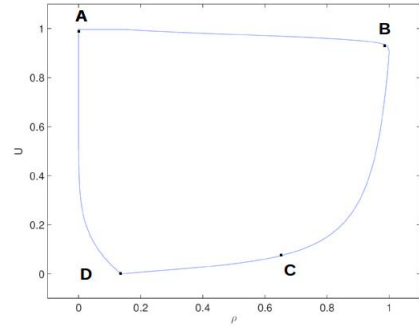


Figure 11.23: (ρ_N, U_N) phase plan portrait.

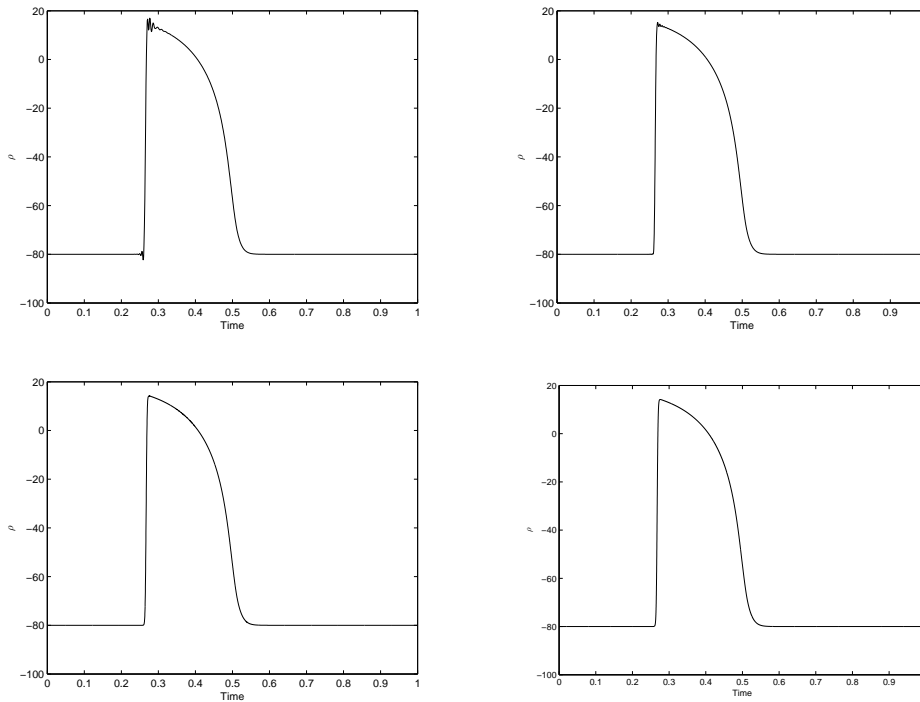


Figure 11.24: ρ for $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$ for $\Delta\mathbf{x} = 1/30, 1/50, 1/75$ and $1/100$.

is a coupled of reaction-diffusion, elliptic and ODE equations, can be correctly recovered by our modified LBM. This method is easy to implement. The preliminary results presented in this work show the capability of this method to capture the distribution of the electrical wave. It is clear that, due to the multi-scale nature of the system, the Cartesian grid used in our preliminary simulations is not very sufficient to compute in a computationally efficient manner real life clinical situations (see e.g. [58], [119]) with complex geometry which is in general computationally expensive. Therefore, it is expected to solve the Lattice Boltzmann system on adapted Cartesian or triangular unstructured grids as e.g., in [128, 60] and the references therein. Moreover, in order to overcome the limitations of the constraint CFL stability condition, we extend the method to implicit or semi-implicit time schemes, e.g., by using the θ -method (with $\theta \in [0, 1]$) or Runge-Kutta methods,

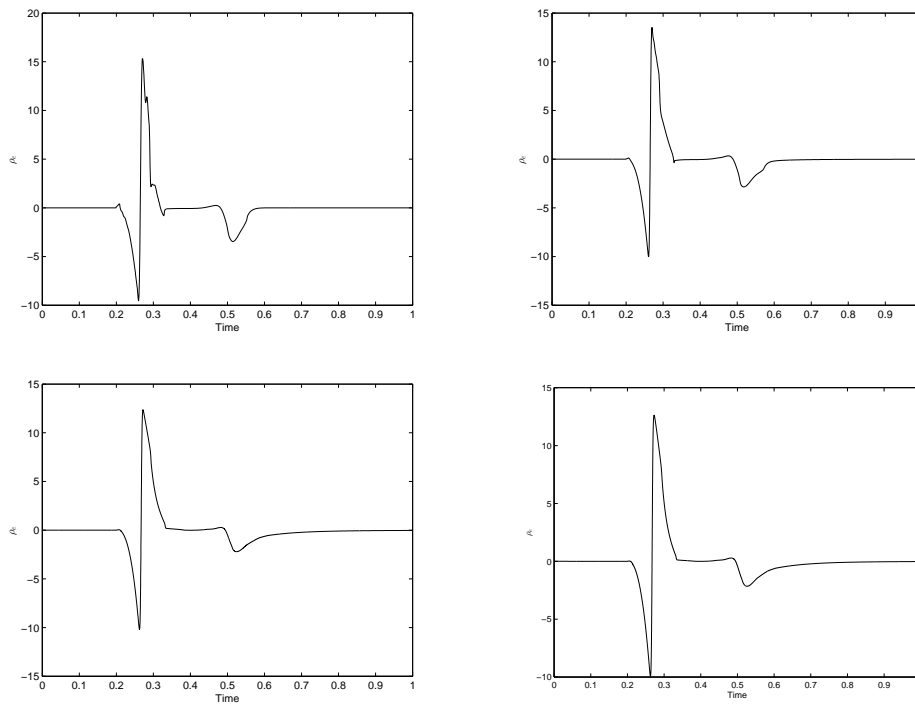


Figure 11.25: ρ_e for $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$ for $\Delta\mathbf{x} = 1/30, 1/50, 1/75$ and $1/100$.

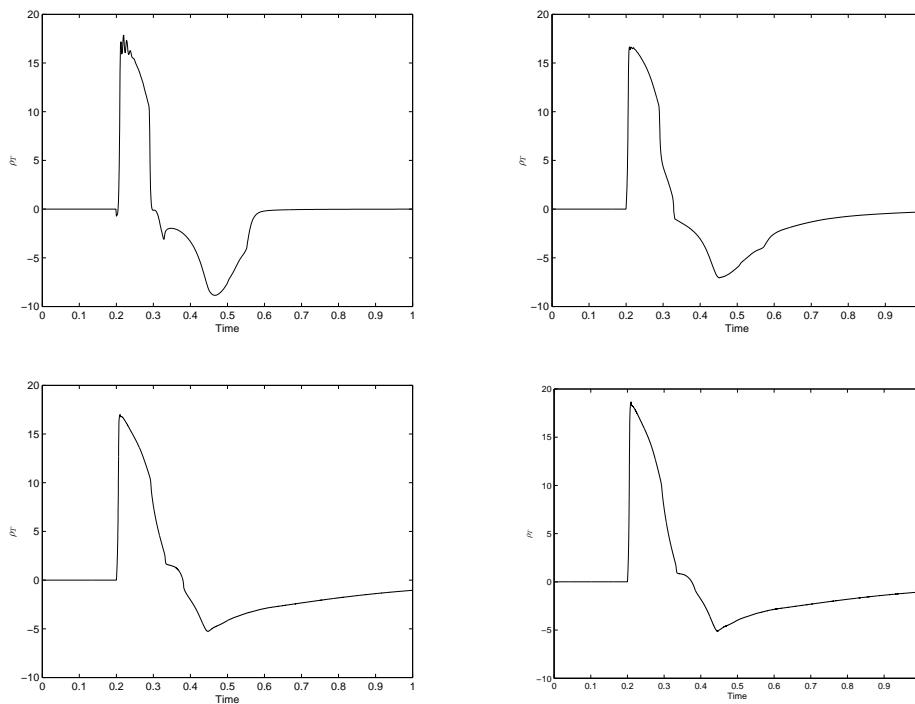


Figure 11.26: ρ_T for $\mathbf{x} = (0, 0)$ for $\Delta\mathbf{x} = 1/30, 1/50, 1/75$ and $1/100$.

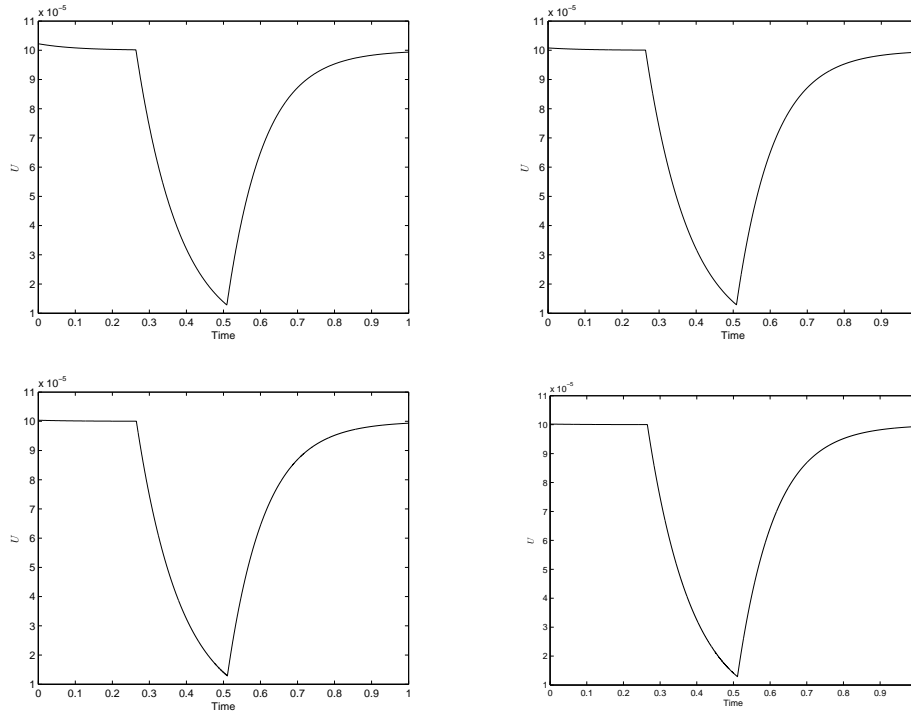


Figure 11.27: U for $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$ for $\Delta \mathbf{x} = 1/30, 1/50, 1/75$ and $1/100$.

coupled with adaptive time stepping strategies, as e.g. in [76] and the references therein. This coupled LBM method will be shown in a forthcoming paper for more general coupled models with realistic complex geometries. It would be interesting to use this developed method with observations coming from experimental data and a more complete description of the biophysical model of electrical cardiac activity. Moreover, since time delays in signal transmission are inevitable and a small delay can affect considerably the resulting electrical activity in heart and thus the cardiac disorders therapeutic treatment, it is then necessary to analyze the impact of delays on the dynamical behaviors of such a system by considering time-delays models with continuous and impulsive treatment (see e.g. [13]).

In order to get even closer to a more realistic calculation, it is necessary to study, in the future, this method coupled with optimization technique and, optimal and robust control problems by using the approach developed in [12, 14].

Acknowledgments: The authors would like to thank all the referees for their relevant questions, suggestions and comments which lead to improve this paper.

6 Appendix

6.1 Nondimensional model

We have nondimensionalized (11.4)-(11.6) by introducing the following dimensionless quantities (dimensionless variables, parameters and physical domains are denoted with "~")

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{x}} &= \frac{\mathbf{x}}{\bar{L}}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{\bar{T}}, \quad \tilde{\nabla} = \bar{L}\nabla, \quad \tilde{\text{div}} = \bar{L}\text{div}, \quad \partial/\partial\tilde{t} = \bar{T}\partial/\partial t, \\ \mathcal{K}_{ec} &= \bar{\sigma}\tilde{\mathcal{K}}_{ec}, \quad \mathcal{K}_{ic} = \bar{\sigma}\tilde{\mathcal{K}}_{ic}, \quad \mathcal{K}_T = \bar{\sigma}\tilde{\mathcal{K}}_T,\end{aligned}$$

where \bar{L} is a characteristic length of physical domain Ω , \bar{T} is a characteristic time and $\bar{\sigma}$ is a characteristic conductivity. The dimensional transmembrane and extracellular potentials ρ and ρ_e , and thorax potential ρ_T are rescaled using

$$\rho = \bar{\rho}\tilde{\rho} + \rho_{min}, \quad \rho_e = \bar{\rho}\tilde{\rho}_e + \rho_{min}, \quad \rho_T = \bar{\rho}\tilde{\rho}_T + \rho_{min} \quad (11.140)$$

with $\bar{\rho} = \rho_{max} - \rho_{min}$ the characteristic action potential amplitude. The electrophysiological ionic state variable U is rescaled using

$$\tilde{U} = \bar{\rho}^2 U. \quad (11.141)$$

Using these adimensional relations, we get finally the dimensionless system

$$\begin{aligned}\frac{\partial\tilde{\rho}}{\partial\tilde{t}} + \tilde{\mathcal{I}}_{ion}(\cdot; \tilde{\rho}, \tilde{U}) - R_h\tilde{\text{div}}(\tilde{\mathcal{K}}_{ic}\tilde{\nabla}\tilde{\rho}) &= R_h\tilde{\text{div}}(\tilde{\mathcal{K}}_{ic}\tilde{\nabla}\tilde{\rho}_e) + \tilde{f}_{is}, \quad \text{on } \tilde{\mathcal{Q}}_H \\ -R_h\tilde{\text{div}}((\tilde{\mathcal{K}}_{ec} + \tilde{\mathcal{K}}_{ic})\tilde{\nabla}\tilde{\rho}_e) &= R_h\tilde{\text{div}}(\tilde{\mathcal{K}}_{ic}\tilde{\nabla}\tilde{\rho}) + (\tilde{f}_{es} + \tilde{f}_{is}), \quad \text{on } \tilde{\mathcal{Q}}_H \\ \frac{\partial\tilde{U}}{\partial\tilde{t}} &= \tilde{H}_{ion}(\cdot; \tilde{\rho}, \tilde{U}), \quad \text{on } \tilde{\mathcal{Q}}_H\end{aligned} \quad (11.142)$$

and

$$-R_h\tilde{\text{div}}(\tilde{\mathcal{K}}_T\tilde{\nabla}\tilde{\rho}_T) = \tilde{f}_T, \quad \text{on } \tilde{\mathcal{Q}}_T, \quad (11.143)$$

where

$$\begin{aligned}R_h &= \frac{\bar{\sigma}\bar{T}}{\bar{L}^2\kappa c_m} \\ \tilde{f}_{is} &= \frac{\bar{T}}{c_m\bar{\rho}}f_{is}, \quad \tilde{f}_{es} = \frac{\bar{T}}{c_m\bar{\rho}}f_{es}, \quad \tilde{f}_T = \frac{\bar{T}}{\kappa c_m\bar{\rho}}f_T \\ \tilde{\mathcal{I}}_{ion}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}; \tilde{\rho}, \tilde{U}) &= \frac{\bar{T}}{c_m\bar{\rho}}\mathcal{I}_{ion}(\mathbf{x}, t; \rho, U), \\ \tilde{H}_{ion}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}; \tilde{\rho}, \tilde{U}) &= \frac{\bar{T}}{\bar{\rho}^2}H_{ion}(\mathbf{x}, t; \rho, U).\end{aligned} \quad (11.144)$$

Remark 11.12 .

If we take for example $\bar{\sigma} = \frac{\bar{L}^2\kappa c_m}{\bar{T}}$, $\bar{T} = T$ and $\bar{L} = L_H$ then $R_h = 1$, $\tilde{\mathcal{Q}}_H = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$ and $\tilde{\mathcal{Q}} = \tilde{\Omega} \times [0, 1]$, where $\tilde{\Omega} = [-\frac{L_T}{L_H}, \frac{L_T}{L_H}] \times [-\frac{L_T}{L_H}, \frac{L_T}{L_H}]$.

6.2 Implementation and Algorithm

Our goal is to develop an efficient LBM for bidomain system. In this work, in order to validate the method, we just focus on stability and accuracy of the method for coarse discretization without any specific optimization. So we make our simulation in a beta version of our program, and the characteristic execution time can be significantly reduce with using some Matlab functions or parallelizations. We want to control all the stages of build, and we need to represent every functions at each stage. That is why some stages are not optimized yet, even if we can do it easily (and so reduce the CPU time). The other main reason is that some stages are already implemented for complex boundary and complex domain for further works; the initialization stage or boundary treatment could be simplified for simpler boundaries. By the same way, we introduce some functions in order to have easy graphical representations. For all these reasons, we insist on the non optimal nature of our present code, and the characteristic CPU times we obtain are not revealing of the efficiency of LBM.

Moreover, the way we suggested for parallelization has not already been studied further by ourselves. Indeed, the two-stage build of the method guarantees that we can compute all local stages of the method with dividing the mesh between different threads. That includes local summations to recompose all the macroscopic values, the local definition of the equilibrium functions, second terms and link functions, and the local treatment of collision stage. Then, the streaming process can be resume as an index substitution between distribution function of adjacent nodes witch can also be separate for each velocity \mathbf{e}_i . This proposed parallelization will be done in a future work.

All the steps of this algorithm are represented in Figure 11.28. The step $S1$ is the initialization of the mesh (including vectors \mathbf{e}_i , vectors of boundaries index, or usual objects for graphical representations), the non-dimentionalization on time and space according to system (11.142), and definition of initial conditions. The step $S2$ is the treatment of the parabolic equation and of the ODE of system (11.142), and the both subroutines $S3$ and $S4$ correspond to the treatment of the elliptic equation of the system (11.142) in the heart and elliptic equation (11.143) in the thorax.

To estimate typical computationnal times, we have made our simulation with Matlab 2016b and with Intel core i5 processors. We present in Table 11.3 the different typical computational times for each part $S1$ to $S4$ of the algorithm in $\Omega \times (0, T)$ with $T = 1$ according to scale $\Delta \mathbf{x} = 1/50, \dots, 1/100$, $\Delta t = \Delta \mathbf{x}^2$, and convergence criteria parameters $C_{\rho_e} = C_{\rho_T} = 1$ and $N_e = N_T = 3$. The execution time of both elliptic equations treatments are strongly related to the convergence criteria. With this simple implementation without optimization or parallelization, the execution time grows quickly according to the number of iterations and to the number of nodes. The first scaling $\Delta x = 1/50$ induces 2500 iterations to reach $T = 1$ and each domain contains 2601 nodes, and the last one $\Delta x = 1/100$ induces 10^4 iterations for 10201 nodes for each domain. So we can conclude that execution time for each iteration is proportional to the number of nodes.

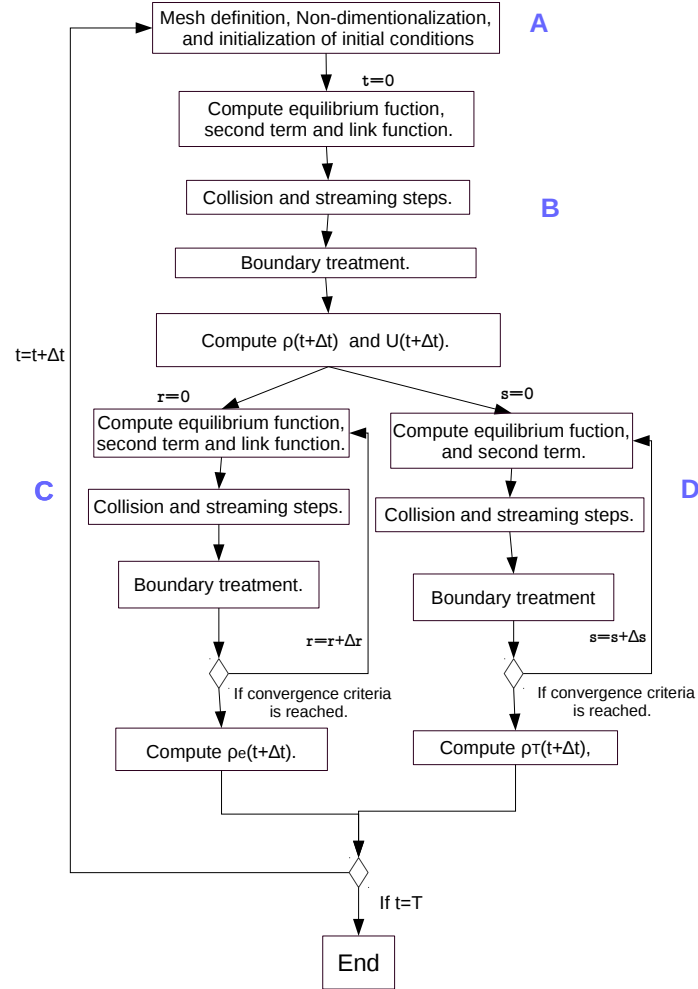


Figure 11.28: Step by step representation of the algorithm.

Δx	S1	S2	S3	S4
1/50	1.0598	58.9528	71.9957	217.8366
1/75	7.8410	201.9650	243.5739	657.5601
1/100	22.5423	764.5007	1042.5311	2567.0278

Table 11.3: Typical computational time (in second) for each part of the algorithm in $\Omega \times (0, 1)$.

7 Application pour un domaine à géométrie quelconque

Pour compléter les résultats obtenus dans la section 4, nous redéfinissons le domaine Ω (voir Figure 9.10) tel que $\mathbf{x} = (x, y) \in \partial\Omega$ si:

$$|x - a|^3 + (y - b - c|x - d|^2)^2 - e = 0, \quad (11.145)$$

où a, b, c, d, e sont des constantes choisies. Dans notre cas, nous choisissons ces constantes telles que $a = 0.5$, $b = 3.5$, $c = 0.5$, $c = 1$, $d = 0.5$ et $e = 1/15$. Notre but est donc de retrouver les comportements obtenus dans la section 4. En particulier, nous souhaitons vérifier la stabilité de notre méthode vis à vis de notre traitement des conditions aux bords. Tout d'abord, afin de reproduire un comportement similaire, nous faisons arriver le stimulus extérieur depuis le point du domaine Ω le plus proche de l'origine $(0, 0)$. Pour obtenir des courbes correspondant aux courbes 11.24-11.27, nous décalons l'envoi du signal de $0.2s$ afin qu'il atteigne le point $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$ dans le même laps de temps que dans les exemples traités dans la section 4. Comme le montrent les Figures 11.33-11.35, nous obtenons les comportements attendus. La forme globale est cependant modifiée par ce décalage, comme le montrent les Figures 11.29-11.31. Le décalage provoque un décalage dans le potentiel d'action au sens global, on voit par exemple dans la Figure 11.29 le potentiel transmembranaire ρ croître vers ρ_{max} en fin de phase d'excitation, tandis que dans l'exemple précédent (voir Figure 11.14) la phase de repolarisation était déjà amorcée. Le potentiel électrique relatif au thorax ρ_T est également modifié par le décalage en temps, mais aussi et surtout par le changement de domaine. Comme le montre les Figures 11.32-11.36, il faut se rapprocher des bords (i.e se placer au point $\mathbf{x} = (4.5, 4.5)$ et non $\mathbf{x} = (0, 0)$) pour retrouver le type de courbe obtenue dans la section 4.

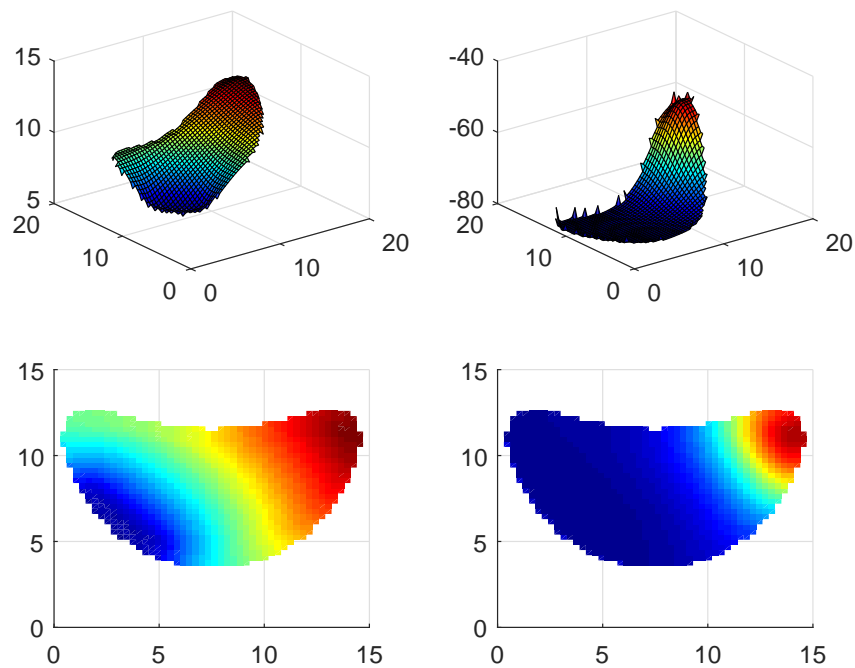


Figure 11.29: Représentation 3D (haut) et vue de dessus (bas) de ρ à $t = 0.3s$ (gauche) et $t = 0.5s$ (droite)

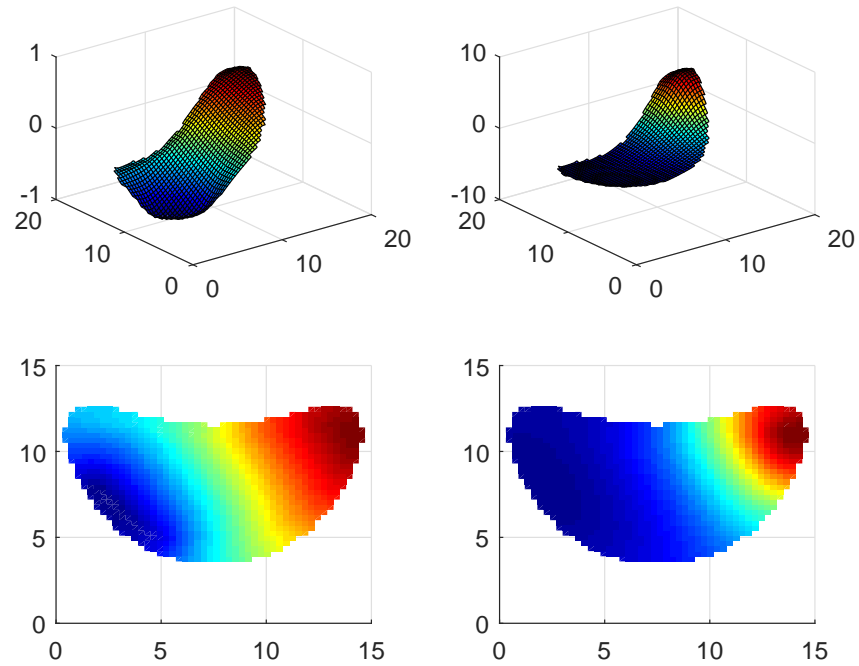


Figure 11.30: Représentation 3D (haut) et vue de dessus (bas) de ρ_e à $t = 0.3s$ (gauche) et $t = 0.5s$ (droite)

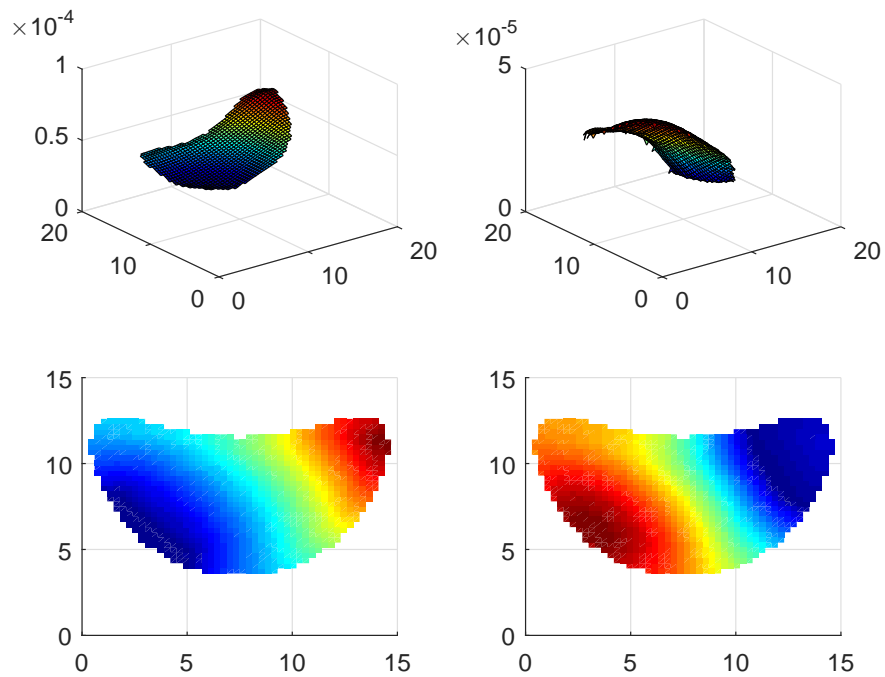


Figure 11.31: Représentation 3D (haut) et vue de dessus (bas) de U à $t = 0.3s$ (gauche) et $t = 0.5s$ (droite)

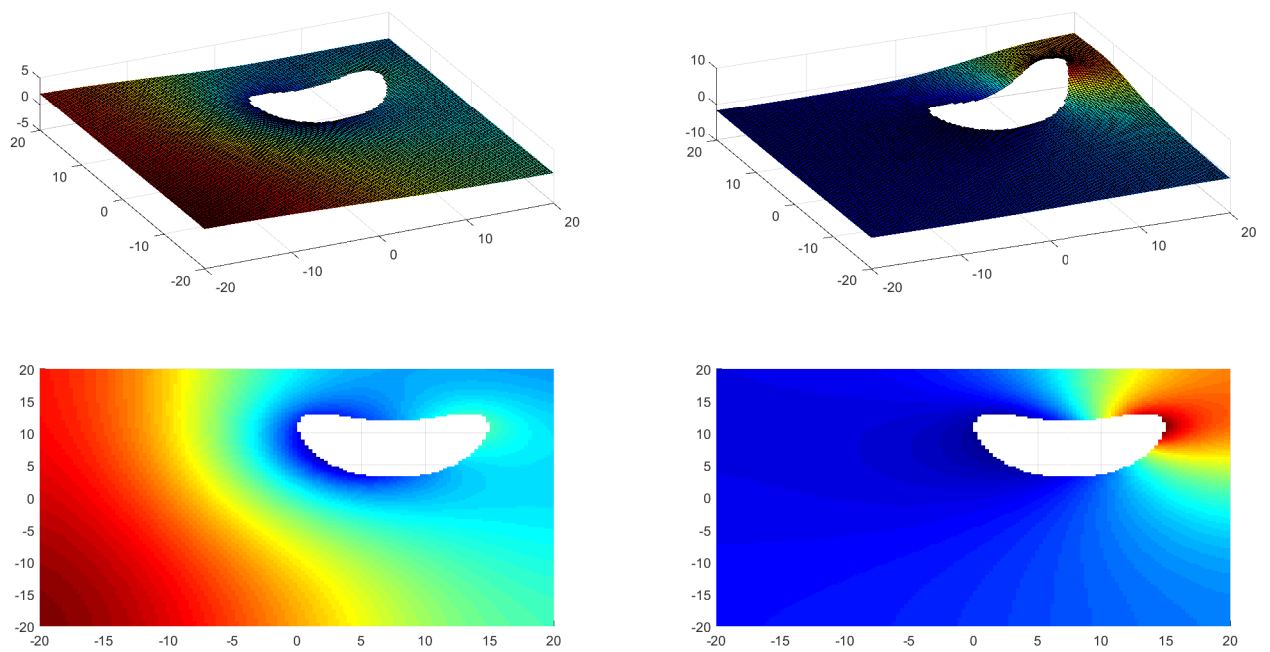


Figure 11.32: Représentation 3D (haut) et vue de dessus (bas) de ρ_T à $t = 0.3s$ (gauche) et $t = 0.5s$ (droite)

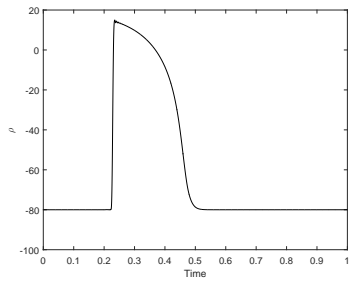


Figure 11.33: Evolution de ρ au point $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$.

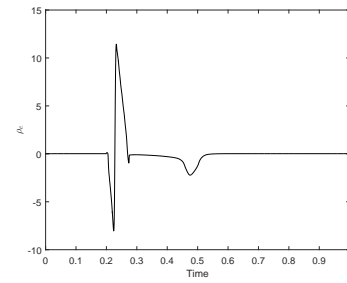


Figure 11.34: Evolution de ρ_e au point $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$.

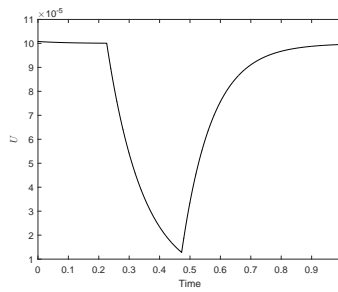


Figure 11.35: Evolution de U au point $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$.

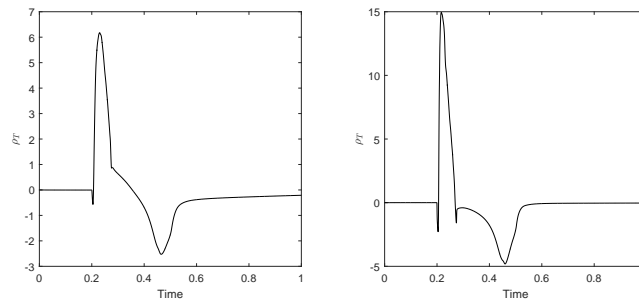


Figure 11.36: Evolution de ρ_T au point $\mathbf{x} = (0, 0)$ (gauche) et au point $\mathbf{x} = (4.5, 4.5)$ (droite).

12 Mathematical modeling and analysis of dynamic effects of multiple time-varying delays on electrophysiological wave propagation in the heart

Ce travail sera bientôt soumis (cf Preprint [18])

Abstract : In this work, we propose a mathematical model of cardiac electrophysiology which takes into account time delays in signal transmission, in order to capture the whole activities of macro- to micro-scale transport processes, and use this model to analyze the propagation of electrophysiological waves in heart. The propagation of electrical activity in heart is mathematically modeled by a modified bidomain system. As transmembrane potential evolves, the domain has anisotropical properties which are transposed into intracellular and extracellular conductivity. The new bidomain system is a multi-scale, stiff and strongly nonlinear coupled reaction-diffusion model in the shape of a set of ordinary differential equations coupled with a set of partial differential equations with multiple time delays. Due to delays, dynamic and geometry complexity, mathematical analysis and numerical simulation of this type of coupled systems are very ambitious mathematical and computational problems but are crucial in several biomedical applications. First, the mathematical models are introduced. Afterwards the existence and uniqueness of solution of state equation are proved as well as stability result. A numerical calculation is performed by using a coupling Lattice Boltzmann Method.

Keywords: Bidomain type system, multiple time-delays, existence, uniqueness, stability, cardiac electrophysiology, Ionic models, Coupled System.

1 Introduction

Computational cardiac electrophysiological modeling is now an important field in applied mathematics. Indeed, nowadays, heart and cardiovascular diseases are still the leading cause of death and disability all over the world. That is why we need to improve our knowledge about heart behavior, and more particularly about its electrical behavior. Consequently we want strong methods to compute electrical fluctuations in the myocardium to prevent cardiac disorders (as arrhythmia). We modelize electrical behavior of heart in myocardium with the bidomain system, derived from Ohm's law. This biophysical model of electrical cardiac activity links electrophysiological cell mod-

els, at small scales, and myocardial tissue mechanics, metabolism and blood flow at large scales. In mathematical viewpoint, bidomain system leads us to compute intracellular and extracellular electrical potentials ρ_i and ρ_e with taking into account the cellular membrane dynamics U . This is a system of non-linear partial differential equations (PDEs) coupled with ordinary differential equations (ODEs). The PDEs describe the propagation of the electrical potentials and ODEs describe the electrochemical processes. Time delays in signal transmission are inevitable and a small delay can affect considerably the resulting electrical activity in heart and thus the cardiac disorders therapeutic treatment. It is then necessary to analyze the impact of delays on dynamical behaviors of such a system and their consequences. Delay terms can lead to change of stability of dynamics and give rise to highly complex behavior including oscillations and chaos. Motivated by above discussions, to study the effect of time-delays the propagation of electrophysiological waves in heart, together with other critical cardiac material parameters, we have developed a new bidomain model by incorporating multiple time delays.

In recent years, various problems concerning biological rhythmic phenomena and delayed processes have been studied (see e.g., [13, 15, 17, 32, 33, 34, 67, 80, 110, 115, 117, 131] and the references therein). Problems associated with bidomain models without time-delays various methods and technique, as evolution variational inequalities approach, semigroup theory, Faedo-Galerkin method and others, to study the existence-uniqueness of solutions have been derived in the literature (see e.g., [11, 20, 25, 44, 129] and the references therein), and several numerical methods based on finite difference method, finite element method or lattice Boltzmann method are used to solve these types of models (see e.g., [5, 31, 35, 46, 48, 50, 57, 114, 121] and the references therein).

The aim of this paper is the study of the well-posedness of bidomain system that simulate electrophysiological wave propagation in heart in which the effects of time-delays are included. The effect of the time-delays, during the propagation process, is included in the model by using multiple time-delays functions in operators representing the ionic activity in the myocardium. The derived multiple time-delays bidomain system is a nonlinear coupled reaction-diffusion model in the shape of a set of delay differential equations (DDE) coupled with a set of delay partial differential equations. A description of this model is given below.

This paper is organized as follows. In Section 2 we shall present the derivation of the multiple time-varying delay bidomain model (in a generalized form). In Section 3 we shall demonstrate the existence, stability and uniqueness of the weak solutions of the derived model, under some hypotheses for data and some regularity of the nonlinear operators and time-delay operators. A numerical experiment, using a modified Lattice Boltzmann Method (LBM) method for numerical simulations of the derived model (based on previous work [46]), is described in Section 4. In last Section 5, conclusions are discussed.

2 Time-delays bidomain Model

The time delay bidomain model of cardiac tissue is expressed mathematically by the following steady-state of coupled partial differential equations governing the electrical potentials, (in the physical region Ω occupied by the excitable cardiac tissue, which is an open, bounded, and connected subset of d -dimensional Euclidean space \mathbf{R}^d ($d \leq 3$) with a sufficiently regular boundary

$\partial\Omega$ and during a time interval $(0, T)$)

$$\operatorname{div}(\mathcal{K}_i \nabla \rho_i) = I_m - \kappa f_{is}, \quad \operatorname{div}(\mathcal{K}_e \nabla \rho_e) = -I_m - \kappa f_{es}, \quad (12.1)$$

where ρ_i and ρ_e are intracellular and extracellular potentials, respectively; $\mathcal{K}_i(x)$ and $\mathcal{K}_e(x)$ are the conductivity tensors describing the anisotropic intracellular and extracellular conductive media; $f_{is}(\mathbf{x}, t)$ and $f_{es}(\mathbf{x}, t)$ are the respective externally applied current sources. The transmembrane current density is described by I_m and is given by the following expression

$$I_m(\mathbf{x}, t; \rho, U) = \kappa(c_m \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathcal{I}_{ion}(\mathbf{x}, t; \rho, U)) - \Psi_\rho(\rho_r, U_r), \quad (12.2)$$

where ρ is the transmembrane potential, which is defined as $\rho = \rho_i - \rho_e$, κ is the ratio of the membrane surface area to the volume occupied by the tissue, c_m term is the transmembrane capacitance time unit area. The tissue is assumed to be passive, so the capacitance c_m can be assumed to be not a function of the state variables. The operator $\Psi_\rho(\rho_r)$ is related to multiple time-delay functions $\rho_r(t)$ and $U_r(t)$. The nonlinear operator $\mathcal{I}_{ion}(\mathbf{x}, t; \rho, U)$ describes the sum of transmembrane ionic currents across the cell membrane with U the electrophysiological ionic state variables (which describe e.g., the dynamics of ion-channel and ion concentrations in different cellular compartments). These variables satisfy the following ODE (with H_{ion} a nonlinear operator and Ψ_U a time-delay operator)

$$\frac{\partial U}{\partial t} + H_{ion}(\mathbf{x}, t; \rho, U) = \Psi_U(\rho_r, U_r). \quad (12.3)$$

From (12.1), (12.2) and (12.3), the time delay bidomain model can be formulated in terms of the state variables ρ , ρ_e and U as follows (in $\mathcal{Q} = \Omega \times (0, T)$)

$$\begin{aligned} \kappa(c_m \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathcal{I}_{ion}(\cdot; \rho, U)) - \operatorname{div}(\mathcal{K}_i \nabla \rho) &= \operatorname{div}(\mathcal{K}_e \nabla \rho_e) + \kappa f_{is} + \Psi_\rho(\cdot; \rho_r, U_r), \\ -\operatorname{div}((\mathcal{K}_e + \mathcal{K}_i) \nabla \rho_e) &= \operatorname{div}(\mathcal{K}_i \nabla \rho) + \kappa(f_{es} + f_{is}), \\ \frac{\partial U}{\partial t} + H_{ion}(\cdot; \rho, U) &= \Psi_U(\cdot; \rho_r, U_r). \end{aligned} \quad (12.4)$$

The operators \mathcal{I}_{ion} and H_{ion} which describe electrophysiological behavior of the system have usually the following form (affine functions with respect to U)

$$\mathcal{I}_{ion}(\cdot; \rho, U) = \mathcal{I}_0(\cdot; \rho) + \mathcal{I}_1(\cdot; \rho)U ; \quad H_{ion}(\cdot; \rho, U) = H_0(\cdot; \rho) + \hbar U. \quad (12.5)$$

where \hbar is a sufficiently regular function.

Nota Bene: The parameters κ and c_m are given positive constant values. Afterward, in order to simplify the presentation, we will take $\kappa = 1$ and $c_m = 1$.

The operators Ψ_ρ and Ψ_U which describe multiple time-delays related to ρ and U are defined

as in Belmiloudi [17]

$$\begin{aligned}\Psi_\rho(\mathbf{x}, t; \rho_\tau, U_\tau) &= \sum_{k=1}^{n_1} a_k(\mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}, t - \xi_k(t)) + \sum_{l=1}^{n_2} b_l(\mathbf{x}, t) U(\mathbf{x}, t - \eta_l(t)), \\ \Psi_U(\mathbf{x}, t; \rho_\tau, U_\tau) &= \sum_{k=1}^{n_1} c_k(\mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}, t - \xi_k(t)) + \sum_{l=1}^{n_2} d_l(\mathbf{x}, t) U(\mathbf{x}, t - \eta_l(t)).\end{aligned}\tag{12.6}$$

where a_k, c_k, b_l and d_l (for $k = 1, \dots, n_1$ and $l = 1, \dots, n_2$) are C^∞ functions. For the functions ξ_k and η_l (for $k = 1, \dots, n_1$ and $l = 1, \dots, n_2$), we suppose that (as in [17]):

(RC) $t \in [0, T] \rightarrow (r_k(t) = t - \xi_k(t), k = 1, \dots, n_1)$ and $t \in [0, T] \rightarrow (p_l(t) = t - \eta_l(t), l = 1, \dots, n_2)$ are strictly increasing functions and $(\xi_k(t), k = 1, \dots, n_1)$ and $(\eta_l(t), l = 1, \dots, n_2)$ are C^1 non-negative functions on $[0, T]$. So we have the existence of the inverse functions $(e_k)_k$ of $(r_k)_k$ and $(q_l)_l$ of $(p_l)_l$, respectively. We also define the following subdivision: $s_{-1} = -\delta(0)$, $s_0 = 0$ and $\forall j \in \mathbb{N} - \{0\}$, $s_j = \min_{k=1, \dots, n_1, l=1, \dots, n_2} (e_k(s_{j-1}), q_l(s_{j-1}))$, where $\delta(0) = \max_{k=1, \dots, n_1, l=1, \dots, n_2} (\xi_k(0), \eta_l(0))$, and we denote by $T_j = s_j - s_{j-1}$, $\forall j \in \mathbb{N} - \{0\}$. We introduce the following notations: $I_j =]s_{-1}, s_j[$. $\mathcal{Q}_j = \Omega \times I_j$ for $j \geq 0$.

Remark 12.1 .

According to the hypotheses of the functions $(e_i, i = 1, n)$ we prove easily that:

- (i) the sequences $(s_j)_{j \in \mathbb{N}}$ is strictly increasing and $s_j \leq T, \forall j \geq 0$,
- (ii) for $j \geq 2$, if $t \in (s_{j-1}, s_j)$ then $\forall i = 1, n, r_i(t), p_i(t) \leq s_{j-1}$,
- (iii) if $t \in (s_0, s_1)$ then $\forall i = 1, n, r_i(t), p_i(t) \in (s_{-1}, s_0)$. \square

Remark 12.2 .

The functions a_k, c_k and b_k, d_k are diffusion coefficients which represent the strength of each associated time-delay. A zero coefficient means that the associated previous state doesn't impact the system. Conversely, more of those coefficients are important, and more of the associated time-delays have impact on the electrical behavior of the heart. In this context, time-delays can not be neglected and come from biological inhomogeneous properties of heart region. Electrical waves go through muscles, bones or fat which induce time-delays in their interaction in regards to ionic channels behavior. \square

To close the system, we impose the following boundary conditions

$$(\mathcal{K}_i \nabla(\rho + \rho_e)) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (\mathcal{K}_e \nabla \rho_e) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{on } \Sigma = \partial\Omega \times (0, T),\tag{12.7}$$

where \mathbf{n} being the outward normal to $\Gamma = \partial\Omega$, and the following initial and past conditions (in Ω)

$$\begin{aligned}\rho(\cdot, t = 0) &= \rho_0, \quad U(\cdot, t = 0) = U_0, \\ \rho(\cdot, t') &= \rho_{past}(\cdot, t'), \quad U(\cdot, t') = U_{past}(\cdot, t'), \quad t' \in [-\delta(0), 0].\end{aligned}\tag{12.8}$$

Such problems have compatibility conditions determining whether there are any solutions to the PDEs. This is easily found by integrating the second equation of (12.4) over the domain and using the divergence theorem with boundary conditions (12.7) (a.e. in $(0, T)$). Then (for compatibility

reasons), we require the following condition

$$\langle f_{es} + f_{is}, 1 \rangle = 0. \quad (12.9)$$

Moreover, the function ρ_e is defined within a class of equivalence, regardless of a time-dependent function. This function can be fixed, for example by setting the Gauge condition (a.e. in $(0, T)$)

$$\int_{\Omega} \rho_e dx = 0. \quad (12.10)$$

3 Well-Posedness of the State System

In this section, we prove the existence of a weak solution to problem (12.4), with initial and past conditions (12.8) and subject to boundary conditions (12.7), under some assumptions on the non-linear operators.

3.1 Assumptions, weak formulation and preliminary results

Assumptions and notations

We shall define some notations and basic spaces. The inner product and norm in $L^2(\Omega)$ are respectively denoted by (\cdot, \cdot) and $|\cdot|$. For a given Banach space \mathbb{X} , with norm $\|\cdot\|_{\mathbb{X}}$, of functions

integrable on Ω , we define its subspace $\mathbb{X}/\mathbb{R} = \left\{ u \in \mathbb{X}, \int_{\Omega} u = 0 \right\}$ that is a Banach space with the

norm $\|\cdot\|_{\mathbb{X}}$, and we denote by $[u]$ the projection of $u \in \mathbb{X}$ on \mathbb{X}/\mathbb{R} such that $[u] = u - \frac{1}{mes(\Omega)} \int_{\Omega} u dx$

(with $mes(\Omega)$ standing for the Lebesgue measure of domain Ω). Finally, we introduce the following spaces:

- $\mathbb{H} = L^2(\Omega)$ and $\mathbb{V} = H^1(\Omega)$ endowed with their usual norms,
- $\mathbb{U} = \mathbb{V}/\mathbb{R}$.

We will denote by \mathbb{V}' (resp. \mathbb{U}') the dual of \mathbb{V} (resp. of \mathbb{U}). We have the following continuous embeddings (see e.g. [1, 84])

$$\begin{aligned} \mathbb{V} \subset \mathbb{H} \subset \mathbb{V}', \quad \mathbb{U} \subset \mathbb{H}/\mathbb{R} \subset \mathbb{U}', \\ \mathbb{V} \subset L^p(\Omega) \subset \mathbb{H} \equiv (\mathbb{H})' \subset L^{p'}(\Omega) \subset \mathbb{V}' \end{aligned} \quad (12.11)$$

where $p \geq 2$ if $d = 2$ and $2 \leq p \leq 6$ if $d = 3$, p' is such that $\frac{1}{p'} + \frac{1}{p} = 1$ and the injections $\mathbb{V} \subset \mathbb{H}$ and $\mathbb{U} \subset \mathbb{H}/\mathbb{R}$ are compact.

Lemme 12.1 .

(Poincaré–Wirtinger inequality) Assume that $1 \leq p \leq \infty$ and that Ω is a bounded connected open subset of \mathbb{R}^d with a sufficiently regular boundary $\partial\Omega$ (e.g., a Lipschitz boundary). Then there

exists a Poincaré constant C , depending only on Ω and p , such that for every function u in Sobolev space $W^{1,p}(\Omega)$.

$$\| [u] \|_{L^p(\Omega)} \leq C \| \nabla u \|_{L^p(\Omega)},$$

Remark 12.3 .

From Poincaré–Wirtinger inequality, we can deduce that the H^1 semi-norm and H^1 norm are equivalent in space \mathbb{U} .

From now on, we assume that the following assumptions hold for nonlinear operators and tensor functions appearing in the model.

(H1) We assume that the conductivity tensor functions $\mathcal{K}_\theta \in W^{1,\infty}(\overline{\Omega})$, $\theta \in \{i, e\}$ are symmetric, positive definite matrix functions and that they are uniformly elliptic, i.e., there exist constants $0 < K_1 < K_2$ such that (for $\theta \in \{i, e\}$)

$$K_1 \|\psi\|^2 \leq \psi^T \mathcal{K}_\theta \psi \leq K_2 \|\psi\|^2 \quad \text{in } \overline{\Omega}, \quad \forall \psi \in \mathbb{R}^d. \quad (12.12)$$

Remark 12.4 .

We can emphasize a specificity of tensors \mathcal{K}_e and \mathcal{K}_i (see e.g., [45]).

1. Tensors $\mathcal{K}_e(\mathbf{x})$ and $\mathcal{K}_i(\mathbf{x})$ have the same basis of eigenvectors $Q(\mathbf{x}) = (q_k(\mathbf{x}))_{k=1,d}$ in \mathbb{R}^d , which reflect the organization of the muscle in fibers, and then $\mathcal{K}_i(\mathbf{x}) = Q(\mathbf{x})\Lambda_i(\mathbf{x})Q(\mathbf{x})^T$ and $\mathcal{K}_e(\mathbf{x}) = Q(\mathbf{x})\Lambda_e(\mathbf{x})Q(\mathbf{x})^T$, where $\Lambda_i(\mathbf{x}) = \text{diag}((\lambda_{i,1})_{i=1,d})$ and $\Lambda_e(\mathbf{x}) = \text{diag}((\lambda_{e,i})_{i=1,d})$.

2. The muscle fibers are tangent to Γ so that (for $\theta \in \{i, e\}$)

$$\mathcal{K}_\theta \mathbf{n} = \lambda_{r,d} \mathbf{n}, \quad \text{a.e., in } \Gamma,$$

with $\lambda_{\theta,d}(\mathbf{x}) \geq \lambda > 0$, λ a constant.

Moreover, the functions \mathcal{I}_0 , \mathcal{I}_1 and H_0 appearing in functions \mathcal{I}_{ion} and H_{ion} , are supposed to satisfy the following assumptions.

(H2) The operators \mathcal{I}_0 , \mathcal{I}_1 and H_0 are Carathéodory functions from $(\Omega \times \mathbb{R}) \times \mathbb{R}$ into \mathbb{R} and continuous on ρ (as in [11]). Furthermore, for some $p \geq 2$ if $d = 2$ and $p \in [2, 6]$ if $d = 3$ (for more details see [25]), the following requirements hold :

(i) there exist constants $\beta_i \geq 0$ ($i = 1, \dots, 6$) such that for any $v \in \mathbb{R}$

$$|\mathcal{I}_0(\cdot; v)| \leq \beta_1 + \beta_2 |v|^{p-1} \quad (12.13)$$

$$|\mathcal{I}_1(\cdot; v)| \leq \beta_3 + \beta_4 |v|^{p/2-1} \quad (12.14)$$

$$|H_0(\cdot; v)| \leq \beta_5 + \beta_6 |v|^{p/2}, \quad (12.15)$$

(ii) there exist constants $\mu_1, \mu_2 > 0, \mu_3, \mu_4 \geq 0$ such that for any $(v, w) \in \mathbb{R}^2$

$$\mu_1 v \mathcal{I}_{ion}(\cdot; v, w) + w H_{ion}(\cdot; v, w) \geq \mu_2 |v|^p - \mu_3 (\mu_1 |v|^2 + |w|^2) - \mu_4. \quad (12.16)$$

(H3) The Nemytskii operators I_{ion} and H_{ion} satisfy Carathéodory conditions and there exists some $\mu > 0$ such that the operator $F_\mu : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ defined by

$$F_\mu(\cdot; \mathbf{v}) = \begin{pmatrix} \mu(\mathcal{I}_{ion}(\cdot; \mathbf{v})) \\ H_{ion}(\cdot; \mathbf{v}) \end{pmatrix}, \quad \forall \mathbf{v} = (v, w) \in \mathbb{R}^2 \quad (12.17)$$

satisfies a one-sided Lipschitz condition (see e.g. Seidman et al. [120], Belmiloudi [16]): there exists a constant $C_L > 0$ such that

$$(F_\mu(\cdot; \mathbf{v}_1) - F_\mu(\cdot; \mathbf{v}_2)) \cdot (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \geq -C_L \|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2\|^2, \quad \forall \mathbf{v}_i = (v_i, w_i) \in \mathbb{R}^2, \quad i = 1, 2. \quad (12.18)$$

Lemme 12.2 .

Assume that F_μ is differentiable with respect to (ρ, U) and denote by $\lambda_1(\rho, U) \leq \lambda_2(\rho, U)$ the eigenvalues of the symmetrical part of Jacobian matrix $\nabla F_\mu(\rho, U)$:

$$Q_\mu(\rho, U) = \frac{1}{2} (\nabla F_\mu(\rho, U)^T + \nabla F_\mu(\rho, U)).$$

If there exists a constant C_F independent of ρ and U such as:

$$C_F \leq \lambda_1(\rho, U) \leq \lambda_2(\rho, U), \quad (12.19)$$

then F_μ satisfies the hypothesis (H3).

Proof. Let $\mathbf{v}_i = (\rho_i, U_i) \in \mathbb{R}^2$, for $i = 1, 2$. Since F_μ is differentiable, then

$$F_\mu(\mathbf{v}_1) - F_\mu(\mathbf{v}_2) = \int_0^1 \nabla F_\mu(\mathbf{v}_\theta) (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) d\theta, \quad (12.20)$$

with $\mathbf{v}_\theta = \theta \mathbf{v}_1 + (1 - \theta) \mathbf{v}_2$. Consequently

$$\begin{aligned} (F_\mu(\mathbf{v}_1) - F_\mu(\mathbf{v}_2)) \cdot (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) &= \int_0^1 (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)^T \nabla F_\mu(\mathbf{v}_\theta) (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) d\theta \\ &= \int_0^1 (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)^T Q_\mu(\mathbf{v}_\theta) (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) d\theta. \end{aligned}$$

Since Q_μ is a real symmetric matrix then $Q_\mu = P^T D P$, where the matrix P is a real orthogonal matrix ($P^{-1} = P^T$) and D is diagonal (with the eigenvalues of Q_μ on the diagonal), then

$$(F_\mu(\mathbf{v}_1) - F_\mu(\mathbf{v}_2)) \cdot (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) = \int_0^1 (P(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2))^T D (P(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)) d\theta. \quad (12.21)$$

According to (12.19) we can deduce that (since $P^{-1} = P^T$)

$$(F_\mu(\mathbf{v}_1) - F_\mu(\mathbf{v}_2)) \cdot (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \geq C_F \int_0^1 \|P(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)\|^2 d\theta = C_F \|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2\|^2. \quad (12.22)$$

This completes the proof. □

Variational formulation and preliminary results

We now define the following forms

$$\begin{aligned} A_i(\rho, v) &= \int_{\Omega} \mathcal{K}_i \nabla \rho \cdot \nabla v d\mathbf{x}, & A_i(\rho_e, v_e) &= \int_{\Omega} \mathcal{K}_i \nabla \rho_e \cdot \nabla v_e d\mathbf{x}, \\ A_e(\rho, v) &= \int_{\Omega} \mathcal{K}_e \nabla \rho \cdot \nabla v d\mathbf{x}, & A_e(\rho_e, v_e) &= \int_{\Omega} \mathcal{K}_e \nabla \rho_e \cdot \nabla v_e d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (12.23)$$

Proposition 12.1 .

- (i) A_i and A_e are symmetric bilinear continuous forms on \mathbb{V} and \mathbb{U} , respectively.
(ii) A_i and A_e are coercive on \mathbb{V} and \mathbb{U} , respectively (we denote by α_i and α_e their coercivity coefficients).

Proof. (i) and (ii) are easily obtained providing that properties of tensors \mathcal{K}_i and \mathcal{K}_e and (12.12) are satisfied. \square

We can now write the weak formulation of problem (12.4), with initial and past conditions (12.8) and subject to boundary conditions (12.7) (for all $v \in \mathbb{V}$, $v_e \in \mathbb{U}$ and $u \in \mathbb{H}$)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\rho, v) + \int_{\Omega} \mathcal{I}_{ion}(\cdot; \rho, U) v d\mathbf{x} + A_i(\rho + \rho_e, v) &= \langle f_{is}, v \rangle + \int_{\Omega} \Psi_{\rho}(\cdot, \rho_{\tau}, U_{\tau}) v d\mathbf{x}, \\ A_i(\rho + \rho_e, v_e) + A_e(\rho_e, v_e) &= \langle f_{is} + f_{es}, v_e \rangle, \\ \frac{d}{dt}(U, u) - \int_{\Omega} H_{ion}(\rho, U) u d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} \Psi_U(\cdot; \rho_{\tau}, U_{\tau}) u d\mathbf{x}, \\ \rho(\cdot, t=0) &= \rho_0, \quad U(\cdot, t=0) = U_0, \\ \rho(\cdot, t') &= \rho_{past}(\cdot, t'), \quad U(\cdot, t') = U_{past}(\cdot, t'), \quad t' \in [-\delta(0), 0]. \end{aligned} \quad (12.24)$$

Lemme 12.3 .

Let assumptions **(H2)** and (12.5) be fulfilled. For $(\rho, U) \in L^p(\Omega) \times \mathbb{H}$, there exist constants $C_i > 0$ ($i = 1, 6$) such that (for a.e., t)

$$\|\mathcal{I}_{ion}(\cdot, t; \rho, U)\|_{L^{p'}(\Omega)} \leq C_1 + C_2 \|\rho\|_{L^p(\Omega)}^{p/p'} + C_3 \|U\|_{\mathbb{H}}^{2/p'}, \quad (12.25)$$

$$\|H_{ion}(\cdot, t; \rho, U)\|_{L^2(\Omega)} \leq C_4 + C_5 \|\rho\|_{L^p(\Omega)}^{p/2} + C_6 \|U\|_{\mathbb{H}}, \quad (12.26)$$

where p' is such that $\frac{1}{p} + \frac{1}{p'} = 1$.

Proof. According to (12.13), (12.14) and (12.15), we can deduce that

$$\begin{aligned} |\mathcal{I}_{ion}(\mathbf{x}, t; \rho, U)| &\leq \beta_1 + \beta_2 |\rho|^{p-1} + (\beta_3 + \beta_4 |\rho|^{p/2-1}) |U|, \\ |H_{ion}(\mathbf{x}, t; \rho, U)| &\leq \beta_5 + \beta_6 |\rho|^{p/2} + |\tilde{h}| |U|. \end{aligned} \quad (12.27)$$

If $p \neq 2$, according to Young's inequality, we can deduce that (with $q = 2/p'$ and q' such that $\frac{1}{q} + \frac{1}{q'} = 1$):

$$|U| |\rho|^{p/2-1} \leq \frac{|U|^{2/p'}}{q} + \frac{|\rho|^{p-1}}{q'} \quad \text{and} \quad |U| \leq \frac{|U|^{2/p'}}{q} + \frac{1}{q'}.$$

Consequently, the first relation of (12.27) becomes

$$|\mathcal{I}_{ion}(\mathbf{x}, t; \rho, U)| \leq \beta_7 + \beta_8 |\rho|^{p-1} + \beta_9 |U|^{2/p'}. \quad (12.28)$$

If $p = 2$, the previous inequality still valid. Finally, from (12.28), and by using Minkowski inequality and the fact that $(p-1)p' = p$, we can deduce the estimate (12.25).

Concerning H_{ion} , from the second relation of (12.27) we can derive easily the estimate (12.26). \square

Introduce the following spaces for $S_0 < S_f$ be fixed real values:

$$\mathbb{D}_p(S_0, S_f) = L^{p'}(\mathcal{Q}_S) + L^2(S_0, S_f; \mathbb{V}') \subset L^{p'}(S_0, S_f; \mathbb{V}')$$

and

$$\mathbb{W}_p(S_0, S_f) = \{u \in L^p(\mathcal{Q}_S) \cap L^2(S_0, S_f; \mathbb{V}) \text{ such that } \frac{\partial u}{\partial t} \in \mathbb{D}_p(S_0, S_f)\},$$

where $\mathcal{Q}_S = \Omega \times (S_0, S_f)$, $p \geq 2$ and $\frac{1}{p} + \frac{1}{p'} = 1$.

Lemme 12.4 .

Let π_m be a sequence converging toward π in $\mathbb{W}_p(S_0, S_f)$ weakly and in $L^2(\mathcal{Q}_S)$ strongly and V_m be a sequence converging toward V in $L^2(\mathcal{Q}_S) \cap H^1(S_0, S_f; \mathbb{H})$ weakly. Then we have the following convergence results:

(i) $\mathcal{I}_0(\pi_m) \rightharpoonup \mathcal{I}_0(\pi)$ weakly in $L^{p'}(\mathcal{Q}_S)$

(ii) $H_0(\pi_m) \rightharpoonup H_0(\pi)$ weakly in $L^2(\mathcal{Q}_S)$

(iii) $\mathcal{I}_1(\pi_m)V_m \rightharpoonup \mathcal{I}_1(\pi)V$ weakly in $L^2(\mathcal{Q}_S)$.

Proof. : For the proof of this lemma, we take into account assumption (H2) and we use a classical technique based on taking difference between the sequence and its limit in the form of sum of two terms such that the first uses the weak convergence result and the other uses the strong convergence result (for similar result see [25]). \square

We are now going to prove the existence and uniqueness result of problem (12.24).

Théorème 12.1 .

Let assumptions (H1)-(H3) and (RC) be fulfilled.

For (ρ_0, U_0) , (ρ_{past}, U_{past}) and (f_{is}, f_{es}) given such that $(\rho_0, U_0) \in L^2(\Omega)$, $(\rho_{past}, U_{past}) \in L^2(\mathcal{Q}_0)$ and $(f_{is}, f_{es}) \in L^2(0, T; \mathbb{V}')$, there exist a solution (ρ, ρ_e, U) of problem (12.24) verifying :

$$\rho \in L^2(0, T; \mathbb{V}) \cap L^p(\mathcal{Q}) \cap L^\infty(0, T; \mathbb{H}), \quad \rho_e \in L^2(0, T; \mathbb{U}) \text{ and } U \in C^0([0, T]; \mathbb{H}).$$

Moreover the Lipschitz continuity relation is satisfied, i.e., for any element $(\pi_{0i}, V_{0i}) \in L^2(\Omega)$, $(f_{i,is}, f_{i,es}) \in L^2(0, T; \mathbb{V}')$ and $(\rho_{i,past}, U_{i,past}) \in L^2(\mathcal{Q}_0)$, for $i = 1, 2$, we have

$$\begin{aligned} & \|\rho_1 - \rho_2\|_{L^2(0,T;\mathbb{V}) \cap L^\infty(0,T;\mathbb{H})}^2 + \|U_1 - U_2\|_{L^\infty(0,T;\mathbb{H})}^2 + \|\rho_{e,1} - \rho_{e,2}\|_{L^2(0,T;\mathbb{U})}^2 \\ & \leq C \left(\|f_{1,is} - f_{2,is}\|_{L^2(0,T;\mathbb{V}')}^2 + \|f_{1,es} - f_{2,es}\|_{L^2(0,T;\mathbb{V}')}^2 + \|\rho_{1,past} - \rho_{2,past}\|_{L^2(\mathcal{Q}_0)}^2 \right. \\ & \quad \left. + \|U_{1,past} - U_{2,past}\|_{L^2(\mathcal{Q}_0)}^2 + \|\rho_{01} - \rho_{02}\|_{\mathbb{H}}^2 + \|U_{01} - U_{02}\|_{\mathbb{H}}^2 \right), \end{aligned} \quad (12.29)$$

where $(\rho_i, U_i, \rho_{e,i})$ is the solution of (12.24), which corresponds to data (ρ_{0i}, U_{0i}) , $(\rho_{i,past}, U_{i,past})$ and $(f_{i,is}, f_{i,es})$ (for $i = 1, 2$).

Proof. : To prove the existence of a unique solution on \mathcal{Q} , we first establish the existence of a unique solution on $\mathcal{Q}_j, j \geq 1$ and obtain some estimations.

We solve the problem on \mathcal{Q}_1 and obtain the existence of a unique solution on \mathcal{Q}_1 . Then, the existence of a unique solution on \mathcal{Q}_2 is proved by using the solution on \mathcal{Q}_1 to generate the initial data at s_1 . This advancing process is repeated for $\mathcal{Q}_3, \mathcal{Q}_4, \dots$ until the final set is reached. Hereafter, the solution on \mathcal{Q}_j will be denoted by $(\rho_j, \rho_{e,j}, U_j)$ for $j = 1, \dots$.

Now we introduce the following problems (\mathcal{P}_j) for $j \in \mathbb{N} - \{0\}$ (for $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (s_{j-1}, s_j)$)

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \pi_j}{\partial t} + \mathcal{I}_{ion}(\cdot; \pi_j, V_j) - \operatorname{div}(\mathcal{K}_i \nabla(\pi_j + \pi_{e,j})) = g_{e,j}, \\
& -\operatorname{div}((\mathcal{K}_e + \mathcal{K}_i) \nabla \pi_{e,j}) - \operatorname{div}(\mathcal{K}_i \nabla \pi_j) = (f_{es} + f_{is}), \\
& \frac{\partial V_j}{\partial t} + H_{ion}(\cdot; \pi_j, V_j) = h_j, \\
& \mathcal{K}_i \nabla(\pi_j + \pi_{e,j}) \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ on } \partial\Omega \times (s_{j-1}, s_j), \\
& \mathcal{K}_i \nabla \pi_j \cdot \mathbf{n} + (\mathcal{K}_i + \mathcal{K}_e) \nabla \pi_{e,j} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ on } \partial\Omega \times (s_{j-1}, s_j), \\
& \pi_j(\mathbf{x}, s_{j-1}) = \rho_{j-1}(\mathbf{x}, s_{j-1}) \in L^2(\Omega), \\
& V_j(\mathbf{x}, s_{j-1}) = U_{j-1}(\mathbf{x}, s_{j-1}) \in L^2(\Omega),
\end{aligned} \tag{12.30}$$

where $(\rho_{j-1}, \rho_{e,j-1}, U_{j-1}) \in L^2(\mathcal{Q}_{j-1})$ and

$$\begin{aligned}
g_j(\mathbf{x}, t) &= f_{is} + \sum_{k=1}^{n_1} a_k(\mathbf{x}, t) \rho_{j-1}(\mathbf{x}, t - \xi_k(t)) + \sum_{l=1}^{n_2} b_l(\mathbf{x}, t) U_{j-1}(\mathbf{x}, t - \eta_l(t)), \\
h_j(\mathbf{x}, t) &= \sum_{k=1}^{n_1} c_k(\mathbf{x}, t) \rho_{j-1}(\mathbf{x}, t - \xi_k(t)) + \sum_{l=1}^{n_2} d_l(\mathbf{x}, t) U_{j-1}(\mathbf{x}, t - \eta_l(t)).
\end{aligned}$$

Since $f_{es} \in L^2(0, T; \mathbb{V}')$, $(\rho_{j-1}, U_{j-1}) \in L^2(\mathcal{Q}_{j-1})$ and $(d_i, i = 1, n) \in \mathcal{C}^\infty(\overline{\mathcal{Q}})$, and according to the remark 12.1, we have that $g_{e,j}$ and h_j are in $L^2(s_{j-1}, s_j, \mathbb{V})$. Then using the proposition 12.2, we have that the problem (\mathcal{P}_j) admits a unique solution $(\pi_j, V_j, \pi_{e,j}) \in \mathcal{W}_j \times L^\infty(s_{j-1}, s_j, \mathbb{H})$, where $\mathcal{W}_j = (L^2(s_{j-1}, s_j, \mathbb{V}) \cap L^p(\mathcal{Q}) \cap L^\infty(s_{j-1}, s_j, \mathbb{H})) \times C^0([s_{j-1}, s_j], \mathbb{H})$.

According to [92], we have that the hypotheses **(H3)** imply that the Nemytsky operator F_μ is bounded and continuous, and then by using the regularity of π_j , we obtain easily that $\frac{\partial \pi_j}{\partial t} \in L^2(s_{j-1}, s_j, \mathbb{V}')$. According to [84], we can deduce that $\pi_j \in C^0([s_{j-1}, s_j], L^2(\Omega))$ and then $(\pi_j, V_j) \in C^0([s_{j-1}, s_j], L^2(\Omega))$. Consequently, we can extend the result to the cylinder set \mathcal{Q}_{j+1} by taking $(\rho_j, \rho_{e,j}, U_j) = (\rho_{j-1}, \rho_{e,j-1}, U_{j-1})$ on \mathcal{Q}_{j-1} and $(\rho_j, \rho_{e,j}, U_j) = (\pi_j, \pi_{e,j}, V_j)$ on $\Omega \times (s_{j-1}, s_j)$.

We observe that for $j=1$, we have (according to (12.24))

$$\begin{aligned}
g_1(\mathbf{x}, t) &= f_{is} + \sum_{k=1}^{n_1} a_k(\mathbf{x}, t) \rho_{past}(\mathbf{x}, t - \xi_k(t)) + \sum_{l=1}^{n_2} b_l(\mathbf{x}, t) U_{past}(\mathbf{x}, t - \eta_l(t)), \\
h_1(\mathbf{x}, t) &= \sum_{k=1}^{n_1} c_k(\mathbf{x}, t) \rho_{past}(\mathbf{x}, t - \xi_k(t)) + \sum_{l=1}^{n_2} d_l(\mathbf{x}, t) U_{past}(\mathbf{x}, t - \eta_l(t)),
\end{aligned}$$

and then $g_1, h_1 \in L^2(s_0, s_1; \mathbb{V}')$. By using the previous result, the problem (\mathcal{P}_1) admits a unique

solution V_1 such that $(\pi_1, \pi_{e,1}, V_1) \in \mathcal{C}^0([s_{-1}, s_0], L^2(\Omega)) \cap \mathcal{W}_1$. We obtain then the solution $(\rho_1, \rho_{e,1}, U_1)$. We injecte now $(\rho_1, \rho_{e,1}, U_1)$ in the problem (\mathcal{P}_2) and by using the same approach, we obtain the existence and uniqueness of $(\pi_2, \pi_{e,2}, V_2) \in \mathcal{C}^0([s_1, s_2], L^2(\Omega)) \cap \mathcal{W}_2$ (solution of (\mathcal{P}_2)). We can now iterate the process for any domain \mathcal{Q}_j , for $j \geq 1$ and we obtain the existence and uniqueness of $(\pi_j, \pi_{e,j}, V_j) \in \mathcal{C}^0([s_{j-1}, s_j], L^2(\Omega)) \cap \mathcal{W}_j$ solution of (\mathcal{P}_j) . We deduce then the existence and uniqueness of the solution $(\rho, \rho_e, U) \in \mathcal{W}$ of (12.24) such that $(\rho, \rho_e, U)|_{\mathcal{Q}_j} = (\rho_j, \rho_{e,j}, U_j), j \geq 1$. We are now going to prove the estimation given in theorem.

Let $(\rho_i, U_i, \rho_{e,i})$ be the solutions of (12.24), which corresponds to data $(\pi_{0i}, V_{0i}), (f_{i,is}, f_{i,es})$ and $(\rho_{i,past}, U_{i,past})$ (for $i = 1, 2$). We denote by $\rho = \rho_1 - \rho_2, U = U_1 - U_2, \rho_e = \rho_{e,1} - \rho_{e,2}, \rho_0 = \rho_{01} - \rho_{02}, U_0 = U_{01} - U_{02}, \rho_{past} = \rho_{1,past} - \rho_{2,past}, U_{past} = U_{1,past} - U_{2,past}, f_{es} = f_{1,es} - f_{2,es}, f_{is} = f_{1,is} - f_{2,is}$. Then according to (12.24) and setting $(v, u, v_e) = (\rho, U, \rho_e)$ we can deduce that (since delay operators are linear)

$$\begin{aligned} & \frac{d}{2dt} \|\rho\|_{\mathbb{H}}^2 + \int_{\Omega} (\mathcal{I}_{ion}(\cdot; \rho_1, U_1) - \mathcal{I}_{ion}(\cdot; \rho_2, U_2)) \rho d\mathbf{x} + A_i(\rho + \rho_e, \rho) \\ & \quad = \langle f_{is}, \rho \rangle + \int_{\Omega} \Psi_{\rho}(\cdot, \rho_{\tau}, U_{\tau}) \rho d\mathbf{x}, \\ & A_i(\rho + \rho_e, \rho_e) + A_e(\rho_e, \rho_e) = \langle f_{is} + f_{es}, \rho_e \rangle, \\ & \frac{d}{2dt} \|U\|_{\mathbb{H}}^2 + \int_{\Omega} (H_{ion}(\cdot; \rho_1, U_1) - H_{ion}(\cdot; \rho_2, U_2)) U d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \Psi_U(\cdot, \rho_{\tau}, U_{\tau}) U d\mathbf{x}, \\ & \rho(\cdot, 0) = \rho_0, U(\cdot, 0) = U_0, \text{ on } \Omega, \\ & \rho(\cdot, t') = \rho_{past}(\cdot, t'), \quad U(\cdot, t') = U_{past}(\cdot, t'), \text{ on } \mathcal{Q}_0. \end{aligned} \tag{12.31}$$

Consequently, for all $\mu > 0$, we can deduce (according to the expression of F_{μ})

$$\begin{aligned} & \frac{d}{2dt} (\mu \|\rho\|_{\mathbb{H}}^2 + \|U\|_{\mathbb{H}}^2) + \mu A_i(\rho + \rho_e, \rho + \rho_e) + \mu A_e(\rho_e, \rho_e) \\ & + \int_{\Omega} (F_{\mu}(\cdot; \rho_1, U_1) - F_{\mu}(\cdot; \rho_2, U_2)) \cdot (\rho, U) d\mathbf{x} = \mu \langle f_{is}, \rho \rangle + \mu \langle f_{is} + f_{es}, \rho_e \rangle \\ & + \mu \int_{\Omega} \Psi_{\rho}(\cdot, \rho_{\tau}, U_{\tau}) \rho d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \Psi_U(\cdot, \rho_{\tau}, U_{\tau}) U d\mathbf{x}. \end{aligned} \tag{12.32}$$

According to (12.18) and to coercivity of A_i and A_e , we have

$$\begin{aligned} & \frac{d}{2dt} (\mu \|\rho\|_{\mathbb{H}}^2 + \|U\|_{\mathbb{H}}^2) + \mu \alpha_i \|\rho + \rho_e\|_{\mathbb{V}}^2 + \mu \alpha_e \|\rho_e\|_{\mathbb{V}}^2 \\ & \leq C_1 (\mu \|\pi\|_{\mathbb{H}}^2 + \|V\|_{\mathbb{H}}^2) + C_2 (\|f_{is}\|_{\mathbb{V}'}^2 + \|f_{es}\|_{\mathbb{V}'}^2) \\ & \quad + C_3 (| \int_{\Omega} \Psi_{\rho}(\cdot, \rho_{\tau}, U_{\tau}) \rho d\mathbf{x} | + | \int_{\Omega} \Psi_U(\cdot, \rho_{\tau}, U_{\tau}) U d\mathbf{x} |). \end{aligned} \tag{12.33}$$

According to regularity of $(a_k)_{k=1, n_1}, (c_k)_{k=1, n_1}, (b_l)_{l=1, n_2}, (c_l)_{l=1, n_2}$ and to Remark 12.1, we obtain

(for $k = 1, n_1, l = 1, n_2$ and $T \geq t \geq 0$)

$$\begin{aligned}
& \left| \int_0^t \left(\int_{\Omega} a_k(x, s) \rho(\mathbf{x}, r_k(s)) \rho(\mathbf{x}, s) d\mathbf{x} \right) ds \right| \\
& \leq \|a_k\|_{\infty} \left(\int_0^t \|\rho(\cdot, r_k(s))\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2} \left(\int_0^t \|\rho(\cdot, s)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2}, \\
& \left| \int_0^t \left(\int_{\Omega} c_k(x, s) \rho(\mathbf{x}, r_k(s)) U(\mathbf{x}, s) d\mathbf{x} \right) ds \right| \\
& \leq \|c_k\|_{\infty} \left(\int_0^t \|\rho(\cdot, r_k(s))\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2} \left(\int_0^t \|U(\cdot, s)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2}, \\
& \left| \int_0^t \left(\int_{\Omega} b_l(x, s) U(\mathbf{x}, p_l(s)) \rho(\mathbf{x}, s) d\mathbf{x} \right) ds \right| \\
& \leq \|b_l\|_{\infty} \left(\int_0^t \|U(\cdot, p_l(s))\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2} \left(\int_0^t \|\rho(\cdot, s)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2}, \\
& \left| \int_0^t \left(\int_{\Omega} d_l(x, s) U(\mathbf{x}, p_l(s)) U(\mathbf{x}, s) d\mathbf{x} \right) ds \right| \\
& \leq \|d_l\|_{\infty} \left(\int_0^t \|U(\cdot, p_l(s))\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2} \left(\int_0^t \|U(\cdot, s)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2}.
\end{aligned} \tag{12.34}$$

Setting $\theta = r_k(s)$ (resp. $\theta = p_l(s)$), we have $s = e_k(\theta)$ (resp. $s = q_l(\theta)$) and then $ds = e'_k(\theta)d\theta$ (resp. $ds = q'_l(\theta)d\theta$). So

$$\begin{aligned}
\int_0^t \|\rho(\cdot, r_k(s))\|_{L^2(\Omega)}^2 ds & \leq \|e'_k\|_{\infty} \left(\int_{-\xi_k(0)}^{t-\xi_k(t)} \|\rho(\cdot, \theta)\|_{L^2(\Omega)}^2 d\theta \right), \\
\int_0^t \|U(\cdot, p_l(s))\|_{L^2(\Omega)}^2 ds & \leq \|q'_l\|_{\infty} \left(\int_{-\eta_l(0)}^{t-\eta_l(t)} \|U(\cdot, \theta)\|_{L^2(\Omega)}^2 d\theta \right).
\end{aligned} \tag{12.35}$$

Since $-\delta(0) \leq -\xi_k(0), -\delta(0) \leq -\eta_k(0)$, $t - \xi_k(t) \leq t$ and $t - \eta_k(t) \leq t$ we can deduce that

$$\begin{aligned}
\int_0^t \|\rho(\cdot, r_k(s))\|_{L^2(\Omega)}^2 ds & \leq \|e'_k\|_{\infty} (\|\rho_{past}\|_{L^2(\mathcal{Q}_0)}^2 + \int_0^t \|\rho(\cdot, \theta)\|_{L^2(\Omega)}^2 d\theta), \\
\int_0^t \|U(\cdot, p_l(s))\|_{L^2(\Omega)}^2 ds & \leq \|q'_l\|_{\infty} (\|U_{past}\|_{L^2(\mathcal{Q}_0)}^2 + \int_0^t \|U(\cdot, \theta)\|_{L^2(\Omega)}^2 d\theta).
\end{aligned} \tag{12.36}$$

According to (12.36) and (12.34) we can deduce that

$$\begin{aligned}
& \left| \int_0^t \left(\int_{\Omega} a_k(x, s) \rho(\mathbf{x}, r_k(s)) \rho(\mathbf{x}, s) d\mathbf{x} \right) ds \right| \\
& \leq C_{\infty} (\|\rho_{past}\|_{L^2(\mathcal{Q}_0)} + \left(\int_0^t \|\rho(\cdot, s)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2}) \left(\int_0^t \|\rho(\cdot, s)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2}, \\
& \left| \int_0^t \left(\int_{\Omega} c_k(x, s) \rho(\mathbf{x}, r_k(s)) U(\mathbf{x}, s) d\mathbf{x} \right) ds \right| \\
& \leq C_{\infty} (\|\rho_{past}\|_{L^2(\mathcal{Q}_0)} + \left(\int_0^t \|\rho(\cdot, s)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2}) \left(\int_0^t \|U(\cdot, s)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2}, \\
& \left| \int_0^t \left(\int_{\Omega} b_l(x, s) U(\mathbf{x}, p_l(s)) \rho(\mathbf{x}, s) d\mathbf{x} \right) ds \right| \\
& \leq C_{\infty} (\|U_{past}\|_{L^2(\mathcal{Q}_0)} + \left(\int_0^t \|U(\cdot, s)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2}) \left(\int_0^t \|\rho(\cdot, s)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2}, \\
& \left| \int_0^t \left(\int_{\Omega} d_l(x, s) U(\mathbf{x}, p_l(s)) U(\mathbf{x}, s) d\mathbf{x} \right) ds \right| \\
& \leq C_{\infty} (\|U_{past}\|_{L^2(\mathcal{Q}_0)} + \left(\int_0^t \|U(\cdot, s)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2}) \left(\int_0^t \|U(\cdot, s)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2},
\end{aligned} \tag{12.37}$$

where $C_{\infty} = \max_{k=1, n_1; l=1, n_2} (\|a_k\|_{\infty} \|e'_k\|_{\infty}^{1/2}, \|c_k\|_{\infty} \|e'_k\|_{\infty}^{1/2}, \|d_l\|_{\infty} \|q'_l\|_{\infty}^{1/2}, \|b_l\|_{\infty} \|q'_l\|_{\infty}^{1/2})$.

Using (12.37), the relation (12.33) becomes (by integrating in time between 0 and t)

$$\begin{aligned}
& (\mu \|\rho(\cdot, t)\|_{\mathbb{H}}^2 + \|U(\cdot, t)\|_{\mathbb{H}}^2) + \mu \int_0^t (\alpha_i \|\rho + \rho_e\|_{\mathbb{V}}^2 + \alpha_e \|\rho_e\|_{\mathbb{V}}^2) ds \leq (\mu \|\rho_0\|_{\mathbb{H}}^2 + \|U_0\|_{\mathbb{H}}^2) \\
& + C_4 \int_0^t (\mu \|\rho(\cdot, s)\|_{\mathbb{H}}^2 + \|U(\cdot, s)\|_{\mathbb{H}}^2) ds \\
& + C_5 (\|f_{is}\|_{L^2(0, T; \mathbb{V}')}^2 + \|f_{es}\|_{L^2(0, T; \mathbb{V}')}^2 + \|\rho_{past}\|_{L^2(\mathcal{Q}_0)}^2 + \|U_{past}\|_{L^2(\mathcal{Q}_0)}^2),
\end{aligned} \tag{12.38}$$

and then

$$\begin{aligned}
& (\mu \|\rho(\cdot, t)\|_{\mathbb{H}}^2 + \|U(\cdot, t)\|_{\mathbb{H}}^2) \leq (\mu \|\rho_0\|_{\mathbb{H}}^2 + \|U_0\|_{\mathbb{H}}^2) + C_6 \int_0^t (\mu \|\rho(\cdot, s)\|_{\mathbb{H}}^2 + \|U(\cdot, s)\|_{\mathbb{H}}^2) ds \\
& + C_7 (\|f_{is}\|_{L^2(0, T; \mathbb{V}')}^2 + \|f_{es}\|_{L^2(0, T; \mathbb{V}')}^2 + \|\rho_{past}\|_{L^2(\mathcal{Q}_0)} + \|U_{past}\|_{L^2(\mathcal{Q}_0)}).
\end{aligned} \tag{12.39}$$

By first using Gronwall lemma in (12.39) and then in (12.38), we easily deduce the following estimate (since ρ_e satisfies (12.10))

$$\begin{aligned}
& \|\rho\|_{L^{\infty}(0, T; \mathbb{H}) \cap L^2(0, T; \mathbb{V})}^2 + \|\rho_e\|_{L^2(0, T; \mathbb{U})}^2 + \|U\|_{L^{\infty}(0, T; \mathbb{H})}^2 \\
& \leq C_8 (\|f_{is}\|_{L^2(0, T; \mathbb{V}')}^2 + \|f_{es}\|_{L^2(0, T; \mathbb{V}')}^2) \\
& + C_9 (\|\rho_0\|_{\mathbb{H}}^2 + \|U_0\|_{\mathbb{H}}^2 + \|\rho_{past}\|_{L^2(\mathcal{Q}_0)}^2 + \|U_{past}\|_{L^2(\mathcal{Q}_0)}^2).
\end{aligned}$$

This completes the proof. \square

Let us now state and prove the proposition previously used. For this, we consider the following

problem on $\mathcal{Q}_S = \Omega \times (S_0, S_f)$ (with $S_0 < S_f$)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \pi}{\partial t} + \mathcal{I}_{ion}(\cdot; \pi, V) - \operatorname{div}(\mathcal{K}_i \nabla(\pi + \pi_e)) &= g \in L^2(S_0, S_f; \mathbb{V}'), \\ -\operatorname{div}((\mathcal{K}_e + \mathcal{K}_i) \nabla \pi_e) - \operatorname{div}(\mathcal{K}_i \nabla \pi) &= f \in L^2(S_0, S_f; \mathbb{V}'), \\ \frac{\partial V}{\partial t} + H_{ion}(\cdot; \pi, V) &= h \in L^2(\mathcal{Q}_S), \end{aligned} \quad (12.40)$$

with initial and boundary conditions

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_i \nabla(\pi + \pi_e) \cdot \mathbf{n} &= 0, \quad \mathcal{K}_i \nabla \pi \cdot \mathbf{n} + (\mathcal{K}_i + \mathcal{K}_e) \nabla \pi_e \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ on } \Sigma_S = \partial\Omega \times (S_0, S_f), \\ \pi(\mathbf{x}, S_0) &= \pi_0(\mathbf{x}), V(\mathbf{x}, S_0) = V_0(\mathbf{x}), \text{ on } \Omega. \end{aligned}$$

The weak formulation of (12.40) can be given by (for all $v \in \mathbb{V}$, $v_e \in \mathbb{U}$, $u \in \mathbb{H}$)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\pi, v) + \int_{\Omega} \mathcal{I}_{ion}(\cdot; \pi, V) v d\mathbf{x} + A_i(\pi + \pi_e, v) &= \langle g, v \rangle, \\ A_i(\pi + \pi_e, v_e) + A_e(\pi_e, v_e) &= \langle g, v_e \rangle, \\ \frac{d}{dt}(V, u) + \int_{\Omega} H_{ion}(\cdot; \pi, V) u d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} h u d\mathbf{x}, \\ \pi(\mathbf{x}, S_0) &= \pi_0(\mathbf{x}), V(\mathbf{x}, S_0) = V_0(\mathbf{x}), \text{ on } \Omega. \end{aligned} \quad (12.41)$$

Proposition 12.2 .

Let assumptions (H1)-(H3) and (RC) be fulfilled.

For any $(\pi_0, V_0) \in L^2(\Omega)$ and $(f, g, h) \in L^2(S_0, S_f; \mathbb{V}') \times L^2(S_0, S_f; \mathbb{V}') \times L^2(\mathcal{Q}_S)$ such that $\langle f, 1 \rangle_{\mathbb{V}', \mathbb{V}} = 0$, there exists a unique solution (π, V, π_e) of (12.41), such that

$$\begin{aligned} (\pi, V, \pi_e) &\in (L^2(S_0, S_f; \mathbb{V}) \cap L^p(\mathcal{Q}_S)) \times L^2(\mathcal{Q}_S) \times L^2(S_0, S_f; \mathbb{U}), \\ \left(\frac{\partial \pi}{\partial t}, \frac{\partial V}{\partial t}\right) &\in \mathbb{D}_p(S_0, S_f) \times L^2(\mathcal{Q}_S), \\ (\pi, V) &\in C^0([S_0, S_f]; \mathbb{H}). \end{aligned} \quad (12.42)$$

Moreover, the Lipschitz continuity relation is satisfied, i.e., for any element $(\pi_{0i}, V_{0i}) \in L^2(\Omega)$ and $(f_i, g_i, h_i) \in L^2(S_0, S_f; \mathbb{V}') \times L^2(S_0, S_f; \mathbb{V}') \times L^2(\mathcal{Q}_S)$, for $i = 1, 2$, we have

$$\begin{aligned} &\|\pi_1 - \pi_2\|_{L^2(S_0, S_f; \mathbb{V}) \cap L^\infty(S_0, S_f; \mathbb{H})}^2 + \|V_1 - V_2\|_{L^\infty(S_0, S_f; \mathbb{H})}^2 + \|\pi_{e,1} - \pi_{e,2}\|_{L^2(S_0, S_f; \mathbb{U})}^2 \\ &\leq C \left(\|f_1 - f_2\|_{L^2(S_0, S_f; \mathbb{V}')}^2 + \|g_1 - g_2\|_{L^2(S_0, S_f; \mathbb{V}')}^2 + \|h_1 - h_2\|_{L^2(S_0, S_f; \mathbb{H})}^2 \right. \\ &\quad \left. + \|\pi_{01} - \pi_{02}\|_{\mathbb{H}}^2 + \|V_{01} - V_{02}\|_{\mathbb{H}}^2 \right), \end{aligned} \quad (12.43)$$

where $(\pi_i, V_i, \pi_{e,i})$ is the solution of (12.41), which corresponds to data $(\pi_{0i}, V_{0i}, f_i, g_i, h_i)$ (for $i = 1, 2$).

Proof. The prove of the existence result of (π, V, π_e) , satisfying the first and second regularity of (12.42), can be obtained by using similar argument as used in [25]. Precisely, the existence result follow from the classical Faedo-Galerkin method and Lemma 12.4, according to properties of different forms appearing in the weak formulation (12.41), we obtain a priori estimates necessary to prove the convergence of an approximate solution $(\pi_m, V_m, \pi_{e,m})$ for different necessary topologies. So, we omit the tedious details. By Lions [83] we conclude that (π, V) satisfies the third result of

(12.42).

Prove now the estimation given in theorem. Let $(\pi_i, V_i, \pi_{e,i})_{i=1,2}$ be two solutions of (12.41), which corresponds to data $(\pi_{0i}, V_{0i}, f_i, g_i, h_i)_{i=1,2}$, respectively. We denote by $\pi = \pi_1 - \pi_2$, $V = V_1 - V_2$, $\pi_e = \pi_{e,1} - \pi_{e,2}$, $\pi_0 = \pi_{01} - \pi_{02}$, $V_0 = V_{01} - V_{02}$, $f = f_1 - f_2$, $g = g_1 - g_2$ and $h = h_1 - h_2$. Then according to (12.41) and setting $(v, u, v_e) = (\pi, V, \pi_2)$, we can deduce that

$$\begin{aligned} \frac{d}{2dt} \|\pi\|_{\mathbb{H}}^2 + \int_{\Omega} (\mathcal{I}_{ion}(\cdot; \pi_1, V_1) - \mathcal{I}_{ion}(\cdot; \pi_2, V_2)) \pi d\mathbf{x} + A_i(\pi + \pi_e, \pi) &= \langle g, \pi \rangle, \\ A_i(\pi + \pi_e, \pi_e) + A_e(\pi_e, \pi_e) &= \langle f, \pi_e \rangle, \\ \frac{d}{2dt} \|V\|_{\mathbb{H}}^2 + \int_{\Omega} (H_{ion}(\cdot; \pi_1, V_1) - H_{ion}(\cdot; \pi_2, V_2)) V d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} hV d\mathbf{x}, \\ \pi(\mathbf{x}, S_0) = \pi_0(\mathbf{x}), V(\mathbf{x}, s_0) = V_0(\mathbf{x}), &\text{ on } \Omega. \end{aligned} \quad (12.44)$$

Consequently, for all $\mu > 0$, we can deduce (according to expression of F_{μ})

$$\begin{aligned} \frac{d}{2dt} (\mu \|\pi\|_{\mathbb{H}}^2 + \|V\|_{\mathbb{H}}^2) + \mu A_i(\pi + \pi_e, \pi + \pi_e) + \mu A_e(\pi_e, \pi_e) \\ + \int_{\Omega} (F_{\mu}(\cdot; \pi_1, V_1) - F_{\mu}(\cdot; \pi_2, V_2)) \cdot (\pi, V) d\mathbf{x} = \mu \langle g, \pi \rangle + \mu \langle f, \pi_e \rangle + \int_{\Omega} hV d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (12.45)$$

According to (12.18) and to coercivity of A_i and A_e , we have

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\mu \|\pi\|_{\mathbb{H}}^2 + \|V\|_{\mathbb{H}}^2) + \mu \alpha_i \|\pi + \pi_e\|_{\mathbb{V}}^2 + \mu \alpha_e \|\pi_e\|_{\mathbb{V}}^2 \leq C_{10} (\mu \|\pi\|_{\mathbb{H}}^2 + \|V\|_{\mathbb{H}}^2) \\ + C_{11} (\|f\|_{\mathbb{V}'}^2 + \|g\|_{\mathbb{V}'}^2 + \|h\|_{\mathbb{H}}^2) \end{aligned} \quad (12.46)$$

and then

$$\frac{d}{dt} (\mu \|\pi\|_{\mathbb{H}}^2 + \|V\|_{\mathbb{H}}^2) \leq C_{10} (\mu \|\pi\|_{\mathbb{H}}^2 + \|V\|_{\mathbb{H}}^2) + C_{11} (\|f\|_{\mathbb{V}'}^2 + \|g\|_{\mathbb{V}'}^2 + \|h\|_{\mathbb{H}}^2). \quad (12.47)$$

By first using Gronwall lemma in (12.47) and then by integrating in time (12.46), we easily deduce the following estimate (since π_e satisfies (12.10))

$$\begin{aligned} \|\pi\|_{L^{\infty}(S_0, S_f; \mathbb{H}) \cap L^2(S_0, S_f; \mathbb{V})}^2 + \|\pi_e\|_{L^2(S_0, S_f; \mathbb{V})}^2 + \|V\|_{L^{\infty}(S_0, S_f; \mathbb{H})}^2 \\ \leq C \left(\|f\|_{L^2(S_0, S_f; \mathbb{V}')}^2 + \|g\|_{L^2(S_0, S_f; \mathbb{V}')}^2 + \|h\|_{L^2(S_0, S_f; \mathbb{H})}^2 + \|\pi_0\|_{\mathbb{H}}^2 + \|V_0\|_{\mathbb{H}}^2 \right). \end{aligned} \quad (12.48)$$

Uniqueness of the solution is a consequence of previous estimation. This completes the proof. \square

4 Numerical applications

In this section, we shall present numerical simulations of the problem to illustrate our result with showing 2D simulation we have done with two of the most used ionic model : FitzHugh-Nagumo model [65] and Mitchell-Shaeffer model [104].

In a first time, we will present the impact of each time-delay operator Ψ_{ρ} and Ψ_U across the time in $(0, T)$ in the middle point of Ω , then we will show 3D representation of the wave propagation

at chosen times $t \in (0, T)$.

The domain Ω corresponds to an approximate shape of the heart (Figure 12.1). The boundary of the domain Ω is defined by (for $(x, y) \in \partial\Omega$) : $|x - a|^3 + (y - b - c|x - d|^2)^2 - e = 0$, where a, b, c, d, e are given positive constants. Here we choose $a = 0.5$, $b = 3.5$, $c = 0.5$, $c = 1$, $d = 0.5$ and $e = 1/15$.

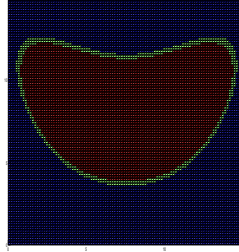


Figure 12.1: Domain Ω of the heart

We use some biophysical parameters which are presented in Table 12.1.

Description	name	value (unit)
Cell surface to volume ratio	κ	200 (cm^{-1})
transmembrane capacitance	c_m	10^{-3} (F/ cm^2)
Depolarization length	\mathcal{T}_{in}	4.5 (ms)
Repolarization length	\mathcal{T}_{out}	90 (ms)
Opening time constant	\mathcal{T}_{open}	100 (ms)
Closing time constant	\mathcal{T}_{close}	130 (ms)
Change-over voltage	ρ_{gate}	-67 (mV)
Resting potential	ρ_{min}	-80 (mV)
Maximum potential	ρ_{max}	20 (mV)
Activation time	\mathcal{T}_{act}	10 (ms)
Delay in external stimulus	\mathcal{T}_d	20 (ms)

Table 12.1: Cell membrane parameters.

In those both applications, we impose the following initial conditions

$$\rho(x, y, 0) = \rho_{min}, \quad U(x, y, 0) = \frac{1}{(\rho_{max} - \rho_{min})^2}, \quad (12.49)$$

and we consider the following delay operators as:

$$\begin{aligned} \Psi_\rho(\rho_r) &= \alpha_\rho r (\rho(t - \xi_1(t)) + \rho(t - \xi_2(t))), \\ \Psi_U(U_r) &= \alpha_U r (U(t - \xi_3(t)) + U(t - \xi_4(t))), \end{aligned} \quad (12.50)$$

where r is a chosen constant, ξ_1 , ξ_2 , ξ_3 and ξ_4 are known functions, and α_ρ and α_U are activation parameters. In our simulations we choose $\xi_1 = 0.008s$, $\xi_2 = 0.024s$, $\xi_3 = 0.016s$ and $\xi_4 = 0.032s$. In a first time we will choose $\alpha_\rho = \alpha_U = 1$ and in a second time we will choose $\alpha_\rho = 1$ and $\alpha_U = 0$

or $\alpha_\rho = 0$ and $\alpha_U = 1$ to analyse the impact of each operator on the system behaviour, one after the other. Finally, in those both models we use some biophysical parameters which are presented in Table 12.1. We choose $T = 1s$, $K_i = K_e = 0.003S.cm^{-1}$ and we define, as in [48], the external stimulus in a short time $0 < t - \mathcal{T}_d < T_{act}$, where \mathcal{T}_d is a time-delay), and we define f_{is} and f_{es} as ($\mathbf{x} = (x, y)$)

$$f_{es} = -f_{is}(\mathbf{x}, t) = I_{app}\chi_H(\mathbf{x})\chi_{[0, T_{act}]}(t - \mathcal{T}_d)\chi_{prop}(\mathbf{x}, t - \mathcal{T}_d)\Phi(\mathbf{x}), \quad (12.51)$$

where I_{app} is the amplitude of the external applied stimulus with $I_{app} = 10^4$, and the functions χ_H , $\chi_{[0, T_{act}]}$ and χ_{prop} are defined by

$$\chi_H(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{if } \mathbf{x} \in \Omega, \\ 0 & \text{else} \end{cases} \quad (12.52)$$

$$\chi_{[0, T_{act}]}(t) = \begin{cases} 1 & \text{if } t < T_{act}, \\ 0 & \text{else} \end{cases} \quad (12.53)$$

$$\chi_{prop}(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{if } x + y < 2t/T_{act}, \\ 0 & \text{else.} \end{cases} \quad (12.54)$$

The last characteristic is associated to wave propagation as a diagonal which evolves from to left-bottom side to right-top side of Ω . The function Φ , which corresponds to the shape of the electrical wave, is defined by

$$\Phi(\mathbf{x}) = 1 - \frac{1}{L_H} \left(x - \frac{L_H}{2} \right)^2 - \frac{1}{L_H} \left(y - \frac{L_H}{2} \right)^2, \quad (12.55)$$

where $L_H = 15$ is the characteristic length of Ω . To perform the numerical simulations, we have developed a numerical scheme reliable, efficient, stable and easy to implement in the context of such bidomain systems by using a modified Lattice Boltzmann Method that was introduced in [48]. Before employing the developed numerical scheme for the simulations of our model problem (12.4), we have studied the convergence (both with respect to space and time coordinates) and stability of the scheme by considering several examples with known exact solutions.

Lattice Boltzmann Method (LBM) is based on microscopic models and mesoscopic kinetic equations. Indeed, traditional numerical methods as finite difference method or finite element method directly solve governing equations for deriving macroscopic variable, whereas LBM is based on the particle (the discrete) distribution function and numerical solving the continuous Boltzmann transport equation. Then the macroscopic variables of the bidomain system can be recovered from the discrete equations through the multi-scaling Chapman-Enskog expansion procedure. LBM was originated from Boltzmann's kinetic theory of gases (70s), and attracts more and more attentions for simulating complex fluid flows since 90s. More recently, LBM has been extended successfully to simulate different types of parabolic reaction-diffusion equations in relation with biological models as Keller-Segel chemotaxis model [135] and monodomain and bidomain models in cardiac electrophysiology [35, 46, 48], and the references therein.

4.1 FitzHugh-Nagumo ionic model

The first ionic model we choose is the FitzHugh-Nagumo phenomenological model (see [65]). This model can be defined with the operators \mathcal{I}_{ion} and H_{ion} as:

$$\mathcal{I}_{ion} = -0.0004 \frac{\rho - \rho_{min}}{\rho_{max} - \rho_{min}} \left(U(\rho_{max} - \rho_{min})^2 + \frac{(\rho - \rho_{gate})(\rho - \rho_{max})}{(\rho_{max} - \rho_{min})^2} \right), \quad (12.56)$$

and

$$H_{ion} = 0.63 \frac{\rho - \rho_{min}}{\rho_{max} - \rho_{min}} - 0.013U(\rho_{max} - \rho_{min})^2. \quad (12.57)$$

In a first time, we want to validate our result with a simple simulation with the two time-delay operators Ψ_ρ and Ψ_U ($\alpha_\rho = 1$, $\alpha_U = 1$), and $r = 1$. Before analyzing our results with 2D representations along the time, Figures 12.2 show how the external stimulus evolves in the domain Ω at $t = 0.33$. We can see that ρ has reached its maximum value in the left-bottom side of Ω while the right-top side of Ω is still in resting state. The observations are the same for external potential ρ . In contrast, for ionic variable U , this external potential leads U to decrease.

In a second time, we analyze the impact of each time-delay operator Ψ_ρ and Ψ_U . First we choose $\alpha_\rho = 1$ and $\alpha_U = 0$ to observe the system behaviour with a time-delay operator Ψ_ρ . As we can see on Figures 12.3-12.5, we have always the same kind of behaviour from $r = 0$ (no time-delay) to $r = 2$. However, ρ begins to growth from the very beginning and it reaches a bigger maximum with a bigger value of r . In the same way, it decreases to a bigger minimum with a bigger value of r . In contrast, U decreases from -0.15 to -0.25 when r goes from 0 to 2. Then we simulate with $\alpha_\rho = 0$ and $\alpha_U = 1$. We can see on Figures 12.6-12.8 that ρ has the same kind of behaviour with operator Ψ_U but the maximum is always ρ_{max} and the final state is closer to ρ_{min} than with operator Ψ_ρ . The behaviour of ionic variable U changes with this setting, and instead of decreasing to -0.15 , U reaches a minimum point and then increases slowly. This minimum point and the associate time depend of the parameter r . Bigger is r and bigger is the minimum point. This minimum is also reached earlier when r is bigger. Finally, we can see on Figures 12.3-12.8 that the effect of the both time-delay operators is negligible for the variable ρ_e .

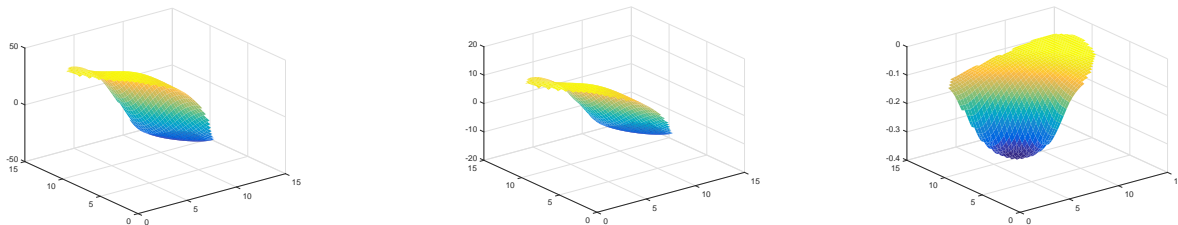


Figure 12.2: 3D representation of (ρ, ρ_e, U) at $t = 0.33s$ with $r = 1$, $\alpha_\rho = 1$, $\alpha_U = 1$.

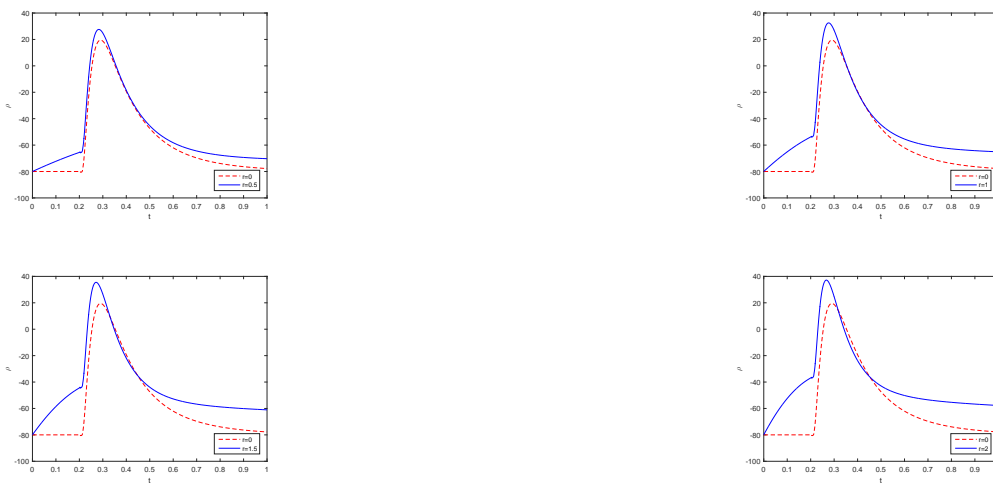


Figure 12.3: Time evolution of ρ at midpoint of Ω for Ψ_ρ with $\xi_1 = 0.008s$, $\xi_2 = 0.024s$.

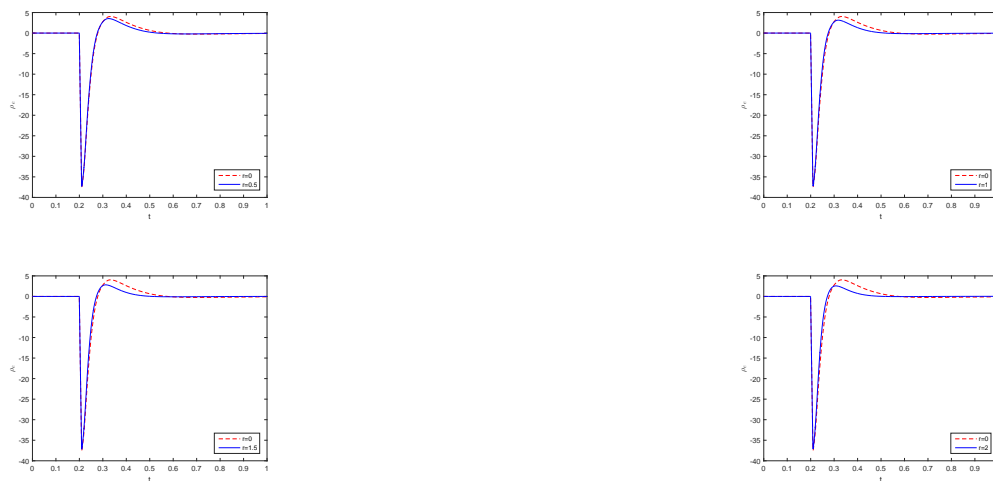


Figure 12.4: Time evolution of ρ_e at midpoint of Ω for Ψ_ρ with $\xi_1 = 0.008s$, $\xi_2 = 0.024s$.

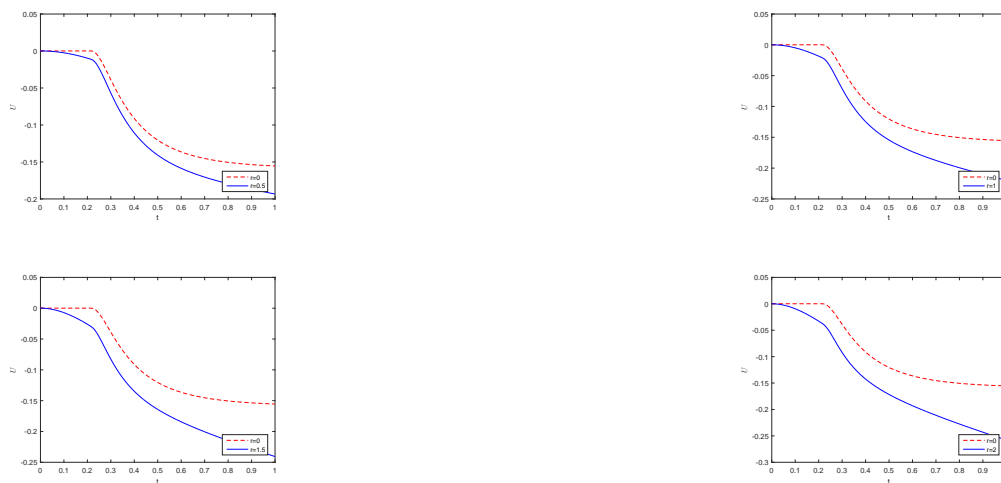


Figure 12.5: Time evolution of U at midpoint of Ω for Ψ_ρ with $\xi_1 = 0.008s$, $\xi_2 = 0.024s$.



Figure 12.6: Time evolution of ρ at midpoint of Ω for Ψ_U with $\xi_3 = 0.016s$, $\xi_4 = 0.032s$.



Figure 12.7: Time evolution of ρ_e at midpoint of Ω for Ψ_U with $\xi_3 = 0.016s$, $\xi_4 = 0.032s$.



Figure 12.8: Time evolution of U at midpoint of Ω for Ψ_U with $\xi_3 = 0.016s$, $\xi_4 = 0.032s$.

4.2 Mitchell-Schaeffer ionic model

The second ionic model corresponds to Mitchell-Schaeffer biophysical ionic model (see [104]). This two-variable model can be defined with the operators \mathcal{I}_{ion} and H_{ion} as:

$$\mathcal{I}_{ion} = -\frac{U}{\mathcal{T}_{in}} \frac{(\rho - \rho_{min})^2(\rho_{max} - \rho)}{\rho_{max} - \rho_{min}} + \frac{1}{\mathcal{T}_{out}} \frac{\rho - \rho_{min}}{\rho_{max} - \rho_{min}}, \quad (12.58)$$

and

$$H_{ion} = \begin{cases} \frac{U}{\mathcal{T}_{open}} + \frac{1}{\mathcal{T}_{open}(\rho_{max} - \rho_{min})^2} & \text{if } \rho < \rho_{gate}, \\ \frac{U}{\mathcal{T}_{close}} & \text{if } \rho \geq \rho_{gate} \end{cases} \quad (12.59)$$

With the Mitchell-Shaefter model, as Figures 12.2 show, at $t = 0.33s$ and with $r = 1$, $\alpha_\rho = 1$,

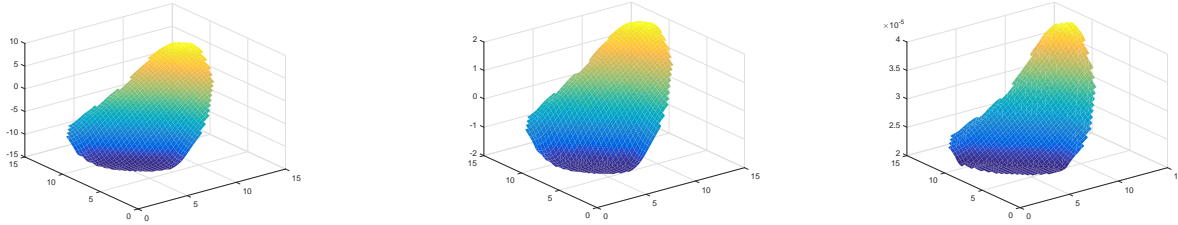


Figure 12.9: 3D representation of (ρ, ρ_e, U) at $t = 0.33s$ with $r = 1$, $\alpha_\rho = 1$, $\alpha_U = 1$.

and $\alpha_U = 1$, the wave is already passed and the potential ρ and the external potential ρ_e begin to decrease. For the ionic variable U , we can see that the wave propagation is finished in the left-bottom side of Ω while it is still decreasing strongly in the other parts of the domain.

As we have done with FitzHugh-Nagumo model, we want to analyse the impact of the both time-delay operators. We choose $\alpha_\rho = 1$ and $\alpha_U = 0$ to observe the system behaviour with a time-delay operator Ψ_ρ . As Figures 12.10-12.12 show for $r = 0.5$ there is no significant difference than with $r = 0$. In every case, the variable ρ reaches a maximum ρ_{max} and it decreases to its minimum ρ_{min} . But for $r = 1$ to $r = 2$, we can see an auto-excited behaviour, where action potentials occur more and more often when r increases. We observe the same kind of behaviour for the variable U than for ρ , with the repetition of a pattern more and more often when r increases. However, its global behaviour is not the same than with the FitzHugh-Nagumo model. Indeed, when U reaches 0, it increases back to its initial value. Finally, the time-delay operator Ψ_ρ almost cancels the external potential ρ_e for $r = 1$ to $r = 2$. Then we simulate with $\alpha_\rho = 0$ and $\alpha_U = 1$. We can see on Figures 12.13-12.15 that we don't observe anymore auto-excitation behaviour with time-delay operator Ψ_U . This time-delay operator leads ρ to decrease faster after it reaches its maximum ρ_{max} , and makes U increase to a value under its initial state after it reaches its minimum. However, Ψ_U has negligible impact on variable ρ_e .





Figure 12.10: Time evolution of ρ at midpoint of Ω for Ψ_ρ with $\xi_1 = 0.008s$, $\xi_2 = 0.024s$.

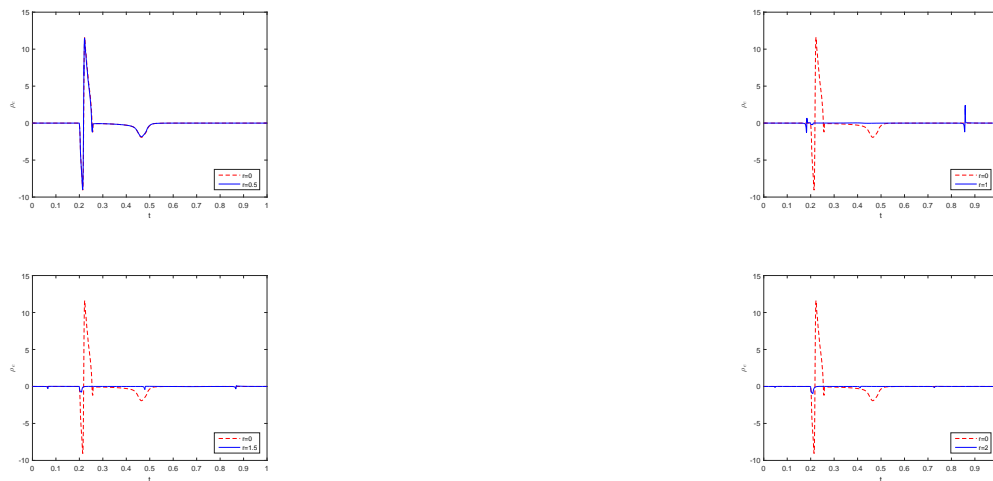


Figure 12.11: Time evolution of ρ_e at midpoint of Ω for Ψ_ρ with $\xi_1 = 0.008s$, $\xi_2 = 0.024s$.

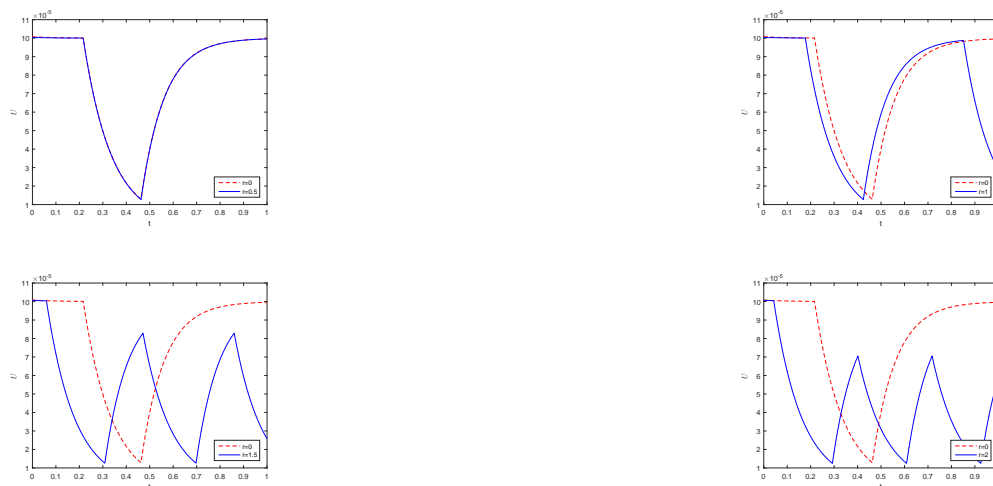


Figure 12.12: Time evolution of U at midpoint of Ω for Ψ_ρ with $\xi_1 = 0.008s$, $\xi_2 = 0.024s$.





Figure 12.13: Time evolution of ρ at midpoint of Ω for Ψ_U with $\xi_3 = 0.016s$, $\xi_4 = 0.032s$.



Figure 12.14: Time evolution of ρ_e at midpoint of Ω for Ψ_U with $\xi_3 = 0.016s$, $\xi_4 = 0.032s$.

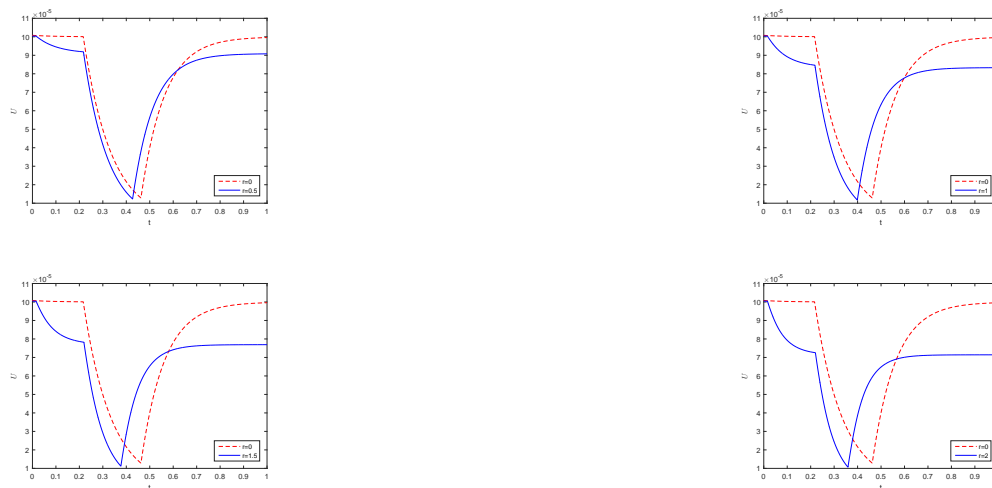


Figure 12.15: Time evolution of U at midpoint of Ω for Ψ_U with $\xi_3 = 0.016s$, $\xi_4 = 0.032s$.

5 Conclusion and commentary

In this work, we have presented theoretical and numerical simulations of a new bidomain model of cardiac tissue with multiple time-delays. The existence of a weak solution as well as regularity and stability results are established under assumptions on nonlinear terms. Therefore, we are able to conclude that the developed model is well posed with the biomedical assumptions. Indeed, with classical FHN ionic model, we have obtained expected auto-excitable electrical behavior with the

introduction of time-delay operators. This behavior is generally obtained in more realistic ionic models (as modified Mitchell-Shaeffer ionic model). The numerical simulations have been carried out by choosing a realistic set of data in order to reproduce electrical and ionic behaviors we can find in literature.

It would be interesting to use this developed method with observations coming from experimental data and a more complete description of the biophysical model of electrical cardiac activity.

In order to get even closer to a more realistic calculation, our objective is currently to study control problems where the control function is the applied stimuli by using techniques developed by A. Belmiloudi in [17, 14, 11]. The resolution of this type of problem makes it possible in practice to improve the stimuli applied during e.g., defibrillation sessions. This stimulus must be adjusted according to the patient's metabolism and type of cardiac problem (cardiac arrest rhythms, bradycardia, tachycardia, etc.).

13 Mathematical modeling and lattice Boltzmann simulation method for Bidomain type models in cardiac electrophysiology with multiple time-delays

Ce travail a fait l'objet d'une publication dans " *Mathematical Modelling of Natural Phenomena Special Issue: mathematical modelling in cardiology*," en 2018 (cf [47])

Abstrac: In this work, we propose a mathematical model of the cardiac electrophysiology which take into account time delays in signal transmission, in order to capture the whole activities of macro- to micro-scale transport processes, and use this model to analyze the propagation of electrophysiological waves in the heart by using a developed coupling Lattice Boltzmann Method (LBM). The propagation of electrical activity in the heart is mathematically modeled by a modified bidomain system. As transmembrane potential evolves, the domain has anisotropical properties which are transposed into intracellular and extracellular conductivity. The new bidomain system is a multi-scale, stiff and strongly nonlinear coupled reaction-diffusion model in the shape of a set of ordinary differential equations coupled with a set of partial differential equations with multiple time delays. Due to delays, dynamic and geometry complexity, numerical simulation and implementation of this type of coupled systems are very ambitious mathematical and computational problems but are crucial in several biomedical applications. We introduce a modified LBM scheme, reliable, efficient, stable and easy to implement in the context of such bidomain systems with multiple time delays. Numerical tests to confirm effectiveness and accuracy of our approach are provided and, the influence and impact of delays to restore normal heart rhythm are analyzed.

Keywords: Lattice Boltzmann Method, Bidomain type system, multiple time-delays, cardiac electrophysiology, Ionic models, Coupled System.

1 Introduction

Computational cardiac electrophysiological modeling is now an important field in applied mathematics. Indeed, nowadays, heart and cardiovascular diseases are still the leading cause of death and disability all over the world. That is why we need to improve our knowledge about heart behavior, and more particularly about its electrical behavior. Consequently we want strong methods to compute electrical fluctuations in the myocardium to prevent cardiac disorders (as arrhythmia),

or to study interactions between brain and heart. We modelize electrical behavior of the heart in the myocardium with the bidomain system, derived from Ohm's law. This biophysical model of electrical cardiac activity links electrophysiological cell models, at small scales, and myocardial tissue mechanics, metabolism and blood flow at large scales. In mathematical viewpoint, bidomain system leads us to compute intracellular and extracellular electrical potentials ρ_i and ρ_e with taking into account the cellular membrane dynamics U . This is a system of non-linear partial differential equations (PDEs) coupled with ordinary differential equations (ODEs). The PDEs describe the propagation of the electrical potentials and ODEs describe the electrochemical processes. Time delays in signal transmission are inevitable and a small delay can affect considerably the resulting electrical activity in heart and thus the cardiac disorders therapeutic treatment. It is then necessary to analyze the the impact of delays on the dynamical behaviors of such a system and their consequences. Delay terms can lead to change of stability of dynamics and give rise to highly complex behavior including oscillations and chaos. Motivated by the above discussions, the bidomain system is changed by incorporating multiple time delays. In recent years, various problems concerning biological rhythmic phenomena and delayed processes have been studied (see e.g., [13, 15, 32, 33, 34, 67, 80, 115, 117, 131] and the references therein). For problems associated with bidomain models without time-delays various methods and technique, as evolution variational inequalities approach, semigroup theory, Faedo-Galerkin method and others, to study the existence-uniqueness of solutions have been derived in the literature (see e.g., [11, 20, 30, 25, 44, 129] and the references therein), and several numerical methods based on methods as finite difference method or finite element method are used to solve these types of models (see e.g., [5, 6, 30, 50, 57, 121, 114] and the references therein). This paper proposes a multiple time-delays system modeling for the cardiac electrophysiology and a modified Lattice Boltzmann Method (LBM) scheme, reliable, efficient, stable and easy to implement in the context of the derived multiple time-delays bidomain system, which is a nonlinear coupled reaction-diffusion model in the shape of a set of delay differential equations (DDE) coupled with a set of delay partial differential equations. The mathematical modeling and well-posednes of more general non linear system with multiple time-varying delays, under some hypotheses for data and some regularity of the nonlinear operators and time-delay operators are developed in [18]. LBM is based on microscopic models and mesoscopic kinetic equations. Indeed, traditional numerical methods as finite difference method or finite element method directly solve governing equations for deriving macroscopic variable, whereas LBM is based on the particle (the discrete) distribution function and numerical solving the continuous Boltzmann transport equation. Then the macroscopic variables of the bidomain system can be recovered from the discrete equations through the multi-scaling Chapman-Enskog expansion procedure. LBM was originated from Boltzmann's kinetic theory of gases (70s), and attracts more and more attentions for simulating complex fluid flows since 90s. More recently, LBM has been extended successfully to simulate different types of parabolic reaction-diffusion equations as Keller-Segel chemotaxis model [135] and monodomain and bidomain models in cardiac electrophysiology [35, 46, 48], or Poisson equation [38]. This paper is organized as follows: in Section 2 we recall briefly the derivation of the multiple time delay bidomain model. In Section 3 we present and describe the modified LBM method for numerical simulations of the derived model, based on previous work [46]. In Section 4, the validity of this method is demonstrated by comparing the numerical solution to the known exact solution of bidomain model with

a classical FitzHugh-Nagumo model (FHN) with time-delay operators, and convergence of solution is established. Some interesting numerical simulations to analyze the influence of some time-delay parameters on the propagation of electrophysiological waves in the heart, including the bidomain model with a modified FHN model, are also carried out in this section. Results show that the mathematical model captures the general behavior of the heart and demonstrate how time-delay operators impact the dynamic of the system, and in particular how they induce auto-excitability behavior. This paper is ended by a conclusion and some further works.

2 Time delay bidomain Model

The time delay bidomain model of cardiac tissue is expressed mathematically by the following steady-state of coupled partial differential equations governing the electrical potentials, (in the physical region Ω occupied by the excitable cardiac tissue, which is an open, bounded, and connected subset of \mathbf{R}^d , $d \leq 3$ and during a time interval $(0, T)$)

$$\operatorname{div}(\mathcal{K}_i \nabla \rho_i) = I_m - \kappa f_{is}, \quad \operatorname{div}(\mathcal{K}_e \nabla \rho_e) = -I_m - \kappa f_{es}, \quad (13.1)$$

where ρ_i and ρ_e are the intracellular and extracellular potentials, respectively; $\mathcal{K}_i(x)$ and $\mathcal{K}_e(x)$ are the conductivity tensors describing the anisotropic intracellular and extracellular conductive media; $f_{is}(x, t)$ and $f_{es}(x, t)$ are the respective externally applied current sources. The transmembrane current density is described by I_m and is given by the following expression

$$I_m = \kappa \left(c_m \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathcal{I}_{ion}(x, t; \rho, U) \right) - \Psi_\rho(\rho_r), \quad (13.2)$$

where ρ is the transmembrane potential, which is defined as $\rho = \rho_i - \rho_e$, κ is the ratio of the membrane surface area to the volume occupied by the tissue, c_m term is the transmembrane capacitance time unit area. The tissue is assumed to be passive, so the capacitance c_m can be assumed to be not a function of the state variables. The operator $\Psi_\rho(\rho_r)$ is related to multiple time-delay functions $\rho_r(t)$ and $U_r(t)$. The nonlinear operator $\mathcal{I}_{ion}(x, t; \rho, U)$ describes the sum of transmembrane ionic currents across the cell membrane with U the electrophysiological ionic state variables (which describe e.g., the dynamics of ion-channel and ion concentrations in different cellular compartments). These variables satisfy the following ODE (with H_{ion} a nonlinear operator and Ψ_U a time-delay operator)

$$\frac{\partial U}{\partial t} = H_{ion}(x, t; \rho, U) - \Psi_U(U_r). \quad (13.3)$$

From (13.1), (13.2) and (13.3), the time delay bidomain model can be formulated in terms of the state variables ρ , ρ_e and U as follows (in $\mathcal{Q} = \Omega \times (0, T)$)

$$\begin{aligned} \kappa \left(c_m \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathcal{I}_{ion}(\cdot; \rho, U) \right) - \operatorname{div}(\mathcal{K}_i \nabla \rho) &= \operatorname{div}(\mathcal{K}_i \nabla \rho_e) + \kappa f_{is} + \Psi_\rho(\rho_r), \\ -\operatorname{div}((\mathcal{K}_e + \mathcal{K}_i) \nabla \rho_e) &= \operatorname{div}(\mathcal{K}_i \nabla \rho) + \kappa (f_{es} + f_{is}), \\ \frac{\partial U}{\partial t} &= H_{ion}(\cdot; \rho, U) + \Psi_U(U_r). \end{aligned} \quad (13.4)$$

The operators \mathcal{I}_{ion} and H_{ion} which describe electrophysiological behavior of the system have usually the following form (affine functions with respect to U)

$$\mathcal{I}_{ion}(\cdot; \rho, U) = I_1(\cdot; \rho) + I_2(\cdot; \rho)U, \quad H(\cdot; \rho, U) = H_0(\cdot; \rho) + \lambda(\cdot)U. \quad (13.5)$$

The operators Ψ_ρ and Ψ_U which describe multiple time-delays related to ρ and U are defined as in [13, 80]

$$\begin{aligned} \Psi_\rho(\rho_r) &= \sum_{k=1}^n a_k(t, \mathbf{x})\rho(t - \xi_{\rho,k}(t)), \\ \Psi_U(U_r) &= \sum_{k=1}^n d_k(t, \mathbf{x})U(t - \xi_{U,k}(t)), \end{aligned} \quad (13.6)$$

where a_k and d_k (for $k = 1, \dots, n$) are C^∞ functions. For the functions $\xi_{\rho,k}$ and $\xi_{U,k}$, for $k = 1, \dots, n$, we suppose that $t \in [0, T] \rightarrow (r_{\cdot,k}(t) = t - \xi_{\cdot,k}(t), k = 1, \dots, n)$ are strictly increasing functions and $(\xi_{\cdot,k}, k = 1, \dots, n)$ are C^1 non-negative functions on $[0, T]$. So we have the existence of the inverse functions $(w_{\cdot,k})_k$ of $(r_{\cdot,k})_k$, respectively. We also define the following subdivision: $s_{-1} = -\delta(0)$, $s_0 = 0$ and $\forall j \in \mathbb{N} - \{0\}$, $s_j = \min_{k=1, \dots, n} (w_{\rho,k}(s_{j-1}), w_{U,k}(s_{j-1}))$, where $\delta(0) = \max_{k=1, \dots, n} (\xi_{\rho,k}(0), \xi_{U,k}(0))$.

The functions a_k and d_k are diffusion coefficients which represent the strength of each associated time-delay. A zero coefficient means that the associated previous state doesn't impact the system. Conversely, more of those coefficients are important, and more of the associated time-delays have impact on the electrical behavior of the heart. In this context, time-delays can not be neglected and come from biological inhomogeneous properties of heart region. Electrical waves go through muscles, bones or fat which induce time-delays in their interaction in regards to ionic channels behavior, hence the necessity of taking into account the history of the electrical potential. Moreover, time delay operators also take into account electrical resonance behaviour or signal transmission delays due to heart disease or peacemaker [4, 42]. With the introduction of those time-delay operators, we expect to obtain an electrical behavior close to what we obtain with using the modified Mitchell-Shaefter ionic model proposed by Djabella and al. [54]. Indeed, this modified model introduces a memorial variable which modelizes time-delay phenomena.

To close the system, we impose the following boundary conditions

$$(\mathcal{K}_i \nabla(\rho + \rho_e)) \cdot \mathbf{n} = \zeta_i, \quad (\mathcal{K}_e \nabla \rho_e) \cdot \mathbf{n} = \zeta_e \quad \text{on } \Sigma = \partial\Omega \times (0, T), \quad (13.7)$$

where \mathbf{n} being the outward normal to $\Gamma = \partial\Omega$ and ζ_i and ζ_e are the intra- and extra-cellular currents per unit area applied across the boundary, and the following initial conditions (in Ω)

$$\rho(\cdot, t = 0) = \rho_0, \quad U(\cdot, t = 0) = U_0. \quad (13.8)$$

and

$$\rho(\cdot, t') = \rho_{past}(\cdot, t'), \quad U(\cdot, t') = U_{past}(\cdot, t'), \quad t' \in [-\delta(0), 0]. \quad (13.9)$$

Such problems have compatibility conditions determining whether there are any solutions to the PDEs. This is easily found by integrating the second equation of (13.4) over the domain and

using the divergence theorem with the boundary conditions (13.7) (a.e. in $(0, T)$). Then (for compatibility reasons), we require the following condition

$$\int_{\Gamma} (\zeta_i + \zeta_e) d\Gamma + \kappa \int_{\Omega} (f_{es} + f_{is}) dx = 0. \quad (13.10)$$

Moreover, the function ρ_e is defined within a class of equivalence, regardless of a time-dependent function. This function can be fixed, for example by setting the Gauge condition (a.e. in $(0, T)$)

$$\int_{\Omega} \rho_e dx = 0. \quad (13.11)$$

Under some hypotheses for the data and parameters of the system and some regularity of operators \mathcal{I}_{ion} , Ψ_{ρ} , Ψ_U and H_{ion} , system (13.4) with (13.7)-(13.9) and under the conditions (13.10)-(13.11) is a well-posed problem (for more details see [11]).

3 Numerical method and algorithm

In this section, a numerical method is presented for the bidomain system (13.4) in two space dimensions. For this, we introduce a coupled modified LBM for solving the coupled system of nonlinear parabolic and elliptic equations (i.e. the first and the second equations of (13.4)). Then we treat the ODE satisfied by ionic state by applying Gronwall Lemma to obtain an integral formulation, and by using a quadrature rule to approximate the obtained integral. In the sequel, without loss of generality, we assume that $c_m = 1$ and $\kappa = 1$. Moreover we assume that $\mathcal{K}_i = K_i I_d$, $\mathcal{K}_e = K_e I_d$, with I_d identity matrix and K_i, K_e constants.

3.1 LBM for coupled parabolic and elliptic equations

In this first part, we develop and describe the modified LBM to solve the following system (which corresponds to two first parts of (13.4))

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} - \operatorname{div}(K_i \nabla(\rho + \rho_e)) &= F(\cdot; \rho, \rho_e) + \Psi_{\rho}(\rho_r), \\ -\operatorname{div}(K_i \nabla \rho + (K_i + K_e) \nabla \rho_e) &= G(\cdot; \rho, \rho_e), \end{aligned} \quad (13.12)$$

where F and G are non linear operators, and Ψ a time-delay operator.

LBE for general reaction-diffusion equations

To begin, we introduce the LBM to solve the following reaction-diffusion equation with the macroscopic variable Φ and a time-delay operator Ψ defined as previous time-delay operators given by equation (13.6):

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{x}, t) - \operatorname{div}(K \nabla \Phi(\mathbf{x}, t)) = H(\mathbf{x}, t; \Phi) + \Psi(\Phi_r), \quad (13.13)$$

where H is a non linear operator, K is a diffusion coefficient and

$$\Psi(\Phi_r) = \sum_{k=1}^n b_k(t, \mathbf{x}) \Phi(t - \xi_k).$$

The evolution equation of the LBM for (13.13) is given by

$$\frac{\partial}{\partial t} h(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) + \mathbf{e} \cdot \nabla h(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) = Q(h(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})) + P(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}), \quad (13.14)$$

where $h(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})$ is the distribution function of particle moving with velocity \mathbf{e} at position \mathbf{x} and time t , P is the distribution type function of particle of macroscopic external force H and time-delay operator Ψ moving with velocity \mathbf{e} , and Q is the Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) collision operator defined by

$$Q(h(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})) = -\frac{1}{\tau} (h(\mathbf{x}, t; \mathbf{e}) - h^{eq}(\mathbf{x}, t; \mathbf{e})), \quad (13.15)$$

where h^{eq} is the equilibrium distribution function and τ is the dimensionless relaxation time. LBM leads us to approximate (13.14) to recover reaction-diffusion equation (13.13) with Chapman-Enskog expansion. For that, we discretize Q in time and space. Then we introduce a lattice size cell Δx and a lattice time step size Δt , and we define streaming lattice speed $c = \Delta x / \Delta t$ and lattice sound speed C_s by $3C_s^2 = c^2$. The time step is chosen in order to guarantee that it exists m_k such that $\xi_k = m_k \Delta t$ as we can write the time-delay operator as:

$$\Psi(\Phi_r) = \sum_{k=1}^n b_k(t, \mathbf{x}) \Phi(t - m_k \Delta t), \quad (13.16)$$

where b_k are the diffusion coefficients associated to each time-delay $\Phi(t - m_k \Delta t)$.

In this paper, we consider the popular two-dimensional $D2Q9$ lattice, which involves 9 velocity vectors. The microscopic velocities \mathbf{e}_i , for $i = 0, 8$ in $D2Q9$ are given as (see Figure 13.1)

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_0 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{e}_i &= c \begin{pmatrix} \cos \left((i-1) \frac{\pi}{2} \right) \\ \sin \left((i-1) \frac{\pi}{2} \right) \end{pmatrix}, \text{ for } i = 1, 2, 3, 4, \\ \mathbf{e}_i &= \sqrt{2}c \begin{pmatrix} \cos \left((i-\frac{9}{2}) \frac{\pi}{2} \right) \\ \sin \left((i-\frac{9}{2}) \frac{\pi}{2} \right) \end{pmatrix}, \text{ for } i = 5, 6, 7, 8. \end{aligned}$$

According to the expression of the microscopic velocities \mathbf{e}_i , we prove easily that

$$\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i = \sum_{i=0}^8 w_i \mathbf{e}_i = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (13.17)$$

and

$$\sum_{i=0}^8 w_i \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i = C_s^2 \mathbf{I}_d, \quad (13.18)$$

where the weight vector $\mathbf{w} = (w_0, \dots, w_8)$ is defined by

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^8 w_i &= 1, \quad w_0 = 4/9, \\ w_1 &= w_2 = w_3 = w_4 = 1/9 \text{ and } w_5 = w_6 = w_7 = w_8 = 1/36. \end{aligned} \tag{13.19}$$

For each particle on the lattice, we associate the discrete distribution functions h_i and h_i^{eq} (in the mesoscopic level), and the discrete operators H_i of H and Ψ_i of Ψ for $i = 0, \dots, 8$. Then, the form of the Lattice Boltzmann Equation (LBE) with an external force by introducing BGK approximations can be written as follows

$$\begin{aligned} h_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) &= h_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} (h_i(\mathbf{x}, t) - h_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) \\ &\quad + \Delta t (H_i(\mathbf{x}, t) + \Psi_i(\mathbf{x}, t)) \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial}{\partial t} (H_i(\mathbf{x}, t) + \Psi_i(\mathbf{x}, t)). \end{aligned} \tag{13.20}$$

The key steps in LBM, which are directly derived from LBE (13.20), are the collision and streaming processes (shown on Figure 13.2). The collision process is local in space and is given for each node \mathbf{x} by

$$\begin{aligned} h_i^{col}(\mathbf{x}, t) &= h_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} (h_i(\mathbf{x}, t) - h_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) \\ &\quad + \Delta t (H_i(\mathbf{x}, t) + \Psi_i(\mathbf{x}, t)) \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial}{\partial t} (H_i(\mathbf{x}, t) + \Psi_i(\mathbf{x}, t)), \end{aligned} \tag{13.21}$$

and the streaming process is given for each velocity \mathbf{e}_i and in a step time Δt by

$$h_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = h_i^{col}(\mathbf{x}, t). \tag{13.22}$$

From Chapman-Enskog expansion analysis, the above LBM can recover to the reaction-diffusion

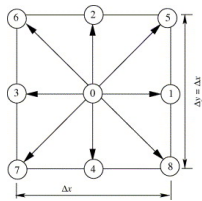


Figure 13.1: Particle velocities for D2Q9 LBM

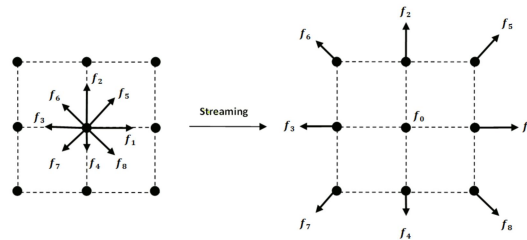


Figure 13.2: Streaming process of a lattice node

equation (13.13) if we take $h_i^{eq} = w_i \Phi$, $H_i = w_i H$, $\Psi_i = w_i \Psi$ and the initial distribution at $t = 0$:

$h_i(\mathbf{x}, 0) = h_i^{eq}(\mathbf{x}, 0)$. This analysis is based on the following properties:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^8 h_i^{eq}(\mathbf{x}, t) &= \sum_{i=0}^8 h_i(\mathbf{x}, t) = \Phi(\mathbf{x}, t) \text{(macroscopic variable)}, \\
\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i h_i^{eq}(\mathbf{x}, t) &= 0, \quad \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i h_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = C_s^2 \Phi(\mathbf{x}, t) \mathbf{I}_d, \\
\sum_{i=0}^8 H_i(\mathbf{x}, t) &= H(\mathbf{x}, t; \Phi), \quad \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i H_i(\mathbf{x}, t) = 0, \\
\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i H_i(\mathbf{x}, t) &= C_s^2 H(\mathbf{x}, t) \mathbf{I}_d, \quad \sum_{i=0}^8 \Psi_i(\mathbf{x}, t) = \Psi(\Phi_r), \\
\sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i \Psi_i(\mathbf{x}, t) &= 0, \quad \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \Psi_i(\mathbf{x}, t) = C_s^2 \Psi(\Phi_r) \mathbf{I}_d
\end{aligned} \tag{13.23}$$

Remarque 13.1 .

During streaming and collision processes, in order to satisfy boundary conditions, the boundary nodes need special treatments on distribution functions, which are essential to stability and accuracy of the method.

Coupled modified LBM

To introduce our modified LBM, we have to take into account the coupled terms which link reaction-diffusion equation and elliptic equation in the system (13.12). As in [48], in order to take into account this coupling, we introduce two correction terms S_i^1 and S_i^2 determined by Chapman-Enskog expansions. Then, we can solve the reaction-diffusion equation with a first LBE where the distribution function f leads to recover ρ . We construct exactly the same LBM than developed in section 3.1. So we choose $f_i^{eq} = w_i \rho$, $F_i = w_i F$, $\Psi_{i,\rho} = w_i \Psi_\rho$ and $\tau = -\frac{3K_i}{c^2 \Delta t} + \frac{1}{2}$ to satisfy previous properties (13.23). Finally, we add the corrector term S_i as follows

$$\begin{aligned}
f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) &= f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) \\
&\quad + \Delta t (F_i(\mathbf{x}, t) + \Psi_{i,\rho}(\mathbf{x}, t)) + \Delta t S_i(\mathbf{x}, t) \\
&\quad + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial}{\partial t} (F_i(\mathbf{x}, t) + \Psi_{i,\rho}(\mathbf{x}, t)).
\end{aligned} \tag{13.24}$$

Hence, the macroscopic variable ρ , defined as : $\sum_{i=0}^8 f_i(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t)$.

For the elliptic equation, for a fixed time t , the discrete pseudo-time-stepping LBM equations can be given as for previous LBE (13.24), by adding a corrector term S_i^e (at node \mathbf{x} and pseudo time

variables r as $\lim_{r \rightarrow \infty} \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t) = \rho_e(\mathbf{x}, t)$

$$\begin{aligned} g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta r, r + \Delta r; t) &= g_i(\mathbf{x}, r; t) - \frac{1}{\tau_e} (g_i(\mathbf{x}, r; t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, r; t)) \\ &\quad + \Delta r S_i^2(\mathbf{x}, r; t, \nabla \rho, \nabla \tilde{\rho}_e) \\ &\quad + \Delta r G_i(\mathbf{x}, r; t) + \frac{\Delta r^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla \right) G_i(\mathbf{x}, r; t), \end{aligned} \quad (13.25)$$

where the equilibrium distribution function g_i^{eq} is defined as

$$g_i^{eq}(\mathbf{x}, r) = \begin{cases} w_i \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t) & \text{for } i \neq 0, \\ (w_0 - 1) \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t) & \text{for } i = 0 \end{cases}$$

and then satisfy $\sum_{i=0}^8 g_i^{eq}(\mathbf{x}, r) = 0$ and $\frac{1}{1-w_0} \sum_{i=1}^8 g_i^{eq}(\mathbf{x}, r) = \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t)$.

Hence, the macroscopic variable $\tilde{\rho}_e$, defined as: $\frac{1}{1-w_0} \sum_{i=0}^8 g_i(\mathbf{x}, r; t) = \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t)$.

According to all those definitions, we can define the two correction terms as (see [48])

$$\begin{aligned} S_i(\mathbf{x}, t; \nabla \rho, \nabla \rho_e) &= w_i (\beta_\rho \mathbf{e}_i \cdot \nabla \rho_e(\mathbf{x}, t) + \alpha_\rho \mathbf{e}_i \cdot \nabla \rho(\mathbf{x}, t)), \\ S_i^e(\mathbf{x}, r; t, \nabla \rho, \nabla \tilde{\rho}_e) &= w_i (\beta_{\rho_e} \mathbf{e}_i \cdot \nabla \rho(\mathbf{x}, t) + \alpha_{\rho_e} \mathbf{e}_i \cdot \nabla \tilde{\rho}_e(\mathbf{x}, r; t)), \end{aligned}$$

where $\alpha_\rho, \alpha_{\rho_e}, \beta_\rho, \beta_{\rho_e}$ are given by

$$\begin{aligned} \alpha_\rho &= -\frac{1}{C_s^2} \left(\frac{K_{ic}}{\tau \Delta t} + C_s^2 \left(\frac{1}{2\tau} - 1 \right) \right), \\ \beta_\rho &= -\frac{1}{C_s^2} \frac{K_{ic}}{\tau \Delta t}, \\ \alpha_{\rho_e} &= -\frac{1}{C_s^2} \left(\frac{K_{ic} + K_{ec}}{\tau_e \Delta r} + C_s^2 \left(\frac{1}{2\tau_e} - 1 \right) \right), \\ \beta_{\rho_e} &= -\frac{1}{C_s^2} \frac{K_{ic}}{\tau_e \Delta r}. \end{aligned}$$

3.2 Treatment of ODE

Now, we present briefly the method to solve ODE satisfy by ionic state U , with initial condition $U(\mathbf{x}, 0) = U_0(\mathbf{x})$. According to (13.4) and the form of H_{ion} given in (13.5) by $H_{ion}(\mathbf{x}, t; \rho, U) = H_0(\mathbf{x}, t; \rho) + \lambda U(\mathbf{x}, t)$, with λ assumed to be a constant and the shape of $\Psi_U(U_r)$ is given by equation (13.6). By using Gronwall Lemma we can deduce:

$$U(\mathbf{x}, t + \Delta t) = U(\mathbf{x}, t) e^{-\lambda \Delta t} + e^{-\lambda t} \int_t^{t+\Delta t} (H_0(\mathbf{x}, s; \rho(s)) + \Psi_U(U_r(s))) e^{\lambda s} ds. \quad (13.26)$$

Then, according to approximation of derived integral by trapezoidal method between t and $t + \Delta t$ with using time-delay operators time discretization defined by equations (13.16) for chosen Δt , we obtain the following approximation of U denoted also by U

$$\begin{aligned} U(., t + \Delta t) = & U(., t)e^{-\lambda\Delta t} + \frac{\Delta t}{2} \left(\sum_{k=1}^n d_k(t, \mathbf{x})U(t - m_k\Delta t) \right) \\ & + \frac{\Delta t}{2} e^{\lambda\Delta t} \sum_{k=1}^n d_k(t + \Delta t, \mathbf{x})U(t - (m_k - 1)\Delta t) \\ & + \frac{\Delta t}{2} (H_0(., t + \Delta t; \rho(t + \Delta t))e^{\lambda\Delta t} + H_0(., t; \rho(t))). \end{aligned} \quad (13.27)$$

3.3 Numerical Algorithm

In order to solve the problem, we introduce the following notation: $T_j = [s_{j-1}, s_j]$ for $j \geq 0$ and $\mathcal{Q}_j = \Omega \times T_j$ for $j \geq 1$. Then, for each \mathcal{Q}_j , we define sub-problem \mathcal{P}_j , which is a bidomain system without delays, define as:

$$\begin{aligned} & \kappa \left(c_m \frac{\partial \rho^{(j)}}{\partial t} + \mathcal{I}_{ion}(\cdot; \rho^{(j)}, U^{(j)}) \right) - \text{div}(\mathcal{K}_i \nabla(\rho^{(j)} + \rho_e^{(j)})) = \kappa f_{is} + \Psi_\rho(\rho_r^{(j)}), \\ & -\text{div}((\mathcal{K}_e + \mathcal{K}_i) \nabla \rho_e^{(j)}) - \text{div}(\mathcal{K}_i \nabla \rho^{(j)}) = \kappa(f_{es} + f_{is}), \\ & \frac{\partial U^{(j)}}{\partial t} = H_{ion}(\cdot; \rho^{(j)}, U^{(j)}) + \Psi_U(U_r^{(j)}), \end{aligned} \quad (13.28)$$

with the initial conditions

$$\begin{aligned} \rho^{(j)}(\cdot, s_{j-1}) &= \rho^{(j-1)}(\cdot, s_{j-1}), \\ U^{(j)}(\cdot, s_{j-1}) &= U^{(j-1)}(\cdot, s_{j-1}), \end{aligned}$$

with $\Psi_{\rho^{(j)}}$ and $\Psi_{U^{(j)}}$ are defined by

$$\begin{aligned} \Psi_\rho(\rho_r^{(j)}) &= \sum_{k=1}^n a_k(\mathbf{x}, t) \rho^{(j)}(t - m_k \Delta t), \\ \Psi_U(U_r^{(j)}) &= \sum_{k=1}^n d_k(\mathbf{x}, t) U^{(j)}(t - m_k \Delta t), \end{aligned}$$

To solve the whole bidomain system with time-delay on $\Omega \times [0, T]$, we make the non-dimensionalization, the mesh definition and the initialization of initial conditions, parameters and data, and we use the proposed algorithm to solve the bidomain system on every \mathcal{Q}_j . It consists of solving each subproblem \mathcal{P}_j defined by equations (13.28) with regards to boundary conditions (13.7), (13.10), (13.11) on every \mathcal{Q}_j , for $j \geq 1$. The algorithm can be summarized as follows.

1. Initialization: $t = s_{j-1}$.
2. LBE according to time t by using (13.24) to compute $\rho^{(j)}(\mathbf{x}, t + \Delta t)$.
3. Trapezoidal method by using (13.27) to compute $U^{(j)}(\mathbf{x}, t + \Delta t)$.

4. Loop on new time variable r :

- (a) LBE according to time r by using (13.25) to compute $\tilde{\rho}_e^{(j)}(\mathbf{x}, r + \Delta r; t + \Delta t)$ an approximation of $\rho_e^{(j)}(\mathbf{x}, t + \Delta t)$.
- (b) If we don't reach the stopping criteria chosen to be:

$$|g_i^{(j)}(\mathbf{x}, r + \Delta r; t) - g_i^{(j)}(\mathbf{x}, r; t)| < C_{\rho_e} \Delta \mathbf{x}^{N_e},$$

where C_{ρ_e} is a chosen constant and N_e the order of accuracy we want, set $r = r + \Delta r$ and go back to 4.(a).

5. Set $\rho_e^{(j)}(\mathbf{x}, t + \Delta t) := \tilde{\rho}_e^{(j)}(\mathbf{x}, r; t + \Delta t)$.

6. If $t \neq s_j$, set $t := t + \Delta t$ and go back to 2..

Then, because of regularity of solutions $(\rho^{(j)}, \rho_e^{(j)}, U^{(j)})$ (see [18]), the solution of bidomain system with time-delay on \mathcal{Q} is given by $(\rho, \rho_e, U) = \sum_{j \geq 1} (\rho^{(j)}, \rho_e^{(j)}, U^{(j)}) \mathbf{1}_{\mathcal{Q}_j}$. Finally, we have solved the whole bidomain system with time-delay on \mathcal{Q} .

4 Numerical simulation and applications

To validate the capacity of our modified coupled LBM to deal with 2D bidomain systems, several situations are numerically simulated. In the first study, we consider the bidomain system with homogeneous Neumann boundary conditions and we choose the phenomenological two-variable model proposed by Mitchell and Schaeffer. The functions H_{ion} and \mathcal{I}_{ion} are given by:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{ion} &= -\frac{U}{\mathcal{T}_{in}} \frac{(\rho - \rho_{min})^2 (\rho_{max} - \rho)}{\rho_{max} - \rho_{min}} \\ &+ \frac{1}{\mathcal{T}_{out}} \frac{\rho - \rho_{min}}{\rho_{max} - \rho_{min}}, \end{aligned} \quad (13.29)$$

and

$$H_{ion} = \begin{cases} \frac{U}{\mathcal{T}_{open}} - \frac{1}{\mathcal{T}_{open}(\rho_{max} - \rho_{min})^2} & \text{if } \rho < \rho_{gate}, \\ \frac{U}{\mathcal{T}_{close}} & \text{if } \rho \geq \rho_{gate} \end{cases} \quad (13.30)$$

Then, the ionic variable U depends on the change-over voltage ρ_{gate} and on the time constants for opening, \mathcal{T}_{open} , and closing, \mathcal{T}_{close} . The time constants \mathcal{T}_{in} and \mathcal{T}_{out} are respectively related to the length of the depolarization and repolarization phases. These constants are such that $\mathcal{T}_{in} < \mathcal{T}_{out} < \min(\mathcal{T}_{open}, \mathcal{T}_{close})$.

Nota Bene: If the exact nonzero solution ϕ_{sol} is known, we can measure the efficiency of method with the following L^2 relative error on \mathcal{Q} :

$$Err_\phi = \frac{\|\phi_{sol} - \phi\|_{L^2(\mathcal{Q})}}{\|\phi_{sol}\|_{L^2(\mathcal{Q})}}.$$

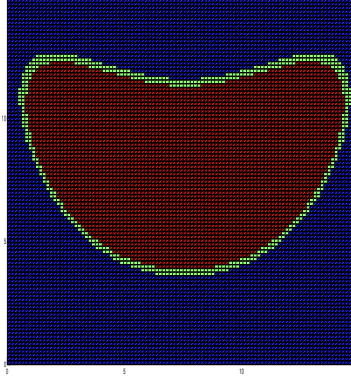


Figure 13.3: Representation of Ω with domain on red, border on green and outside on blue.

By the same way, we estimate perturbations due to time-delay on \mathcal{Q}_j with:

$$P_\phi = \frac{\|\phi_{wtd} - \phi\|_{L^2(\mathcal{Q})}}{\|\phi_{wtd}\|_{L^2(\mathcal{Q})}},$$

where ϕ_{wtd} is the function ϕ computed without any time-delay, and ϕ the solution of the equation with time-delay.

Then, we choose delay operators defined by equation (13.6) to be :

$$\begin{aligned} \Psi_\rho(\rho_r) &= a_1\rho(t - \xi_1(t)) + a_2\rho(t - \xi_2(t)), \\ \Psi_U(U_r) &= d_1U(t - \xi_3(t)) + d_2U(t - \xi_4(t)), \end{aligned} \quad (13.31)$$

with a_1 , a_2 , d_1 and d_2 , choosen constants and ξ_1 , ξ_2 , ξ_3 and ξ_4 known functions. Those two time-delay operators are treated as source terms.

4.1 Benchmark problem and validation

In this first analysis, we investigate the accuracy and spatial convergence rate of the proposed modified LBM for which we postulate that error estimates of the method are of order 2 in space and of order 1 in time (for sufficiently regular solution). We assume $\mathbf{x} \in \Omega$ if $\mathbf{x} = (x, y)$ satisfies:

$$|x - A|^B + (y - C - |x - A|^2)^2 - \frac{1}{15} < 0, \quad (13.32)$$

with $A = 0.5$, $B = 3.5$, $C = 0.5$ (Figure 13.3). We obtain an approximation of a 2D heart section with rounded boundary which is assumed realistic enough to capture auto-excitation behaviour in this first study. We choose $T = 1$, and we take $K_{ic} = 1$, $K_{ec} = 1$, $\zeta_i = 0$, $\zeta_e = 0$, $\rho(\mathbf{x}, t = 0) = 0$ and $U(\mathbf{x}, t = 0) = 0$ (with $\mathbf{x} = (x, y)$). We introduce Ψ_ρ and Ψ_U given by equations (13.35) as time-delay operators of bidomain system (13.4) to close the problem according to solution and compatibility conditions. Moreover the source terms F_ρ and F_{ρ_e} are added to parabolic-elliptic

system (13.4), to ensure that the function (ρ, ρ_e, U) given by

$$\begin{aligned} \rho^{sol}(x, y, t) &= t(x^2(x-1)^3 + y^2(y-1)^3), \quad U^{sol}(x, y, t) = te^{\frac{xy}{225}}, \\ \rho_e^{sol}(x, y, t) &= t \left(\sin \left(\pi \left(\frac{x}{15} + \frac{1}{2} \right) \right) \sin \left(\pi \left(\frac{y}{15} + \frac{1}{2} \right) \right) \right), \end{aligned}$$

is the exact solution of system (13.4) (with appropriate source term).

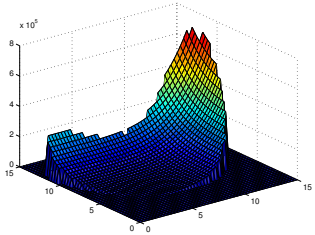


Figure 13.4: ρ in Ω at $t = 1$.

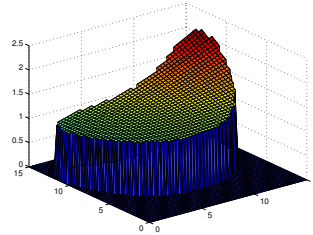


Figure 13.5: U in Ω at $t = 1$

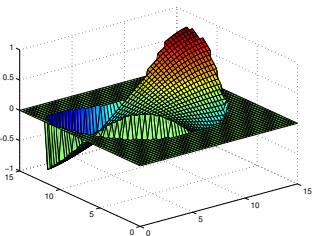


Figure 13.6: ρ_e in Ω at $t = 1$.

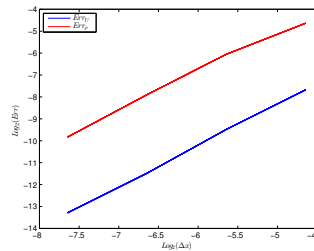


Figure 13.7: Error curves for ρ and U .

In a first time, we validate our model without time-delay. We study the relative error Err_ρ , Err_{ρ_e} and Err_U in Ω between $t = 0$ and $t = 1$ without time-delay in order to estimate the convergence order. Figure 13.4, Figure 13.5 and Figure 13.6 are 3D representation of solution obtained with our method at $t = 1$ with $\Delta x = 1/100$ and $\Delta t = \Delta x^2$. In Table 13.1, we compute the relative error for several discretizations with $\Delta t = \Delta x^2$. We just care about relative error on ρ and U on $\Omega \times [0, T]$. Indeed, the chosen convergence criteria (for the iterative method to approach ρ_e) involves a constant error because this criteria is defined in function of a criteria $C_{\rho_e} \Delta x^2$ with $\Delta t = \Delta x^2$. So, we obtain a constant error regardless of discretization. We present on Figure 13.7 the convergence curves, $\log(Error)$ versus $\log(\Delta x)$, for ρ and U . We observe (in Figure 13.7 and Table 13.2) that the slope of error curves for ρ passes approximately from 1.4 to 1.9 and the slope of error curves for U is approximately equal to 2. This shows that our numerical error estimates are agree with the postulated error estimates, and indicate the good performance of our proposed method.

Remarque 13.2 .

Our numerical simulations show that the lattice Boltzmann method mentioned above is found to be effective and convortextergent (with L_2 -norm error estimate), though there is no theoretical verification for the convergence of solutions. Moreover, we have proved, in the case of model

Δx	Err_ρ	Err_{ρ_e}	Err_U	Between	slope(ρ)	slope(U)
1/25	0.0411	0.0474	0.0047	1/25 – 1/50	1.4171	1.8069
1/50	0.0143	0.0510	0.0017	1/50 –	1.8464	2.0010
1/100	0.0039	0.0487	0.0003	1/100		
1/200	0.0012	0.0507	0.0001	1/100 –	1.9333	1.8081
				1/200		

Table 13.1: Relative error on $\Omega \times [0, 1]$ for ρ , ρ_e and U .

Table 13.2: Slopes of relative error curves.

a	P_ρ	P_U	d	P_ρ	P_U
0.5	0.0837	0.0004	0.5	0.0017	0.1396
1	0.1819	0.0013	1	0.0042	0.3162
1.5	0.2987	0.0017	1.5	0.0050	0.5428
2	0.4421	0.0029	2	0.0067	0.8366

Table 13.3: Perturbation for ρ and U with time-delay on PDE.

Table 13.4: Perturbation for ρ and U with time-delay on EDO.

without delays, that the solution approached by developed lattice Boltzmann method converges to the solution of the bidomain model through the classical Chapman-Enskog procedure [48]. LBM method is explicit time-stepping scheme and does not benefit from a variational structure (unlike finite element method). Therefore, in general, different properties useful to show the convergence results, as maximum principles, may be difficult (if not impossible) to get for LBM (see for example [53, 87] and the references therein).

Then, we want to estimate the perturbations due to time-delay on the dynamic of the system, in particular for functions ρ and U . For that, we choose time-delays functions ξ_1 , ξ_2 , ξ_3 and ξ_4 as:

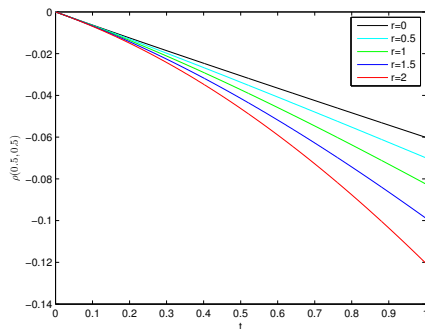
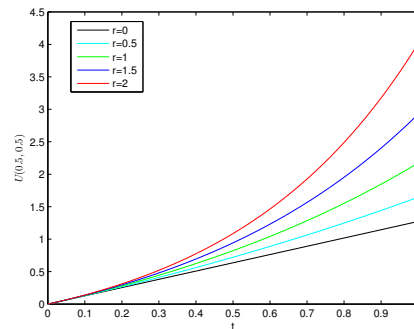
$$\xi_1(t) = \xi_3(t) = 0.008s; \quad \xi_2(t) = \xi_4(t) = 0.016s. \quad (13.33)$$

In Table 13.3 and Table 13.4 with $\Delta x = 1/50$ and $\Delta t = \Delta x^2$, we study the impact of parameters a_1 , a_2 , d_1 and d_2 on the dynamic of the system. In the first case, we set $d_1 = d_2 = 0$ and we make $a_1 = a_2 = a$ vary from 0.5 to 2, and in the second case, we set $a_1 = a_2 = 0$ and we make $d_1 = d_2 = d$ vary from 0.5 to 2. We clearly see how time-delay disturbs the system and lead to a nonlinear degeneration of the system.

However, in this application, we have seen that the introduction of time-delay operator Ψ_ρ on parabolic equation disturbs function ρ and involves a negligible noise on the function U . In contrast, the inclusion of time-delay operator Ψ_U in EDO generates perturbations on function U and a negligible noise on function ρ . Indeed, with a time-delay on parabolic equation, we just have a few noises on variable U , and with a time-delay on EDO we just have a few noises on variable ρ .

Finally, we consider $a_1 = a_2 = d_1 = d_2 = r$ with r vary from 0 to 2 in order to compare the strength of each time-delay. As Table 13.5 shown, the both time-delay operators lead to same order perturbation and P_ρ and P_U coincide to the difference of results obtained in Table 13.3 and Table 13.4. With Figure 13.8 and Figure 13.9, we can see how a step of 0.5 between each value of r induces a perturbation increasingly important across time.

r	P_ρ	P_U
0.5	0.0823	0.1402
1	0.1782	0.3161
1.5	0.2932	0.5417
2	0.4344	0.8346

Table 13.5: Perturbation for ρ and U with both time-delay.Figure 13.8: Evolution of $\rho(0.5, 0.5, t)$ for $r = 0$ to $r = 2$.Figure 13.9: Evolution of $U(0.5, 0.5, t)$ for $r = 0$ to $r = 2$.

4.2 Influence of some parameters on electrical wave propagation

Now we apply our method to a more realistic set of data for $\mathbf{x} \in \Omega$ and $t \in [0, T]$ in order to reproduce electrical and ionic behaviors we can find in literature. For that, we apply an external density current within source term f_{is} in a short time scale ($t \in [0, T_{act}]$) which represents external applied current. This applied current involves an action potential (AP) in excitable cells of heart with diffusion in torso region. This AP is the biological manifestation of electrical cells excitation, which can be studied through evolution of transmembrane potential ρ and an ionic variable U . In order to capture the auto-excitation behavior, with regular successive AP due to the introduction of time-delay operators, we consider a heart without any beat at $t = 0$. Then, we introduce the chosen applied current f_{is} which can come from a pacemaker or any external stimulus. Furthermore, that kind of problem can be used in a control problem in order to study a pacemaker cells model.

So we obtain solutions presented for the middle point in Figure 13.10 which are characterized by the four phases of an AP. We make the link between the electrical and ionic behavior through a phase plane (Figure 13.11) where we can see those four phases:

- **Phase I: Depolarization** (Point A). In a short time scale (order of \mathcal{T}_{in}), transmembrane potential (TMP) changes from its resting state ρ_{min} to its maximum ρ_{max} when cells are depolarized. This sudden change induces opening of ionic channels, so ionic variable U leaves its equilibrium state to falling down.
- **Phase II: Excited phase** (Point B). In a long time scale (order of \mathcal{T}_{open}), TMP ρ begins to fall slowly. During this phase, ionic channels are open and ionic variable U goes to its minimum.

κ	C_m	\mathcal{T}_{in}	\mathcal{T}_{out}	\mathcal{T}_{open}	\mathcal{T}_{close}	ρ_{gate}	ρ_{min}	ρ_{max}	T_{act}
200	10^{-3}	4.5	90	100	130	-67	-80	20	10

Table 13.6: Cell membrane parameters.

- **Phase III: Repolarization** (Point C). In a short time scale (order of \mathcal{T}_{out}), TMP goes back towards resting potential of ρ_{min} to prepare the cells for a new cycle of depolarization. During this phase, ionic channels are gradually inactivated and induces inversion of ionic variable slope.
- **Phase IV: Recovery period** (Point D). In a long time scale (order of \mathcal{T}_{close}), TMP reaches the resting potential ρ_{min} . During this time, ionic variable slowly goes back to its equilibrium state and ionic channels are closed at resting TMP.

To reproduce this behavior, we choose model parameters used in the reference simulation (Table 13.6), and we choose initial data as follows:

$$\rho(x, y, 0) = \rho_{min}, \quad U(x, y, 0) = \frac{1}{(\rho_{max} - \rho_{min})^2}. \quad (13.34)$$

Figure 13.10: Evolution of middle heart node of normalized ρ and U .Figure 13.11: Phase plan of normalized ρ and U .

We want to analyze the impact of each parameter and time-delay function on the both time-delay operators Ψ_ρ and Ψ_U on the dynamic of the system. As we did for benchmark problem, we will introduce one operator after the other with fixing some parameters to zero. Then, we will choose different time-delay functions $\xi_i(t)$, $i = 1, \dots, 4$ and we will treat the both operators at the same time. For all those simulations, we fix $\Delta t = \Delta x^2$.

First, we study the impact of operator Ψ_ρ on the first parabolic equation. In a first time, we choose $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$ and $a_1 = a_2 = a$. Figure 13.12 and Figure 13.13 show the expected auto-excitable behavior of macroscopic variables ρ and U on the midpoint $(x, y) = (7.5, 7.5)$. When we introduce time-delays increasingly important, the delays between two AP are shorter. Indeed, with this time-delay, the potential ρ doesn't stay at its equilibrium state and grows slowly to ρ_{gate} after the repolarization. Because of definition of operator H_{ion} given by equation (13.30), the behavior of ionic variable U changes instead of go back slowly to its equilibrium state. So, the system goes back to depolarization phase and a new AP occurs. Moreover, as Figure 13.14 shows, for each AP, the behavior of ρ in regards to U doesn't change,

a	Err_ρ	Err_U	a	Err_ρ	Err_U
0.5	0.0242	0.0053	0.5	0.0240	0.0053
1	0.0588	0.0144	1	0.0566	0.0119
1.5	0.0949	0.0253	1.5	0.0927	0.0266
2	0.4019	0.2023	2	0.4023	0.2102

Table 13.7: P_U and P_ρ with time-delay operator Ψ_ρ , $\Delta x = 1/50$ (left) and $\Delta x = 1/100$ (right).

$\xi_1(t)$	P_ρ	P_U
0.002	0.0012	0.0043
0.004	0.0028	0.0039
0.008	0.0059	0.0042
0.020	0.0112	0.0036

Table 13.8: P_ρ and P_U with time-delay $\Psi_\rho = \rho(t - \xi_1(t))$ on $\Omega \times [0, T]$ and $\Delta x = 1/50$.

even if depolarization phase could happen before U goes back to its equilibrium state (in particular we can clearly see this phenomena for $a = 1.5$).

Then, we also want to estimate the impact of time-delay functions ξ_1 and ξ_2 . So, we choose to take $a_1 = 1$ and $a_2 = 0$ and to choose different time-delays through ξ_1 . As Table 13.8 shows, taking a further state induces a negligible impact on system dynamic. With Table 13.7, we verify that discretization has also a negligible impact on the electrical and ionic behavior.

Then, we reproduce the same process with operator Ψ_U on the EDO, with $d_1 = d_2 = d$. Figure 13.15 and Figure 13.16 show that equilibrium state of ionic variable U decreases. That induces a shorter excited phase but that doesn't change anymore the behavior of electrical potential ρ . This phenomena is due to the link between U and the time \mathcal{T}_{open} related to excited phase on the definition of operator \mathcal{I}_{ion} given by equation (13.29). Contrary to other time-delay operator Ψ_ρ , the time-delay operator Ψ_U doesn't induce auto-excitable behavior, and the phase plane (Figure 13.17) just highlights a fewer values for ionic variable U in regards to ρ . Table 13.9 traduces this phenomena through a ratio of almost 0.3 between the solution computed without any time-delay and the solution with time-delay on EDO with $d = 2$ due to shorter excited phase. We also see that discretization doesn't change this ratio. Finally, as Table 13.10 shows, further state doesn't have a significant impact on the system dynamic than for Ψ_ρ .

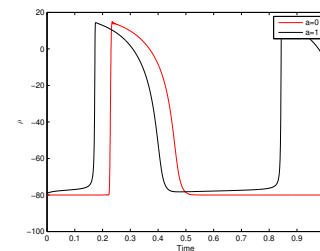
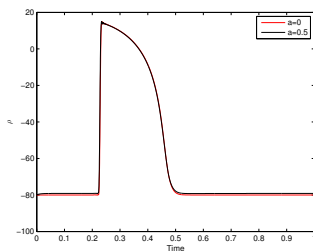




Figure 13.12: Evolution of ρ at midpoint of Ω for $t = 0, \dots, T$ for time-delay Ψ_ρ with $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$.

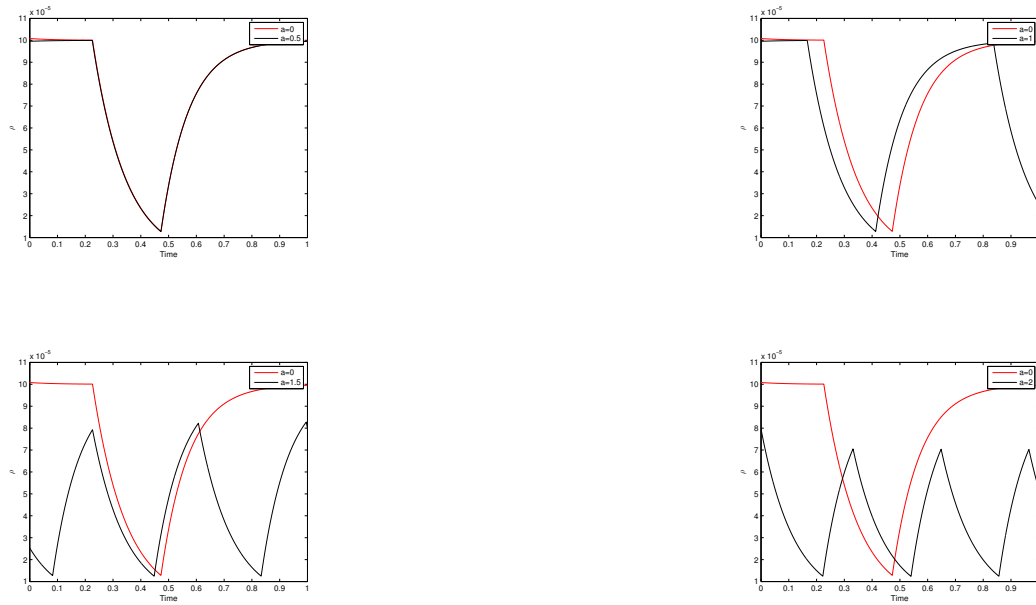


Figure 13.13: Evolution of U at midpoint of Ω for $t = 0, \dots, T$ for time-delay Ψ_ρ with $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$.



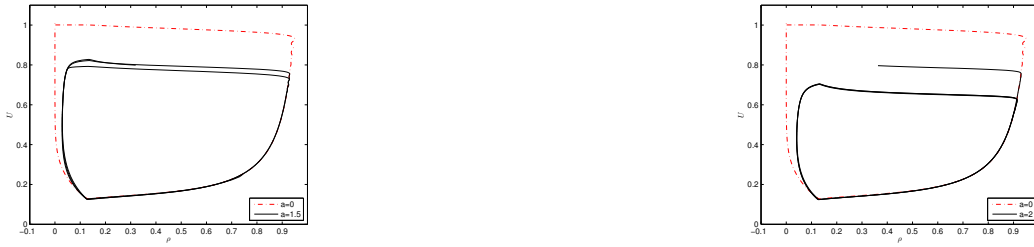


Figure 13.14: Phase plane for time-delay Ψ_ρ with $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$.

d	P_ρ	P_U	d	P_ρ	P_U
0.5	0.0971	0.0502	0.5	0.0981	0.0442
1	0.1804	0.0938	1	0.1769	0.0911
1.5	0.2423	0.1331	1.5	0.2402	0.1366
2	0.2951	0.1688	2	0.2945	0.1791

Table 13.9: P_U and P_ρ with time-delay operator Ψ_U , $\Delta x = 1/50$ (left) and $\Delta x = 1/100$ (right).

$\xi_3(t)$	P_ρ	P_U
0.002	0.0036	0.0011
0.004	0.0029	0.0026
0.008	0.0031	0.0053
0.020	0.0031	0.0096

Table 13.10: P_ρ and P_U with time-delay operator $\Psi_U = U(t - \xi_3(t))$ on $\Omega \times [0, T]$ and $\Delta x = 1/50$.





Figure 13.15: Evolution of ρ at midpoint of Ω for $t = 0, \dots, T$ for time-delay Ψ_U with $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$.

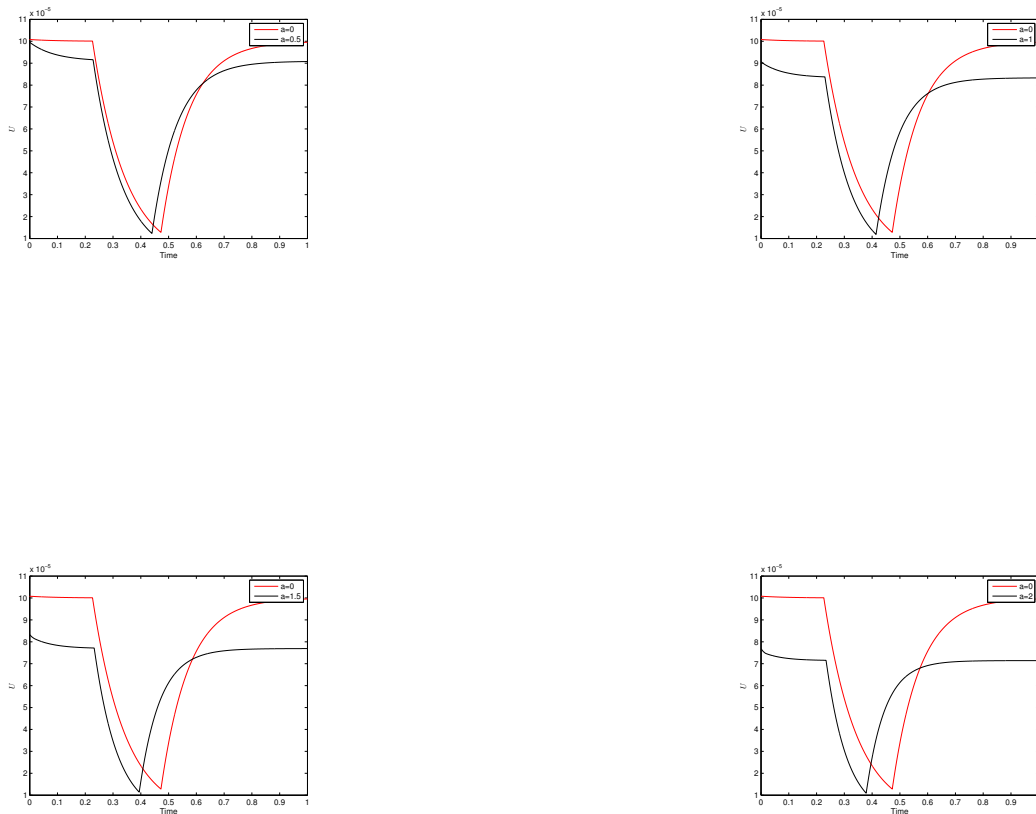
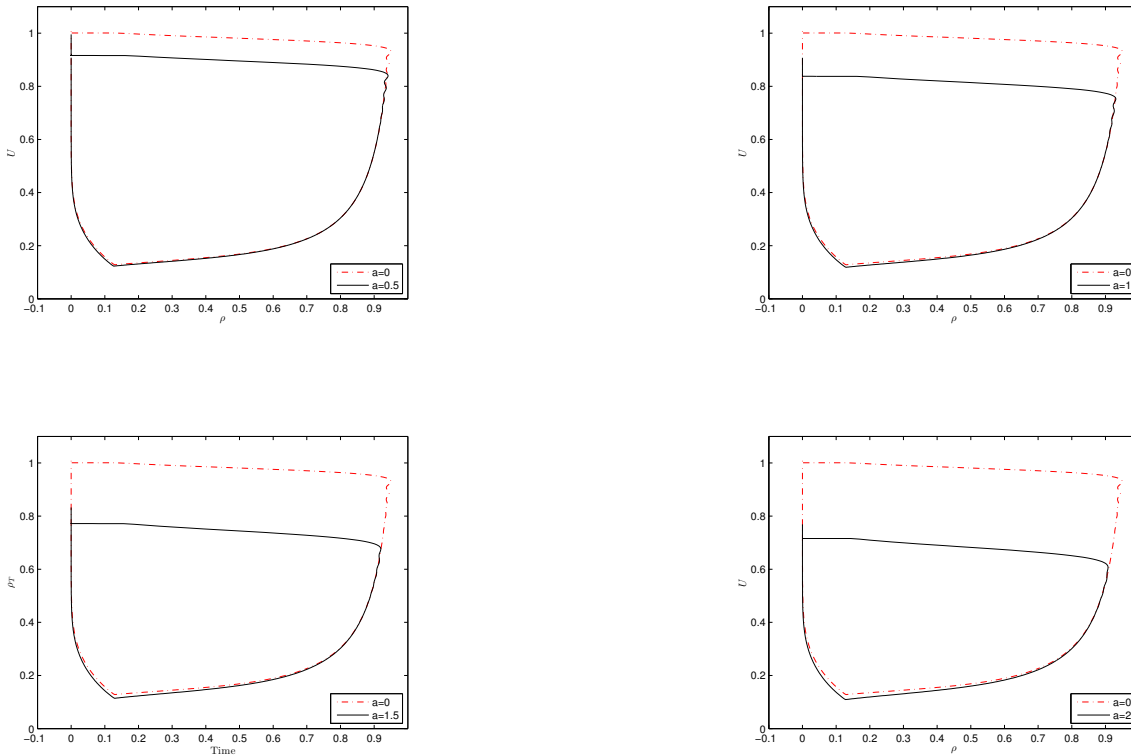


Figure 13.16: Evolution of U at midpoint of Ω for $t = 0, \dots, T$ for time-delay Ψ_U with $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$.

r	P_ρ	P_U	r	P_ρ	P_U
0.5	0.0681	0.0942	0.5	0.0657	0.0922
1	0.1283	0.1701	1	0.1269	0.1666
1.5	0.5733	0.5487	1.5	0.5718	0.5502
2	0.6432	0.6323	2	0.6424	0.6339

Table 13.11: Multiple time-delay on ρ and U with $\Delta x = 1/50$ (left) and $\Delta x = 1/100$ (right).Figure 13.17: Phase plane for time-delay Ψ_U with $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$.

Finally, we consider the both time-delay operators at the same time, with $a_1 = a_2 = d_1 = d_2 = r$ and $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$. Table 13.11 shows that we still have the same order of perturbations than with one of the two operators. We recover the two cumulative behaviors: auto-excitable behavior and shorter excited phase. In order to have global representation of those phenomena for the whole domain, we take 3D representation of (ρ, ρ_e, U) at $t = 0.25$ for $r = 0$, $r = 1$, $r = 1.5$ and $r = 2$. As it is shown in Figure 13.18, 13.19 and Figure 13.20, the bigger the coefficient is, the earlier the second AP comes. We clearly see that the first electrical wave leaves the domain by the top-right area while the second one enters by the bottom-left area.

5 Conclusion and commentary

An efficient and stable coupled LBM to solve the proposed two-dimensional bidomain model of cardiac tissue with multiple time-delays is developed. From the Chapman-Enskog expansion analysis, the bidomain system which is a coupled of reaction-diffusion, elliptic and EDO equations,

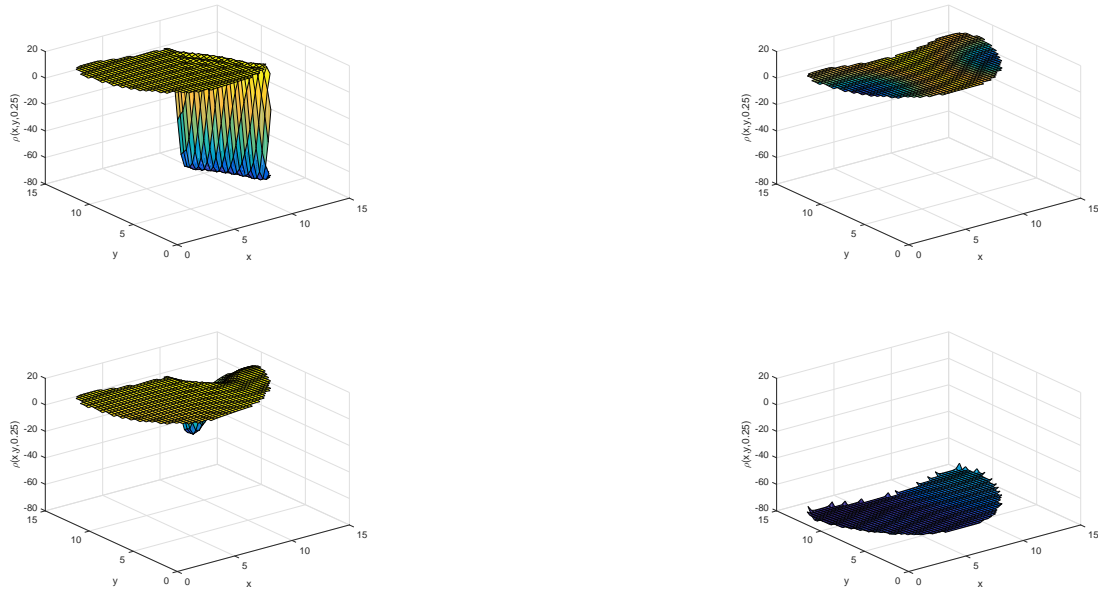


Figure 13.18: 3D representation of ρ at $t = 0.25s$ with both time-delay operators and $r = 0$ (top left), $r = 1$ (top right), $r = 1.5$ (bottom left) and $r = 2$ (bottom right).

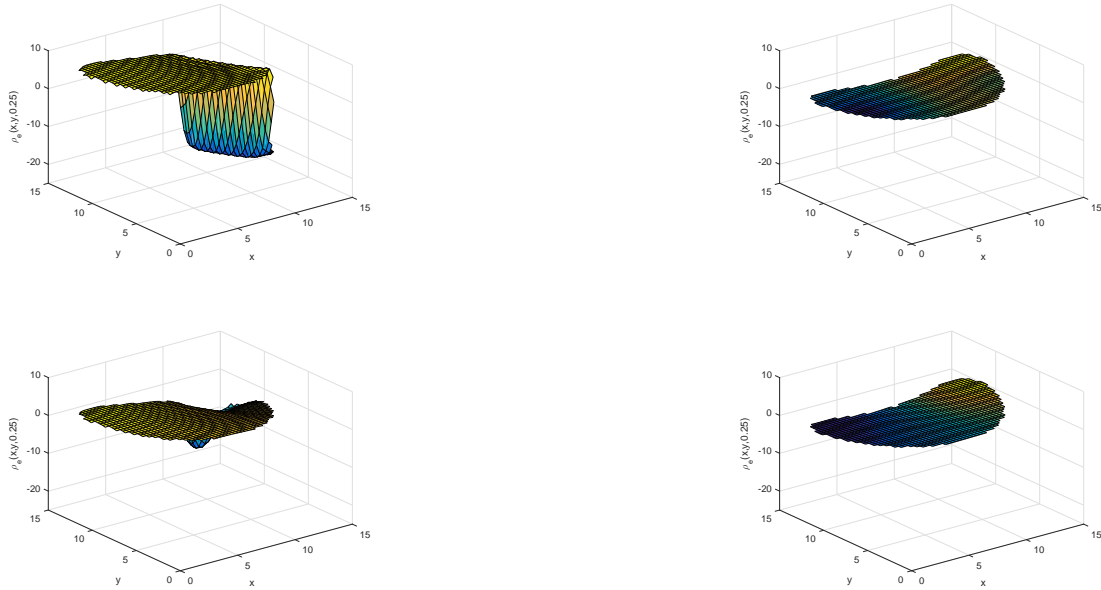


Figure 13.19: 3D representation of ρ_e at $t = 0.25s$ with both time-delay operators and $r = 0$ (top left), $r = 1$ (top right), $r = 1.5$ (bottom left) and $r = 2$ (bottom right).

can be correctly recovered by our modified LBM. This method is easy to implement and easy to parallelize.

It is clear that, due to the multi-scale nature of the system, the cartesian grid used in our preliminary simulations is not very sufficient to compute in a computationally efficient manner real life clinical situation with complex geometry which is in general computationally expensive. Therefore, it is expected to solve the Lattice Boltzmann system on adapted cartesian or triangular unstructured grids as e.g., in [60, 128] and the references therein. This coupled LBM method

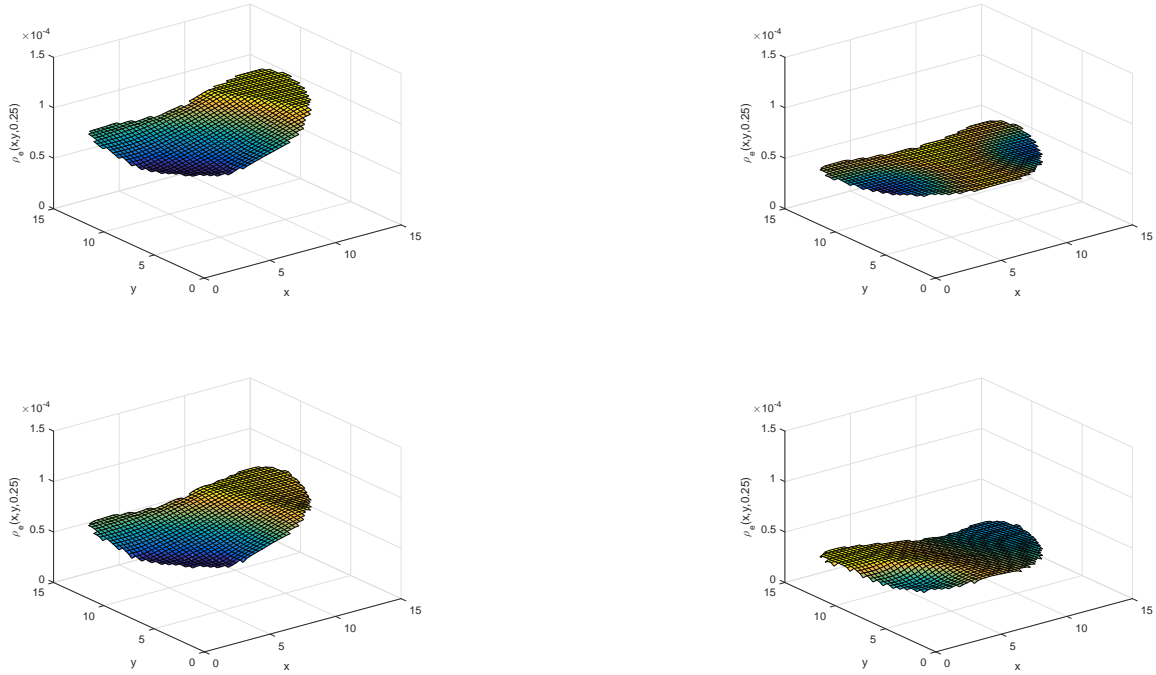


Figure 13.20: 3D representation of U at $t = 0.25s$ with both time-delay operators and $r = 0$ (top left), $r = 1$ (top right), $r = 1.5$ (bottom left) and $r = 2$ (bottom right).

will be shown in a forthcoming paper for more general coupled models with realistic complex geometries. However, we prove that time-delays can't be neglected to obtain realistic behavior. Indeed, with classical FHN ionic model, we have obtained expected auto-excitable electrical behavior with the introduction of time-delay operators. This behavior is generally obtained in more realistic ionic models (as modified Mitchell-Shaeffer ionic model). Moreover, we prove that our modified LBM is still stable and efficient with the introduction of time-delay operators, and the discretization has a negligible impact on perturbations due to those operators.

It would be interesting to use this developed method with observations coming from experimental data and a more complete description of the biophysical model of electrical cardiac activity.

In order to get even closer to a more realistic calculation, it is necessary to study in the future this method coupled with optimization technique, more realistic time-delay operators and robust control problems by using the approach developed in [12, 14]. Then, we will be able to formulate a complete control problem which can be used to set up the stimulus needed to obtain regular beats with a peacemaker.

Annexe: complément de simulations

Nous nous replaçons dans le contexte décrit dans la Section 4, en utilisant les opérateurs ioniques définis par (13.29) et (13.30) et les opérateurs de retard définis par:

$$\begin{aligned}\Psi_\rho(\rho_r) &= a(\rho(t - \xi_1(t)) + \rho(t - \xi_2(t))), \\ \Psi_U(U_r) &= 0,\end{aligned}\tag{13.35}$$

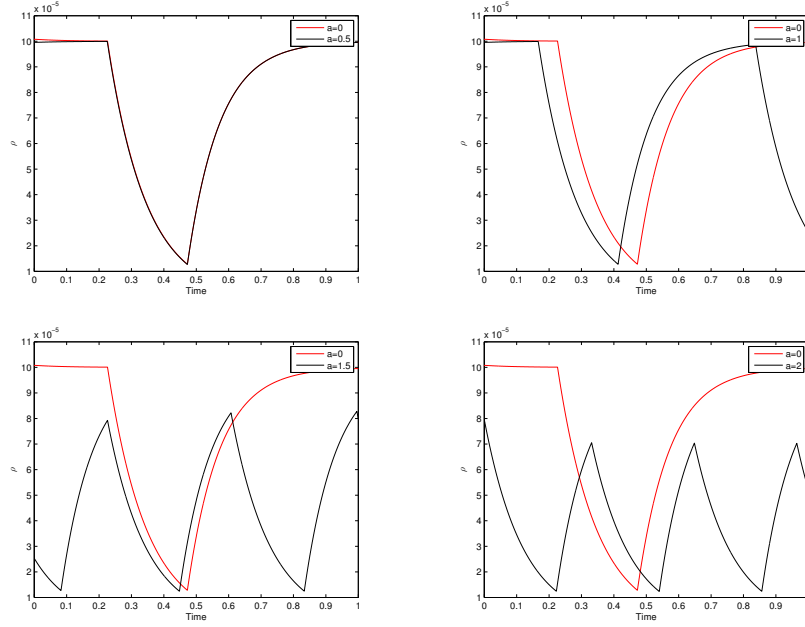


Figure 13.21: Évolution de U à $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$ pour $t = 0, \dots, 1s$ et pour un opérateur Ψ_ρ défini avec $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$

avec a , $\xi_1(t)$ et $\xi_2(t)$ des paramètres choisis.

On choisit les paramètres biologiques définis dans le tableau 13.6. Nous nous intéressons cette fois à un cas où les tenseurs de conductivité \mathcal{K}_i et \mathcal{K}_e sont de la forme:

$$\mathcal{K}_i = \begin{pmatrix} 0.003 & 0 \\ 0 & 0.002 \end{pmatrix} \quad \mathcal{K}_e = \begin{pmatrix} 0.006 & 0 \\ 0 & 0.001 \end{pmatrix} \quad \mathcal{K}_T = \begin{pmatrix} 0.001 & 0 \\ 0 & 0.001 \end{pmatrix} \quad (13.36)$$

Comme le montrent les courbes (13.21)-(13.24), ces valeurs ne changent pas la forme globale de la diffusion d'un potentiel d'action dans le myocarde. On constate en effet qu'au centre du coeur, l'impulsion engendrée par le stimulus extérieur provoque des potentiels d'actions possédant les mêmes écarts dans le temps, et que les 4 principales phases du PA se déroulent de la même manière que dans le cas isotrope. En revanche, comme le montrent les courbes (13.28)-(13.25), la diffusion du stimulus ne se fait plus de manière rectiligne dans le domaine. L'impulsion engendrée reste droite, et suit la forme donnée au stimulus qui balaie le domaine du point inférieur gauche au point supérieur droit (visible sur les figures pour $t = 0.25s$). Cependant, on constate qu'une fois ce stimulus passé, le déroulement des trois dernière phases du potentiel d'action dépend directement de la forme des conductivités (visible sur les figures pour $t = 0.5s$).

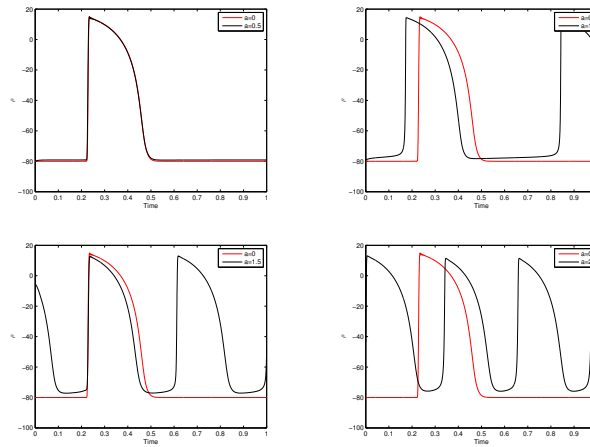


Figure 13.22: Évolution de ρ à $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$ pour $t = 0, \dots, 1s$ et pour un opérateur Ψ_ρ défini avec $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$

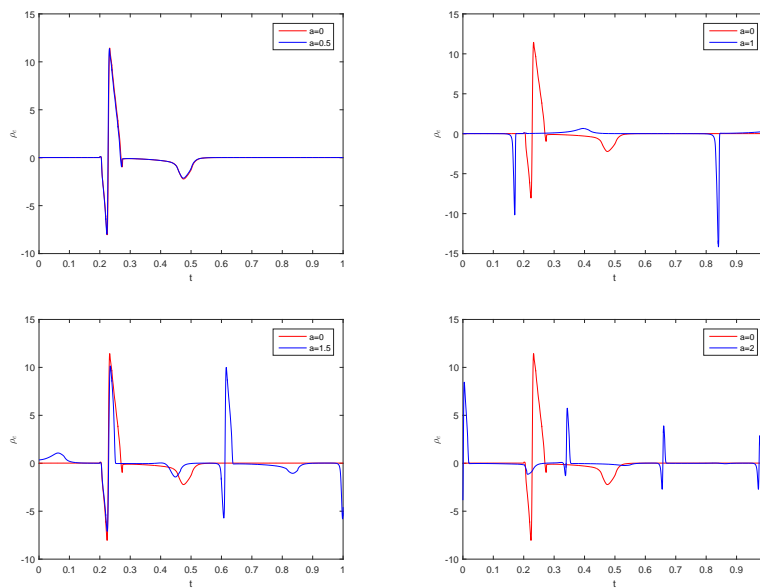


Figure 13.23: Évolution de ρ_e à $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$ pour $t = 0, \dots, 1s$ et pour un opérateur Ψ_ρ défini avec $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$

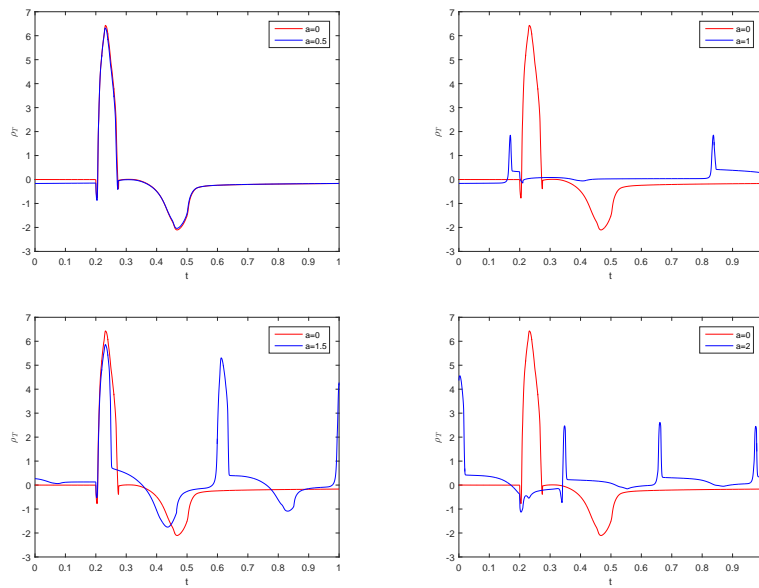


Figure 13.24: Évolution de ρ_T à $\mathbf{x} = (0, 0)$ pour $t = 0, \dots, 1s$ et pour un opérateur Ψ_ρ défini avec $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$

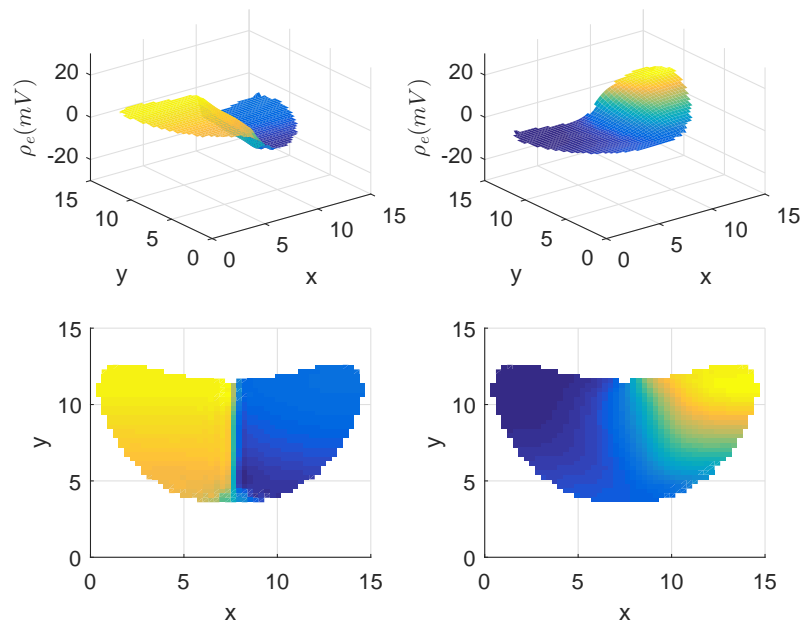


Figure 13.25: Représentation 3D et vue de dessus de ρ_e à $t = 0.25s$ (gauche) et à $t = 0.5s$ (droite).

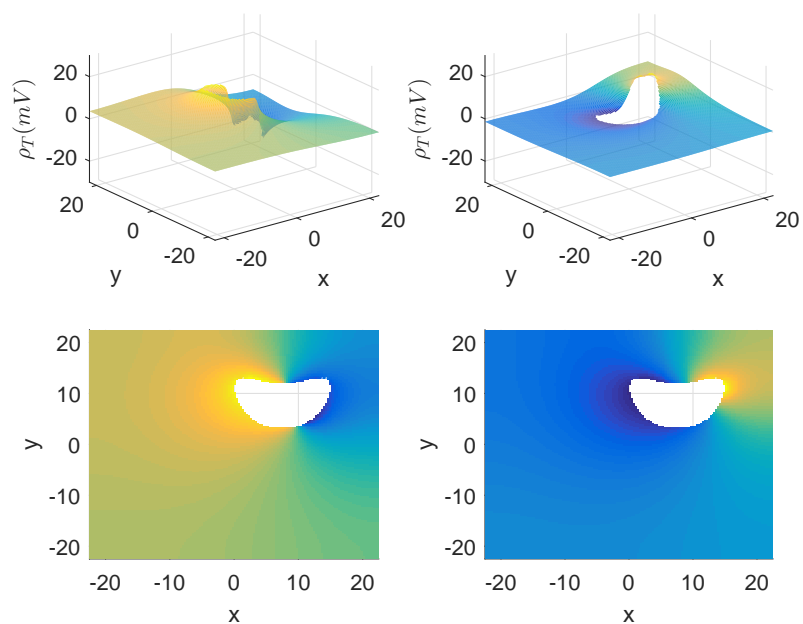


Figure 13.26: Représentation 3D et vue de dessus de ρ_T à $t = 0.25s$ (gauche) et à $t = 0.5s$ (droite).

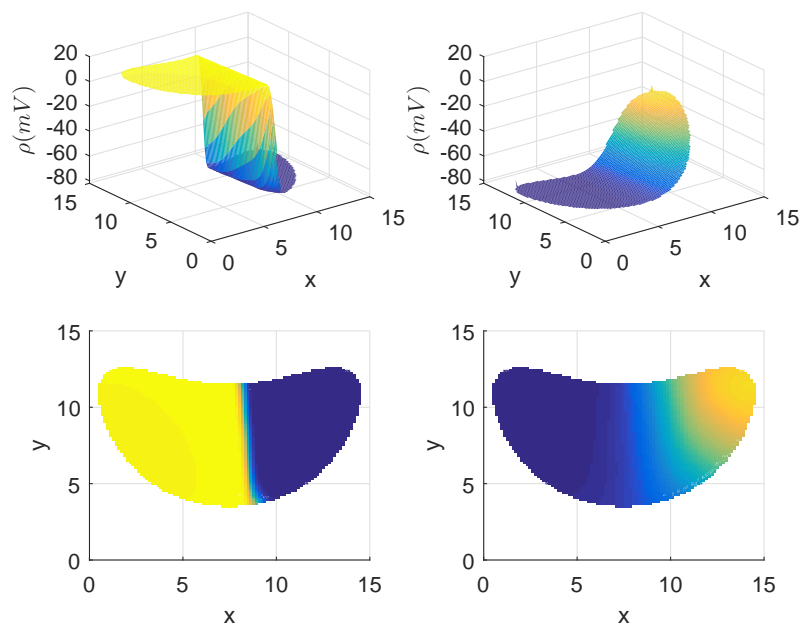


Figure 13.27: Représentation 3D et vue de dessus de ρ à $t = 0.25s$ (gauche) et à $t = 0.5s$ (droite).

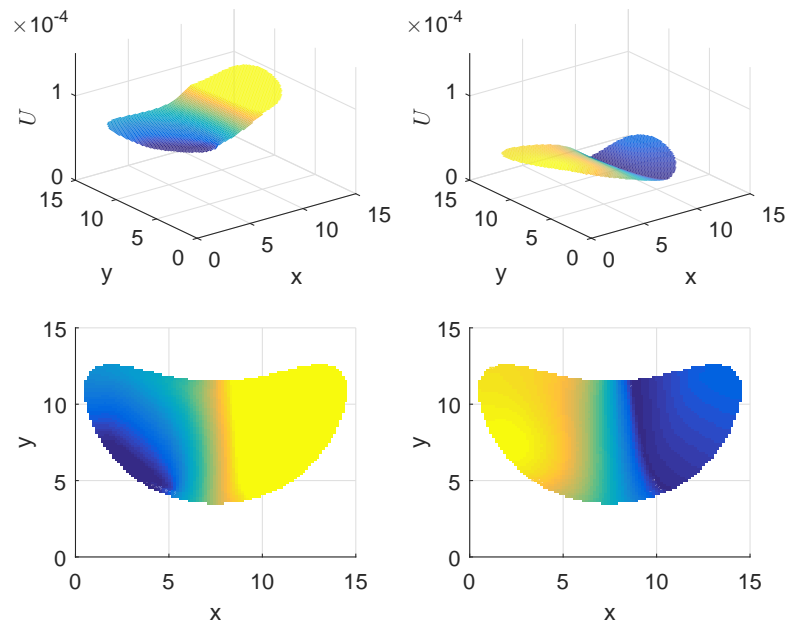


Figure 13.28: Représentation 3D et vue de dessus de U à $t = 0.25s$ (gauche) et à $t = 0.5s$ (droite).

14 Conclusion

Notre travail a permis l'analyse et le développement de techniques numériques basées sur la méthode de Boltzmann sur réseau pour résoudre des systèmes non linéaires de type advection-réaction-diffusion en dimension 2. En utilisant un cadre général approprié et en traitant plusieurs types de systèmes non linéaires (paraboliques, elliptiques, ou couplées, à variables réelles ou complexes, avec des applications à des problèmes provenant de la physique et de la biologie), nous avons pu améliorer notre méthode au fur et à mesure afin d'avoir une méthode aussi généraliste que possible. Pour chaque problème, le comportement asymptotique de la méthode, quand le nombre de Knudsen tend vers zéro, a été analysé (par le développement de Chapman-Enskog) et l'analyse numérique de la convergence et de la stabilité de la méthode a été effectuée.

La méthode ainsi obtenue a été utilisée pour résoudre un problème d'électrophysiologie cardiovasculaire en utilisant des modèles de type bidomaine avec des paramètres physiques et biologiques extraits de la littérature en électrocardiographie. Dans un premier temps, nous avons analysé le problème de la propagation des ondes électrophysiologiques dans le domaine cœur/thorax. Ensuite, nous avons modifié le modèle afin de tenir compte des temps de retard dans les transmissions de signaux. Des résultats d'existence et d'unicité de la solution de l'équation d'état ont été prouvés et l'influence des termes de retard sur la dynamique du système a été analysée numériquement par le développement d'une méthode LBM avec retard. Cette analyse a montré que les termes de retard ne peuvent être négligés pour obtenir un comportement réaliste.

Actuellement, nous travaillons sur l'implémentation numérique de la résolution d'un problème de contrôle optimal, dans le cadre d'électrophysiologie cardiaque avec retards, en couplant notre approche avec des techniques d'optimisation.

Plusieurs points restent ouverts à de futures études. Le premier point consiste à améliorer les résultats numériques en intégrant des domaines géométriques plus réalistes, en définissant des opérateurs ioniques plus complets, ou en adaptant notre méthode pour traiter des problèmes en dimension trois. On peut également envisager des maillages plus complexes, en définissant par exemple des maillages adaptatifs (en se basant par exemple sur [102, 77, 109, 118]), un modèle du système bidomaine modifié (voir par exemple [10]) ou des méthodes à pas de temps et d'espaces variables. En outre, pour obtenir un calcul plus rapide afin d'obtenir des solutions en temps réel à partir d'observations issues de données expérimentales, il est nécessaire de réduire la complexité de calcul et les coûts CPU en couplant par exemple la méthode développée avec un modèle de Décomposition par Projection Orthogonale (POD). Ces différents points s'accompagneront d'un

portage du code de Matlab à un code C++, afin d'être intégré à un logiciel de calcul plus complet. Enfin, des études complémentaires permettant de comparer la méthode de Boltzmann sur réseau avec d'autres méthodes comme les éléments finis ou les volumes finis appliquées à ce type de problème d'électrophysiologie seraient à notre sens pertinents.

Bibliography

- [1] Adams R.A., *Sobolev spaces*, Academic Press, New-York, 1975.
- [2] d'Alembert J., *Recherches sur la courbe que forme une corde tendue mise en vibration*, Histoire de l'Académie des Sciences et Belles-Lettres de Berlin année 1747, Berlin, 1749, p. 214-249
- [3] Alexander F. J., Chen H., Chen S., Doolen, G. D, *Lattice Boltzmann model for compressible fluids*, Phys. Rev. A, 46, 1967-1970, 1992.
- [4] Anderson Hoff, Juliana V. dos Santos, Cesar Manchein, Holokx A. Albuquerque, *Numerical bifurcation analysis of two coupled FitzHugh-Nagumo oscillators*, Eur. Phys. J. B (2014) 87?151.
- [5] Andreianov B., Bendahmane M., Quarteroni A., Ruiz-Baier R., *Solvability analysis and numerical approximation of linearized cardiac electromechanics*, Math. Models Methods Appl. Sci. 25, 959, 2015.
- [6] Andreianov B., Bendahmane M., Karlsen K., and Pierre C., *Convergence of discrete duality finite volume schemes for the cardiac bidomain model*, Netw. Heterog. Media, 6, 195-240, 2011.
- [7] Balasubramanian K., Hayot F., Saam W.F., *Darcy 's law from lattice-gas hydrodynamics*, Phys. Rev. A 36, 2248, 1987
- [8] Bear J., *On the tensor form of dispersion in porous media*, J. Geophys. Res. 66, 1185, 1961.
- [9] Bear J., *Some experiments in dispersion*, J. Geophys. Res. 66, 2455, 1961.
- [10] Z. Belhachmi, R. Chill, *The bidomain problem as a gradient system*, preprint, 2018.
- [11] Belmiloudi A., *Robust control problem of uncertain bidomain models in cardiac electrophysiology*, Journal of Coupled Systems and Multiscale Dynamics, 19, 332-350, 2013.
- [12] Belmiloudi A., *Mathematical modeling and optimal control problems in brain tumor targeted drug delivery strategies*, International Journal of Biomathematics, vol. 10, 1750056, [62 pages], 2017.
- [13] Belmiloudi A., *Dynamical behavior of nonlinear impulsive abstract partial differential equations on networks with multiple time-varying delays and mixed boundary conditions involving time-varying delays*, J. Dynam. Control Systems, 21, (2015), 95-146.

- [14] Belmiloudi A., *Stabilization, optimal and robust control. Theory and applications in biological and physical sciences*, Springer-Verlag, London, 2008.
- [15] Belmiloudi A., *Nonlinear optimal control problems of degenerate parabolic equations with logistic time varying delays of convolution type*, Nonlinear Anal., 63, 1126-1152, 2005.
- [16] Belmiloudi A., *On some robust control problems for nonlinear parabolic equations*, International Journal of Pure and Applied Mathematics, vol.11, No.2, 119-151, 2004.
- [17] Belmiloudi A., *Robust control problems associated with time-varying delay nonlinear parabolic equations* IMA Journl of Mathematical Control and Informtion, 20, 305-334, 2003.
- [18] Belmiloudi A., Corre S., *Mathematical modeling and analysis of dynamic effects of multiple time-varying delays on electrophysiological wave propagation in the heart*, Nonlinear Analysis: Real World Applications..
- [19] Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M., *A model for Collision Processes in Gases Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems*, Phys. Rev., 94 (1954), pp. 511-525.
- [20] Bendahmane M., Karlsen K.H., *Analysis of a class of degenerate reaction-diffusion systems and the bidomain model of cardiac tissue*, Netw. Heterog. Media, 1 185-218, 2006.
- [21] Benzi R., Succi S., Vergassola M., *The lattice Boltzmann equation: theory and applications*, Physics Reports, 222, 145 - 197, 1992.
- [22] Bressan A., *Notes on the Boltzmann Equation*, Lecture notes for a summer course given at S.I.S.S.A., Trieste, 2005.
- [23] Boek E. S., Venturoli M., *Lattice-Boltzmann studies of fluid flow in porous media with realistic rock geometries*, Computers & Mathematics with Applications, Vol 59, Issue 7, pp 2305-2314, 2010.
- [24] Boltzmann L., *Weitere Studien uber das Warme gleichgewicht unfer Gasmolakuler*, Sitzungsberichte Akad. Wiss., 66, 275, 1872.
- [25] Bourgault Y., Coudière Y., Pierre C., *Existence and uniqueness of the solution for the bidomain model used in cardiac electrophysiology*, Nonlinear Analysis: Real World Applications 10 458-482, 2009.
- [26] Boussinesq J., *Essai sur la théorie des eaux courantes*, Comptes rendus de l'Académie des Sciences, vol. 23, pp. 1-680, 1877.
- [27] Britton N. F., *Reaction-diffusion equations and their applications to biology*, Academic Press, London, UK, 1986.
- [28] Britton N. F., *Essential Mathematical Biology. Springer Undergrad. Math. Series* (2003).

- [29] Boon J. P., Dab D., Kapral R., Lawniczak A., *Lattice gas automata for reactive systems*, Physics Reports 273 (1996) 55-147
- [30] Boulakia M., Fernandez M. A., Gerbeau J.-F., Zenzemi N., *A coupled System of PDEs and ODEs Arising in Electrocardiograms Modeling*, Applied Mathematics Research eXpress, Vol. 2008, Article ID abn002, 2008.
- [31] Boulakia M., Cazeau S., Fernandez M. A., Gerbeau J.-F., Zenzemi N., *Mathematical Modeling of Electrocardiograms: A Numerical Study*, Annals of Biomedical Engineering, 38, pp 1071-1097, 2009.
- [32] Buric N., Todorovic D., *Dynamics of FitzHugh-Nagumo excitable systems with delayed coupling*, Physical Review E, 67, 066222, 2003.
- [33] Buric N., Todorovic K., Vasovic N., *Dynamics of noisy FitzHugh-Nagumo neurons with delayed coupling*, Chaos, Solitons and Fractals, 40, 2405-2413, 2009.
- [34] Campbell S.R., Wang D., *Relaxation oscillators with time delay coupling*, Physica D, 111:151-178, 1998.
- [35] Campos J.O., Oliveir R.S., dos Santos R.W., Rocha B.M., *Lattice Boltzmann method for parallel simulations of cardiac electrophysiology using GPUs*, J. Comput. Appl. Math., 295, 70-82, 2016.
- [36] Cercignani C., *The Boltzmann equation and its applications*. Springer, New York, 1988.
- [37] Cercignani C., Illner R., Pulvirenti M., *The Mathematical Theory of Dilute Gases*, Springer-Verlag, New York, 1994.
- [38] Chai Z., Shi B.C., *Novel Boltzmann model for the Poisson equation*, Applied Mathematical Modeling, 32, 2050-2058, 2008.
- [39] Chapman S., Cowling T. G., *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases*, Cambridge University Press, 1970.
- [40] Chen H., Goldhirsch I., Orszag S. A., *Discrete Rotational Symmetry, Moment Isotropy, and Higher Order Lattice Boltzmann Models*, Journal of Scientific Computing, Volume 34, Issue 1, pp 87-112, 2008.
- [41] Chikatamarla S. S., Karlin I. V., *Lattices for the lattice Boltzmann methode*, Phys. Review, E 79, 046701, 2009.
- [42] Gan Chun-Biao, Perc Matjaz, Wang Qing-Yun, *Delay -aided stochastic multiresonances on scale-free FitzHugh Nagumo neuronal networks*, Chin. Phys. B Vol. 19, No. 4 (2010).
- [43] Clayton R.H., Bernus O, Cherry EM, Dierckx H, Fenton FH, Mirabella L, Panfilov AV, Sachse FB, Seemann G, Zhang H., *Models of cardiac tissue electrophysiology: progress, challenges and open questions*, Progress in Biophysics and Molecular Biology 104 (2011), 22-48.

- [44] Colli Franzone P., Savaré G., *Degenerate evolution systems modeling the cardiac electric field at micro- and macroscopic level*, in: Evolution Equations, Semigroups and Functional Analysis (eds.A. Lorenzi, B. Ruf), Birkhauser, Basel, 49-78, 2002.
- [45] Colli Franzone P., Guerri L., Tentoni S., *Mathematical modeling of the excitation process in myocardial tissue: Influence of fiber rotation on wavefront propagation and potential field*, Math. Biosci. 101 (2) (1990) 155-235.
- [46] Corre S., Belmiloudi A., *Coupled Lattice Boltzmann Modeling of Bidomain Type Models in Cardiac Electrophysiology*, Mathematical and Computational Approaches in Advancing Modern Science and Engineering, Springer, 2016
- [47] Corre S., Belmiloudi A., *Coupled lattice Boltzmann simulation method for bidomain type models in cardiac electrophysiology with multiple time-delays*, Mathematical Modelling of Natural Phenomena Special Issue: mathematical modelling in cardiology, 2018.
- [48] Corre S., Belmiloudi A., *Coupled lattice Boltzmann method for numerical simulations of fully coupled Heart and Torso bidomain system in electrocardiology*, Journal of Coupled System and Multiscale Dynamics, American Scientific Publishers, 2016, 4 (3), pp. 207-229.
- [49] C. Cosner, *Reaction-Diffusion Equations and Ecological Modeling*, Tutorials in Mathematical Biosciences IV. Lecture Notes in Mathematics, vol 1922. Springer, Berlin, Heidelberg, 2008.
- [50] Dal H., Goktepe S., Kaliske M., Kuhl E., *A fully implicit finite element method for bidomain models of cardiac electromechanics*, Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 253, 323-336, 2013.
- [51] Degond P., Pareschi L., Russo G., *Modeling and Computational Methods for Kinetic Equations*, MSSET, Springer, 2004.
- [52] Delcroix J. L., Salmon J., *Quelques propriétés particulières de l'opérateur de collision élastique de Boltzmann*. Le journal de physique et le radium, 20, p 594, 1959.
- [53] Dellacherie, S., *Construction and analysis of lattice Boltzmann methods applied to a 1d convection-diffusion equation*, Acta. Appl. Math., 131, 69-140, 2014.
- [54] Djabella K., Landau M., Sorine M., *A two-variable model of cardiac action potential with controlled pacemaker activity and ionic current interpretation*. 46th IEEE Conf. Decis. Control (2007) 5186-5191.
- [55] P. A. Domenico , F. W. Schwartz, *Physical and Chemical Hydrogeology*, Vol. 506, New York, Wiley, 1998.
- [56] F. Dubois, B. Graille, P. Lallemand, *Recovering the full Navier-Stokes equations with lattice Boltzmann schemes*, 30th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Jul 2016, Victoria, BC, Canada. American Institute of Physics Proceedings 1786 (2016) 4000.
- [57] Dupraz M., Filippi S., Gizzi A., Quarteroni A., Ruiz-Baier R., *Finite element and finite volume-element simulation of pseudo-ECGs and cardiac alternans*, Math. Methods Appl. Sci., 38, 1046-1058, 2015.

- [58] Ellenbogen K. A., Wilkoff B. L., Kay G. N., Lau C. P. *Clinical Cardiac Pacing, Defibrillation and Resynchronization Therapy*. Elsevier Health Sciences, Philadelphia, (2006).
- [59] Y. Epshteyn, A. Kurganov, *New Discontinuous Galerkin Methods for the Keller-Segel Chemotaxis Model*, CNA report, 2007.
- [60] Fan Z., et al. *Adapted Unstructured LBM for Flow Simulation on Curved Surfaces*, In: Proceedings of the 2005 ACM SIGGRAPH/Eurographics symposium on Computer animation, 245-254, 2005.
- [61] I. Fatkullin, *A study of blow-ups in the Keller-Segel model of chemotaxis*, Nonlinearity, Vol 26, pp 81-94, 2013.
- [62] X. Feng, *On existence and uniqueness results for a coupled system modeling miscible displacement in porous media.*, J. Math. Anal. Appl. 194 (1995) 3, pp. 883-910.
- [63] Fenton F., Karma A., *Vortex dynamics in three-dimensional continuous myocardium with fiber rotation: Filament instability and fibrillation.*, Chaos 8 (1998) 20-47.
- [64] R. A. Fisher, *The wave of advance of advantageous genes*, Ann. Eugenics 7, 353-369, 1937.
- [65] Fitzhugh R., *Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane*. Biophys. J. 1:445-465, 1961.
- [66] Fonseca F., *The solution of the nonlinear Schrodinger equation using Lattice- Boltzmann*, Journal of Physics: Conference Series, Vol 480, Conference 1, 2014.
- [67] Glass L. *Synchronization and rhythmic processes in physiology*, Nature 410:277-284, 2001.
- [68] Golse F., *The Boltzmann equation and its hydrodynamic limits*, in "Evolutionary Equations", C. Dafermos, E. Feireisl eds., Vol. II, 159-301, Handb. Diff. Equations, Elsevier-North-Holland, 2005.
- [69] Guo, Zheng, Shi *Non-equilibrium extrapolation method for velocity and pressure boundary conditions in the lattice Boltzmann method*, Chinese Physics, 4, 366, 2002.
- [70] J. Hardy, O. de Pazzis, Y. Pomeau, *Time evolution of a two dimensional model system, 1. Invariant states and time correlation functions*, Journal of Mathematical Physics 14, 1746, 1973.
- [71] J. Hardy, O. de Pazzis, Y. Pomeau, *Molecular dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation functions*, Phys. Rev. A 13, 1949, 1976.
- [72] M. Hasert, J. Bernsdorf, S. Roller, *Lattice Boltzmann Simulation of non-Darcy Flow in Porous Media*, Procedia Computer Science, Vol 4, pp 1048-1057, 2011.
- [73] He, Xiaoyi, Luo, Li-Shi, *Lattice Boltzmann Model for the Incompressible Navier-Stokes Equation*, Journal of Statistical Physics, Volume 88, Issue 3, pp 927-944, 1997.

- [74] Hodgkin A.L., Huxley A.F., *A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve*, The Journal of Physiology, 117 (4), 500-44, August 1952.
- [75] Huang K., *Statistical Mechanics*, John Wiley & Sons, Inc., Canada, 1963.
- [76] Huang J., Yang C., Cai X. *A Fully Implicit Method for Lattice Boltzmann Equations*, SIAM J. Sci. Comput., 37(5), Special Section, S291-S313, 2015.
- [77] Huang W., Russell R.D., *Adaptive Moving Mesh Methods*, Springer, New York. 2011,
- [78] d'Humières D., *Generalized lattice Boltzmann equations*. In: Shizgal BD, Weaver DP, editors. *Rarefied Gas Dynamics: Theory and Simulations*, Prog Astronaut Aeronaut 1992, 159: 450-458.
- [79] d'Humières D., Lallemand P., *Flow of a lattice gas between two parallel plates and development of the Poiseuille profile*, C. R. Acad. Sci. Paris 302, 983 (1986)
- [80] Jia J., Liu H., Xu C., Yan F., *Dynamic effects of time delay on a coupled FitzHugh-Nagumo neural system*, Alexandria Engineering Journal, 54, 241-250, 2015.
- [81] R. Kapral, A. Lawniczak, P. Masiar, *Reactive dynamics in a multispecies lattice gas automaton*, The Journal of Chemical Physics 96, 2762, (1992)
- [82] Karakashian O., Makridakis C., *A space-time finite element method for the nonlinear schrodinger equation: the continuous galerkin method.*, Siam J. Numer. Anal. 36, 6, 1779-1807, 1999.
- [83] Lions J.L., *Résolution de quelques problèmes aux limites non-linéaires*, Dunod, 1969.
- [84] Lions J.L., *Équations Différentielles Operationnelles*, Springer, New York, 1961.
- [85] Lions J.L., Magenes E., *Problèmes aux limites non homogènes et applications*, second ed., Tome 1 et 2, Dunod, Paris, 1968.
- [86] Maxwell J.C., *Illustrations of the dynamical theory of gases. Part I. On the motions and collisions of perfectly elastic spheres.* The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 4th Series, vol.19, pp.19-32, 1860.
- [87] Karimi, K., Nakshatrala K. B., *Do Current Lattice Boltzmann Methods for Diffusion and Advection-Diffusion Equations Respect Maximum Principle and the Non-Negative Constraint?*, Communications in Computational Physics, 20, 374-404, 2016.
- [88] T. Kato, *On nonlinear Schrödinger equations*, Annales de l'I. H. P., section A, tome 46, N1 (1987), p. 113-129.
- [89] I. Kim, Y. Yao *The Patlak-Keller-Segel Model and Its Variations: Properties of Solutions via Maximum Principle*, SIAM J. Math. Anal., 44(2), pp 568-602, 2012.

- [90] M. Klaus. *Boltzmann collision operator without cut-off*. Helv. Phys. Acta 50, 6, pp. 893-903, 1977.
- [91] Kozono H., Sugiyama Y., Wachi T., *Existence and uniqueness theorem on mild solutions to the Keller-Segel system in the scaling invariant space*, J. Differential Equations 252 (2012) 1213-1228.
- [92] M.A. Krasnoselski, *Topological methods in the theory of nonlinear integral equations*, Pergamon, Oxford, 1965.
- [93] G. V. Krivovichev, *Numerical Stability Analysis of Lattice Boltzmann Equations for Linear Diffusion*, Appl. Math. Inf.Sci.9, No. 4,1687-1692, 2015.
- [94] Ladd A.J.C., *Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 1. Theoretical foundation*, Journal of fluid mechanics 271, 285-309, 1994.
- [95] Ladd A.J.C., Verberg R., *Lattice-Boltzmann Simulations of Particle-Fluid Suspensions*, Journal of Statistical Physics, 104, 1191-1251 ,2001.
- [96] Lallemand P., Luo L.S., *Theory of the lattice Boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability*, Phys. Rev, 61, 6546-6562, 2000.
- [97] Lines G.T., Grottum P., Tveito A., *Modeling the electrical activity of the heart: A Bidomain Model of the ventricles embedded in a torso*, Comput Visual Sci (2003) 5, 195.
- [98] Luo C.H., Rudy Y., *A dynamic model of the cardiac ventricular action potential: I. simulations of ionic currents and concentration changes*. Circ. Res.74 (1994) 1071-1096.
- [99] P. A. Markowich., P. Szmolyan, *A system of convection-diffusion equations with small diffusion coefficient arising in semiconductor physics*, Volume 81, Issue 2, Pages 234-254, 1989.
- [100] D. J. Mavriplis, *Multigrid solution of the steady-state lattice Boltzmann equation*. Computers & Fluids, Volume 35, Issues 8-9, Pages 793-804, September-November 2006.
- [101] McNamara, Guy R. and Zanetti, Gianluigi, *Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata*, Phys. Rev. Lett., 61, 2332-2335, 1988.
- [102] Michel-Belmiloudi G., *Approximation de problèmes non linéaires. Analyse de l'erreur et algorithme de résolution avec adaptation de maillages*, PhD thesis of Rennes1, 1996.
- [103] L. Mieussens, *Discrete-velocity models and numerical schemes for the Boltzmann-BGK equation in plane and axisymmetric geometries* ,Journal of Computational Physics, Elsevier, 2000.
- [104] Mitchell C.C., Schaeffer D.G., *A two-current model for the dynamics of cardiac membrane*. Bull. Math. Biol., 65:767-793, 2003.
- [105] S. Moller, A. Kreter, Ch. Linsmeier, U. Samm, *Thermally activated reaction-diffusion-controlled chemical bulk reactions of gases and solids*, Nuclear Materials and Energy, Volume 1, Pages 1-7, 2015.

- [106] Nash R., et al., *Choice of boundary condition for lattice-Boltzmann simulation of moderate Reynolds number low in complex domains*, Phys. Rev. E 89, 023303 (2014).
- [107] J. von Neumann, A.W. Burks, *Theory of Self-Reproducing Automata*, University of Illinois Press, 1966.
- [108] Y. P. Pao. *Boltzmann collision operator with inverse-power intermolecular potentials*. I, II. Comm. Pure Appl. Math. 27 (1974), 407-428, 559-581.
- [109] Patila D.V. , Premnathb K.N., Banerjeea S., *Multigrid lattice Boltzmann method for accelerated solution of elliptic equations* , Journal of Computational Physics, 265, pp 172-194, 2014.
- [110] Penet M., Guéguen H., Belmiloudi A., *Artificial blood glucose control using a DDE modelling approach*, In. Proceeding of 19th IFAC World Congress, 47, 2076-2081, 2014.
- [111] Perumal A., Dass A., *A Review on the development of lattice Boltzmann computation of macro fluid flows and heat transfer* , Alexandria Engineering Journal , 54, 955-971, 2015.
- [112] S. Ponce Dawson, S. Chen, G. D. Doolen, *Lattice Boltzmann computations for reaction-diffusion equations*, The Journal of Chemical Physics 98, 1514, (1993)
- [113] Premnath K.N., Abraham J., *Three-dimensional multi-relaxation time (MRT) lattice-Boltzmann models for multiphase flow*, Journal of Computational Physics, Vol. 224, pp 539-559, 2007.
- [114] Rioux M., Bourgault Y., *A Predictive Method Allowing the use of a Single Ionic Model in Numerical Cardiac Electrophysiology*, ESAIM: M2AN 47, pp 987-1016, 2013.
- [115] Sandra R.F., Savi M. A., *An analysis of heart rhythm dynamics using a three-coupled oscillator model*, Chaos, Solitons and Fractals, 41, 2553-2565, 2009.
- [116] N. Satofuka, T. Nishioka, *Parallelization of lattice Boltzmann method for incompressible flow computations* , Computational Mechanics Vol. 23, Number 2, Page 164, 1999.
- [117] Scholl E., Hiller G., Hovel P., Dahlem M. A., *Time-delayed feedback in neurosystems*, Phil. Trans. R. Soc. A., 367, 1079-1096, 2009.
- [118] Schornbaum F., Rude U., *Massively Parallel Algorithms for the Lattice Boltzmann Method on Nonuniform Grids*, SIAM J. Sci. Comput., 38(2), 96-126, 2016.
- [119] Schulze, W. H. *ECG Imaging of Ventricular Activity in Clinical Applications*, Vol. 22, KIT Scientific Publishing, 2015.
- [120] T. Seidman, H.Z. Zhou, Existence and uniqueness of optimal controls for a quasilinear parabolic equation, SIAM J. Control Optim., 20, No. 6, 747-762, 1982.
- [121] Sharomi O., Spiteri R., *Convergence order vs. parallelism in the numerical simulation of the bidomain equations*, Journal of Physics: Conference Series, 385, 1-6, 2012.

- [122] B. Shi, *Lattice Boltzmann Simulation of Some Nonlinear Complex Equations*, Computational Science, ICCS 2007, pp 818-825, 2007.
- [123] Shi B. and Guo, Zhaoli, *Lattice Boltzmann model for nonlinear convection-diffusion equations*, Physical review E, 79, 016701, 2009.
- [124] Shih L.Y., *Self-focusing of laser beams in a non-circular fiber*, Wave motion 8, 341-348, 1986.
- [125] S. Succi, *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*. pp. 82-84 Oxford University Press, Oxford. (2001)
- [126] S. Succi, D. d'Humières, Y. Qian, and S. A. Orszag, *On the small-scale dynamical behavior of lattice BGK and lattice Boltzmann schemes*, J. Sci. Comput.8, 219, 1993.
- [127] T. Tao, *Global existence and uniqueness results for weak solutions of the focusing mass-critical non-linear Schrodinger equation*, eprint ArXiv:0807.2676, 2008.
- [128] Valero-Lara P., Jansson J., *A Non-uniform Staggered Cartesian Grid Approach for Lattice-Boltzmann Method*, Procedia Computer Science, 51, 296-305, 2015.
- [129] Veneroni M., *Reaction-diffusion systems for the macroscopic bidomain model of the cardiac electric field*. Nonlinear Anal. Real World Appl. 10 849-868, (2009).
- [130] V. Volpert, S. Petrovskii, *Reaction-diffusion waves in biology* , Physics of Life Reviews 6, pp 267-310, 2009.
- [131] Wu D., Zhu S., *Stochastic resonance in FitzHugh-Nagumo system with time-delayed feedback*, Physics Letters A 3721, 5299-5304, 2008.
- [132] Xiang X., Wang Z., Shi B., *modified lattice boltzman scheme for nonlinear convection diffusion equations*, Commun Nonlinear Sci Numer Simulat, 17, 2415-2425, 2012.
- [133] D. Yali, K. Linchua, C. Xianjin *Lattice Boltzmann Method for Coupled Burgers Equations* , Electronic Journal of Differential Equations, Vol. 2015, No. 251, pp. 1-12, 2015.
- [134] L. M. Yang, C. Shu, J. Wu, *Development and Comparative Studies of Three Non-free Parameter Lattice Boltzmann Models for Simulation of Compressible Flows*, Adv. Appl. Math. Mech., Vol. 4, No. 4, pp. 454-472, 2012
- [135] Yang X., Shi BC., Chai Z., *Coupled lattice Boltzmann method for generalized Keller-Segel chemotaxis model*, Computers and Mathematics with Applications, 12, 1653-1670, 2014.
- [136] Yin X., Zhang J. *An improved bounce-back scheme for complex boundary conditions in lattice Boltzmann method*, Journal of Computational Physics, 231, 4295-4303, 2012.
- [137] Zhang Ting, Shi Baochang, Guo Zhaoli, Chai Zhenhua, Lu Jianhua, *General bounce-back scheme for concentration boundary condition in the lattice-Boltzmann method*, American Physical Society, 85, 2012.

- [138] Zhang J., Yan G., *A lattice Boltzmann model for the Burgers-Fisher equation*, Chaos. 2010, Vol 20, Issue (2), 2010.
- [139] J. Zhang, G. Yan, *A lattice Boltzmann model for the nonlinear Schrodinger equation*, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, Vol 40, 33, 2007.
- [140] Zhi S., Ming C., Jing L., *Parallelization of Lattice Boltzmann method using MPI domain decomposition technology for a drop impact on a wetted solid wall* , Int. J. Model. Simul. Sci. Comput., Vol. 05, 2014.
- [141] Zou Q., He X., *Pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann*, J. Phys. Fluids9, 1591-1598, 1997.

Formations doctorales et participations à des conférences

Formations doctorales (sous forme de cours)

2014 *Mini-cours sur l'optimisation polynomiale et le contrôle* donné par Didier Henrion & Jean-Bernard Lasserre (6h)

2015 *Problème de Cauchy pour des équations semi-linéaires dispersives* donné par Vincent Duchêne(8h)

2015 *Comportement en temps long des solutions d'équations de Hamilton Jacobi* donné par Olivier Ley & Nicoletta Tchou (8h)

2015 *Communication scientifique en anglais et en français* donné par Gary Burkhart (20h)

2015 *Enseigner à l'université : quelles difficultés, quelles ressources ?* donné par Ghislaine Gueudet (10h)

2016 *Philosophie des sciences* avec Ludovic Bot (8h)

Conférences suivies

2014 *Conférence "SMAI-MODE 2014"*, INSA, Rennes.

2015 *Conférence "Workshop sur les problèmes de Whitney"*, CIRM, Marseille.

Communications

1. Conférences internationales

2015 *Coupled Lattice Boltzmann Modeling of Bidomain Type Models in Cardiac Electrophysiology*, The 2015 AMMCS-CAIMS Congress Waterloo, Ontario, Canada. (présentation orale)

2016 *Coupled Lattice Boltzmann Method for Simulation Models Described by Degenerate Nonlinear PDEs in Heterogeneous Media*, Conférence "HJ2016: Hamilton-Jacobi Equations: new trends and applications", INSA, Rennes. (poster)

2016 *Mathematical modeling and lattice Boltzmann simulation method for Bidomain type models in cardiac electrophysiology with time-varying delays* 4th ICCDS's 2016, Agadir, Maroc. (présentation orale)

2. Conférences nationales

2015 *Méthode de Boltzmann sur Réseau et système de Gross-Pitaevskii pour la simulation numérique de phénomènes de self-trapping* Journée FOTON-IRMAR Mathématiques et Optique , Enssat, Lannion. (présentation orale)

2016 *Lattice Boltzmann method for flow in porous media*, 4ème école Ecoulements Gravitaires et Risques Naturels, Piriac-sur-Mer. (présentation orale)

Liste des figures

2.1	Schéma d'une collision binaire entre deux particules de vitesses \mathbf{e}_1 et \mathbf{e}_2 et de centre de gravité m_1 et m_2	19
3.1	Modèle $D1Q3$ (haut) et $D1Q5$ (bas).	25
3.2	Modèle $D2Q7$ (gauche) et $D2Q9$ (droite).	25
3.3	Les trois catégories de vitesses constituant les modèles $D3Q15, D3Q19$ et $D3Q27$	25
3.4	Fonctions de répartition d'un modèle $D2Q9$ avant la phase de transport (gauche), et après la phase de transport selon chaque direction (droite).	31
5.1	Numérotation des noeuds $\mathbf{x}_i = \mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t$	45
5.2	Méthode du <i>Bounce-back</i> modélisant le rebond des particules (modèle $D2Q9$).	49
6.1	Log de l'erreur en espace, $t = 1$ en rouge et $t = 0.5$ en bleu, pentes de l'ordre de 1.5	65
6.2	Courbe (haut) et vue de dessus (bas) de ρ pour $t = 0.5$ (gauche) et $t = 1$ (droite) avec $\Delta x = 1/100$, $\alpha_1 = \alpha_2 = 5$	66
6.3	Courbe de ρ pour $t = 1$ avec $\Delta x = 1/50$, $\delta = 1.5$, $a = 4$, $b = 0.05$ et $k = 1$	66
6.4	Vue de dessus de ρ pour $t = 1$ avec $\Delta x = 1/50$, $\delta = 1.5$, $a = 4$, $b = 0.05$ et $k = 1$	66
6.5	Relation entre l'erreur relative Err_ρ et le pas d'espace pour $t = 0.5$ (cercles) et pour $t = 1$ (croix), pentes de l'ordre de 1.5.	67
6.6	Evolution de la solution à $t = 0.5$ pour $\delta = 1.2$, $k = 1$, $b = 0.01$ pour $\alpha = 4$ (gauche), $\alpha = 8$ (centre) et $\alpha = 16$ (droite).	68
6.7	Evolution de la solution à $t = 0.5$ pour $\delta = 1.2$, $b = 0.01$, $\alpha = 4$ pour $k = 1$ (gauche), $k = 2$ (centre) et $k = 3$ (droite).	69
6.8	Evolution de la solution à $t = 0.5$ pour $\delta = 1.2$, $k = 1$, $\alpha = 4$ pour $b = 0.05$ (gauche), $b = 0.1$ (centre) et $b = 0.2$ (droite).	69
6.9	Evolution de la solution à $t = 0.5$ pour $\alpha = 4$, $k = 1$, $b = 0.01$ pour $\delta = 1.5$ (gauche), $\delta = 2$ (centre) et $\delta = 3$ (droite).	69
6.10	Evolution de la solution pour $\delta = 1.2$, $b = 0.01$ pour $t = 0$ (gauche), $t = 0.5$ (centre) et $t = 1$ (droite).	70
6.11	Relation entre l'erreur relative Err_ρ et le pas d'espace pour $t = 0.5$ (cercles) et $t = 1$ (croix), pentes de l'ordre de 1.	71
6.12	Evolution de la solution à $t = 1$ pour $b = 0.01$, avec $\delta = 1.2$ (gauche), $\delta = 1.6$ (centre) et $\delta = 2$ (droite).	71
6.13	Evolution de la solution à $t = 1$ pour $\delta = 1.2$, avec $b = 0.01$ (gauche), $b = 0.02$ (centre) et $b = 0.04$ (droite).	72
6.14	Relation entre l'erreur relative Err_ρ et le pas d'espace, pente de l'ordre de 1.	74
6.15	Représentation de ρ dans Ω pour $t = 0.2$	74

6.16	Vue de dessus de ρ dans Ω pour $t = 0.2$	74
6.17	Vélocité $\mathbf{U} = (u, v)$, avec u à gauche et v à droite.	75
7.1	Courbe de ρ à $r = 1$ avec $\Delta x = 1/100$	82
7.2	Vue de dessus de ρ à $r = 1$ avec $\Delta x = 1/100$	82
7.3	Relation entre l'erreur relative et la discrétisation à $r = 10$, pente de l'ordre de 1.	82
7.4	Courbe de ρ à $r = 1$ avec $\Delta x = 1/100$	83
7.5	Vue de dessus de ρ à $r = 1$ avec $\Delta x = 1/100$	83
7.6	Relation entre l'erreur relative et la discrétisation à $r = 10$, pente de l'ordre de 2.	84
7.7	Approximation de ρ avec $k = 2$, $\Delta x = 1/100$ et $r = 1$	85
7.8	Vue de dessus de ρ avec $k = 2$, $\Delta x = 1/100$ et $r = 1$	85
7.9	Relation entre l'erreur relative et la discrétisation à $r = 10$, pente de l'ordre de 2.	86
7.10	$\rho(0.25, y, 1)$ avec $k = 0.1, 2, 8, 32$ pour $\Delta x = 1/100$	88
8.1	Courbe de ρ (droite) et c (gauche) pour $t = 0.5$ (en haut) et $t = 1$ (en bas) avec $\Delta x = 1/100$	97
8.2	Vue de dessus des courbe de ρ (droite) et c (gauche) pour $t = 0.5$ (en haut) et $t = 1$ (en bas) avec $\Delta x = 1/100$	98
8.3	Relation entre l'erreur relative et la discrétisation à $t = 0.5$ (gauche) et $t = 1$ (droite) pour ρ (cercles rouges) et c (croix bleues), , pentes de l'ordre de 1 à 1.5.	99
8.4	Courbe de c (gauche) et de ρ (droite) pour $t = 0, t = 0.05, t = 0.1$ et $t = 0.150$ (de haut en bas) avec $\Delta x = 1/100$	100
8.5	Vue de dessus des courbes de c (gauche) et de ρ (droite) pour $t = 0, t = 0.05, t = 0.1$ et $t = 0.150$ (de haut en bas) avec $\Delta x = 1/100$	101
8.6	Evolution de c (gauche) et de ρ (droite) à $t = 0.1$ pour $\chi = 1$ et $\mu = 2$	103
8.7	Evolution de c (gauche) et de ρ (droite) à $t = 0.1$ pour $\chi = 1$ et $\mu = 4$	103
8.8	Evolution de c (gauche) et de ρ (droite) à $t = 0.1$ pour $\chi = 1$ et $\mu = 8$	103
8.9	Evolution de c (gauche) et de ρ (droite) à $t = 0.1$ pour $\mu = 1$ et $\chi = 2$	104
8.10	Evolution de c (gauche) et de ρ (droite) à $t = 0.1$ pour $\mu = 1$ et $\chi = 4$	104
8.11	Evolution de c (gauche) et de ρ (droite) à $t = 0.1$ pour $\mu = 1$ et $\chi = 8$	104
9.1	Evolution de l'intensité \mathcal{I} au cours du temps.	111
9.2	Evolution de Ψ au cours du temps: partie réelle (en haut), partie imaginaire (en bas), à $t = 0.5$ (gauche), $t = 2$ (milieu) et $t = 5$ (droite), selon les points $\mathbf{x} = (0.5, y)$	112
9.3	Partie réelle et imaginaire de Ψ à $t = 1$	112
9.4	Relation entre l'erreur relative et le pas d'espace, pentes de l'ordre de 1, pentes de l'ordre de 1.	113
9.5	Partie réelle et imaginaire de Ψ à $t = 0$ avec $m = 0.3$	114
9.6	Partie réelle et imaginaire de Ψ à $t = 1$ avec $m = 0.3$	114
9.7	Partie réelle et imaginaire de Ψ à $t = 0$ avec $m = 0.5$	115
9.8	Partie réelle et imaginaire de Ψ à $t = 1$ avec $m = 0.5$	115
9.9	Vue en coupe du myocarde.	119
9.10	Représentation du domaine Ω (intérieur rouge), de bord $\partial\Omega$ (vert).	120
10.1	Particle velocities for D2Q9 LBM	125
10.2	streaming process of a lattice node	125
10.3	Error curves for ρ and U	129

10.4	$\rho(0.5, 0.5, t)$ with $\alpha_1 = 0.01$ to 0.5 , $\alpha_2 = 0.2$	129
10.5	Evolution of ρ_e , ρ and U at $t = 1$ with $\Delta x = 1/50$	129
11.1	Modeling of the membrane as resistor and capacitor coupled in parallel.	134
11.2	Operator H_{ion} and regularized operator H_r for $r_g = 1$, $r_g = 0.5$, $r_g = 0.1$.	137
11.3	Particle velocities for D2Q9 LBM	140
11.4	Streaming process of a lattice node	140
11.5	Heart-torso domain.	156
11.6	Potential ρ in Ω_H at $t = 1$.	157
11.7	Ionic variable U in Ω_H at $t = 1$	157
11.8	Potential ρ_e in Ω_H at $t = 1$.	158
11.9	Potential ρ_T in Ω_T at $t = 1$	158
11.10	Error curves with respect to spatial step Δx for ρ in Ω_T at $t = 0.5$ and $t = 1$.	158
11.11	Error curves with respect to spatial step Δx for U in Ω_T at $t = 0.5$ and $t = 1$.	158
11.12	Evolution of transmembrane potential ρ in middle of the heart (with four phases of AP).	160
11.13	Evolution of ionic variable U in middle of the heart.	160
11.14	Potential ρ in Ω_H at $t = 0.3s$.	161
11.15	Ionic variable U in Ω_H at $t = 0.3s$	161
11.16	Potential ρ in Ω_H at $t = 0.5s$.	161
11.17	Ionic variable U in Ω_H at $t = 0.5s$	161
11.18	Potential ρ_e in Ω_H at $t = 0.3s$.	161
11.19	Potential ρ_T in Ω_T at $t = 0.3s$	161
11.20	Potential ρ_e in Ω_H at $t = 0.5s$.	162
11.21	Potential ρ_T in Ω_T at $t = 0.5s$	162
11.22	Evolution of ρ_N and U_N in the middle of heart.	163
11.23	(ρ_N, U_N) phase plan portrait.	163
11.24	ρ for $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$ for $\Delta \mathbf{x} = 1/30, 1/50, 1/75$ and $1/100$.	163
11.25	ρ_e for $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$ for $\Delta \mathbf{x} = 1/30, 1/50, 1/75$ and $1/100$.	164
11.26	ρ_T for $\mathbf{x} = (0, 0)$ for $\Delta \mathbf{x} = 1/30, 1/50, 1/75$ and $1/100$.	164
11.27	U for $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$ for $\Delta \mathbf{x} = 1/30, 1/50, 1/75$ and $1/100$.	165
11.28	Step by step representation of the algorithm.	168
11.29	Représentation 3D (haut) et vue de dessus (bas) de ρ à $t = 0.3s$ (gauche) et $t = 0.5s$ (droite)	169
11.30	Représentation 3D (haut) et vue de dessus (bas) de ρ_e à $t = 0.3s$ (gauche) et $t = 0.5s$ (droite)	170
11.31	Représentation 3D (haut) et vue de dessus (bas) de U à $t = 0.3s$ (gauche) et $t = 0.5s$ (droite)	170
11.32	Représentation 3D (haut) et vue de dessus (bas) de ρ_T à $t = 0.3s$ (gauche) et $t = 0.5s$ (droite)	171
11.33	Evolution de ρ au point $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$.	172
11.34	Evolution de ρ_e au point $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$.	172
11.35	Evolution de U au point $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$.	172
11.36	Evolution de ρ_T au point $\mathbf{x} = (0, 0)$ (gauche) et au point $\mathbf{x} = (4.5, 4.5)$ (droite).	172
12.1	Domain Ω of the heart	188
12.2	3D representation of (ρ, ρ_e, U) at $t = 0.33s$ with $r = 1$, $\alpha_\rho = 1$, $\alpha_U = 1$.	190
12.3	Time evolution of ρ at midpoint of Ω for Ψ_ρ with $\xi_1 = 0.008s$, $\xi_2 = 0.024s$.	191
12.4	Time evolution of ρ_e at midpoint of Ω for Ψ_ρ with $\xi_1 = 0.008s$, $\xi_2 = 0.024s$.	191

12.5	Time evolution of U at midpoint of Ω for Ψ_ρ with $\xi_1 = 0.008s$, $\xi_2 = 0.024s$.	191
12.6	Time evolution of ρ at midpoint of Ω for Ψ_U with $\xi_3 = 0.016s$, $\xi_4 = 0.032s$.	192
12.7	Time evolution of ρ_e at midpoint of Ω for Ψ_U with $\xi_3 = 0.016s$, $\xi_4 = 0.032s$.	192
12.8	Time evolution of U at midpoint of Ω for Ψ_U with $\xi_3 = 0.016s$, $\xi_4 = 0.032s$.	192
12.9	3D representation of (ρ, ρ_e, U) at $t = 0.33s$ with $r = 1$, $\alpha_\rho = 1$, $\alpha_U = 1$.	193
12.10	Time evolution of ρ at midpoint of Ω for Ψ_ρ with $\xi_1 = 0.008s$, $\xi_2 = 0.024s$.	194
12.11	Time evolution of ρ_e at midpoint of Ω for Ψ_ρ with $\xi_1 = 0.008s$, $\xi_2 = 0.024s$.	194
12.12	Time evolution of U at midpoint of Ω for Ψ_ρ with $\xi_1 = 0.008s$, $\xi_2 = 0.024s$.	194
12.13	Time evolution of ρ at midpoint of Ω for Ψ_U with $\xi_3 = 0.016s$, $\xi_4 = 0.032s$.	195
12.14	Time evolution of ρ_e at midpoint of Ω for Ψ_U with $\xi_3 = 0.016s$, $\xi_4 = 0.032s$.	195
12.15	Time evolution of U at midpoint of Ω for Ψ_U with $\xi_3 = 0.016s$, $\xi_4 = 0.032s$.	195
13.1	Particle velocities for D2Q9 LBM	203
13.2	Streaming process of a lattice node	203
13.3	Representation of Ω with domain on red, border on green and outside on blue.	208
13.4	ρ in Ω at $t = 1$.	209
13.5	U in Ω at $t = 1$	209
13.6	ρ_e in Ω at $t = 1$.	209
13.7	Error curves for ρ and U .	209
13.8	Evolution of $\rho(0.5, 0.5, t)$ for $r = 0$ to $r = 2$.	211
13.9	Evolution of $U(0.5, 0.5, t)$ for $r = 0$ to $r = 2$.	211
13.10	Evolution of middle heart node of normalized ρ and U .	212
13.11	Phase plan of normalized ρ and U .	212
13.12	Evolution of ρ at midpoint of Ω for $t = 0, \dots, T$ for time-delay Ψ_ρ with $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$.	214
13.13	Evolution of U at midpoint of Ω for $t = 0, \dots, T$ for time-delay Ψ_ρ with $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$.	214
13.14	Phase plane for time-delay Ψ_ρ with $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$.	215
13.15	Evolution of ρ at midpoint of Ω for $t = 0, \dots, T$ for time-delay Ψ_U with $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$.	216
13.16	Evolution of U at midpoint of Ω for $t = 0, \dots, T$ for time-delay Ψ_U with $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$.	216
13.17	Phase plane for time-delay Ψ_U with $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$.	217
13.18	3D representation of ρ at $t = 0.25s$ with both time-delay operators and $r = 0$ (top left), $r = 1$ (top right), $r = 1.5$ (bottom left) and $r = 2$ (bottom right).	218
13.19	3D representation of ρ_e at $t = 0.25s$ with both time-delay operators and $r = 0$ (top left), $r = 1$ (top right), $r = 1.5$ (bottom left) and $r = 2$ (bottom right).	218
13.20	3D representation of U at $t = 0.25s$ with both time-delay operators and $r = 0$ (top left), $r = 1$ (top right), $r = 1.5$ (bottom left) and $r = 2$ (bottom right).	219
13.21	Évolution de U à $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$ pour $t = 0, \dots, 1s$ et pour un opérateur Ψ_ρ défini avec $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$	220
13.22	Évolution de ρ à $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$ pour $t = 0, \dots, 1s$ et pour un opérateur Ψ_ρ défini avec $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$	221
13.23	Évolution de ρ_e à $\mathbf{x} = (7.5, 7.5)$ pour $t = 0, \dots, 1s$ et pour un opérateur Ψ_ρ défini avec $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$	221
13.24	Évolution de ρ_T à $\mathbf{x} = (0, 0)$ pour $t = 0, \dots, 1s$ et pour un opérateur Ψ_ρ défini avec $\xi_1(t) = 0.008s$, $\xi_2(t) = 0.016s$	222
13.25	Représentation 3D et vue de dessus de ρ_e à $t = 0.25s$ (gauche) et à $t = 0.5s$ (droite).	222

- 13.26 Représentation 3D et vue de dessus de ρ_T à $t = 0.25s$ (gauche) et à $t = 0.5s$ (droite). 223
- 13.27 Représentation 3D et vue de dessus de ρ à $t = 0.25s$ (gauche) et à $t = 0.5s$ (droite). 223
- 13.28 Représentation 3D et vue de dessus de U à $t = 0.25s$ (gauche) et à $t = 0.5s$ (droite). 224

Liste des tableaux

3.1	Modèles $DdQn$ classiques.	26
3.2	Fonctions et dimensions relatifs à une méthode $DdQn$	33
6.1	Evolution de l'erreur relative en fonction de δ_1, δ_2 et ν pour $t = 0.5$ et $t = 1$	65
6.2	Relation entre la discrétisation de la grille et l'erreur relative Err_ρ pour $\delta = 1.5$, pour $t = 0.5$ et $t = 1$	68
6.3	Relation entre la discrétisation de la grille et l'erreur relative Err_ρ avec $\delta = 1.2$	71
6.4	Impacte de la perturbation P_ρ (en %) sur l'erreur relative Err_ρ à $t = 1$	72
6.5	Relation entre la discrétisation de la grille et l'erreur relative Err_ρ avec $t = 0.2$	74
7.1	Relation entre la discrétisation de la grille et l'erreur relative à ρ	83
7.2	Relation entre la discrétisation de la grille et l'erreur relative à ρ	83
7.3	Impacte de la perturbation P_ρ (en %) sur l'erreur relative à $r = 1$ et $r = 5$	84
7.4	Relation entre la discrétisation Δx et l'erreur relative à $r = 10$	86
7.5	Etude du temps de convergence en fonction de ρ_0 et de Δx avec $C_\rho \leq \Delta \mathbf{x}^3$	86
7.6	Impacte de la perturbation P_ρ (en %) sur l'erreur relative à $r = 1$	87
8.1	Relation entre la discrétisation et l'erreur relative à ρ et c	98
8.2	Variation de l'erreur en fonction de P_F (en%) (à gauche) et de P_G (en%) (à droite).	99
8.3	Erreur à posteriori par rapport à ρ_{app} et c_{app} à $t = 0.1$	100
9.1	Relation entre la discrétisation et l'erreur relative pour les parties réelles et imaginaires de Ψ	113
10.1	Relation between relative error and lattice spacing for ρ and U	128
10.2	Relaxation time of ρ according to α_1 and α_2 variations.	129
11.1	Cell membrane parameters.	156
11.2	Relation between relative error and lattice spacing for ρ and U	158
11.3	Typical computational time (in second) for each part of the algorithm in $\Omega \times (0, 1)$	168
12.1	Cell membrane parameters.	188
13.1	Relative error on $\Omega \times [0, 1]$ for ρ, ρ_e and U	210
13.2	Slopes of relative error curves.	210
13.3	Perturbation for ρ and U with time-delay on PDE	210
13.4	Perturbation for ρ and U with time-delay on EDO.	210

13.5 Perturbation for ρ and U with both time-delay.	211
13.6 Cell membrane parameters.	212
13.7 P_U and P_ρ with time-delay operator Ψ_ρ , $\Delta x = 1/50$ (left) and $\Delta x = 1/100$ (right).	213
13.8 P_ρ and P_U with time-delay $\Psi_\rho = \rho(t - \xi_1(t))$ on $\Omega \times [0, T]$ and $\Delta x = 1/50$	213
13.9 P_U and P_ρ with time-delay operator Ψ_U , $\Delta x = 1/50$ (left) and $\Delta x = 1/100$ (right).	215
13.10 P_ρ and P_U with time-delay operator $\Psi_U = U(t - \xi_3(t))$ on $\Omega \times [0, T]$ and $\Delta x = 1/50$	215
13.11 Multiple time-delay on ρ and U with $\Delta x = 1/50$ (left) and $\Delta x = 1/100$ (right).	217

AVIS DU JURY SUR LA REPRODUCTION DE LA THESE SOUTENUE

Titre de la thèse:

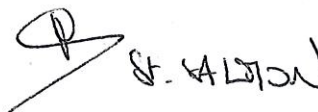
Méthodes de Boltzmann sur réseau pour la simulation numérique de certains systèmes d'advection-réaction-diffusion provenant de la physique et de la biologie, et analyse mathématique et numérique de problèmes issus du domaine biomédical cardio-vasculaire

Nom Prénom de l'auteur : CORRE SAMUEL

Membres du jury :

- Monsieur GRAILLE Benjamin
- Monsieur LEY Olivier
- Monsieur COUDIERE Yves
- Monsieur BELMILOUDI Aziz
- Madame SALMON Stéphanie
- Madame ERHEL Jocelyne
- Monsieur BELHACHMI Zakaria

Président du jury :



Date de la soutenance : 19 Octobre 2018

Reproduction de la these soutenue

- Thèse pouvant être reproduite en l'état
 Thèse pouvant être reproduite après corrections suggérées

Fait à Rennes, le 19 Octobre 2018

Signature du président de jury

Le Directeur,

M'hamed DRISSI

A handwritten signature in black ink, consisting of a stylized 'S' and 'A' followed by a horizontal line.

Titre : Méthodes de Boltzmann sur réseau pour la simulation numérique de certains systèmes d'advection-réaction-diffusion provenant de la physique et de la biologie, et analyse mathématique et numérique de problèmes issus du domaine biomédical cardio-vasculaire

Mots clés : Méthode de Boltzmann sur réseau, Analyse numérique, Electrocardiographie

Résumé : L'objectif de cette thèse est de développer et d'analyser des techniques numériques basées sur la méthode de Boltzmann sur réseau (LBM) pour résoudre des systèmes non linéaires de type advection-réaction-diffusion provenant de la physique et de la biologie. Avec la LBM, des problèmes portant sur des quantités moyennées (densité, potentiel, vitesse, etc) sont exprimés à l'échelle particulaire. Nous approchons la solution de l'équation de Boltzmann relative au comportement d'un champ de particules puis nous recomposons les quantités moyennées solutions des équations traitées.

Dans un premier temps, nous développons un cadre général approprié permettant de traiter plusieurs types de systèmes non linéaires (paraboliques, elliptiques, ou couplés, à variables réelles ou complexes), avec des applications à des modèles tels que Burger-Fisher, écoulement de fluides en milieu poreux, Helmholtz, Patlar-Keller-Segel, ou encore Schrödinger. Pour chaque problème, nous analysons le comportement

asymptotique de la méthode, quand le nombre de Knudsen tend vers zéro (par le développement de Chapman-Enskog) et nous effectuons l'analyse numérique de la convergence et de la stabilité de la méthode.

Dans un deuxième temps, nous nous intéressons à un problème réaliste d'électrophysiologie cardio-vasculaire. Nous adaptons la méthode LBM développée pour approcher les solutions d'un système de type bidomaine permettant de simuler le comportement de potentiels électriques et les interactions ioniques dans la région du myocarde. L'étude et la modélisation d'un tel type de problème est un enjeu sanitaire majeur dans le traitement des pathologies liées par exemple à l'arythmie cardiaque. Notre but étant d'obtenir des comportements réalistes, nous introduisons au sein de ce système bidomaine des opérateurs de retard afin de tenir compte des temps de retard dans les transmissions de signaux. Une fois l'existence et l'unicité de la solution démontrées, nous proposons une série de simulations avec des paramètres physiques et biologiques réalistes afin de valider la méthode proposée.

Title : Lattice Boltzmann methods for the numerical simulation of some advection-reaction-diffusion systems from physic and biology, and mathematical and numerical analysis of cardiac electrophysiology problems.

Keywords : Lattice Boltzmann method, Numerical analysis, Electrophysiology

Abstract In this thesis, we develop and analyze numerical techniques based on the lattice Boltzmann method (LBM) for solving systems of nonlinear advection-diffusion-reaction equations from physics and biology.

With LBM, problems relating to averaged quantities (density, potential, velocities, etc.) are expressed at the particle scale. We approach the solution of Boltzmann equation relating to the behavior of a particle field and then we recombine the averaged quantities solutions of treated systems.

In the first part, we develop an appropriate general framework to deal with several types of non-linear systems (parabolic, elliptic, or coupled, with real or complex variables), with applications to models such as Burger-Fisher, fluid flow in a porous medium, Helmholtz, Patlar-Keller-Segel, or Schrödinger. For each problem, we analyze the asymptotic behavior of the method, when the

number of Knudsen tends to zero (by the development of Chapman-Enskog) and we perform the numerical analysis of convergence and stability of the method.

In the second part, we have taken an interest in a realistic problem of cardio-vascular electrophysiology. We adapt the developed LBM method to approach the solutions of a bidomain type system for simulating the behavior of electrical potentials and ionic interactions in myocardial region. The study and modeling of this type of problem is a major health issue in the treatment of pathologies related, for example, to cardiac arrhythmia. Since our goal is to obtain realistic behaviors, we introduce time-delay operators into this coupled system in order to take into account delay in signal transmissions. Once the existence and uniqueness of solution have been demonstrated, we propose a series of simulations with realistic physical and biological parameters to validate the proposed method.