

UNIVERSITÉ DE FRANCHE-COMTÉ

Laboratoire de Mathématiques de Besançon

Mémoire en vue d'obtenir une
Habilitation à diriger des recherches
Spécialité : Mathématiques Appliquées

Contribution à l'analyse théorique de problèmes elliptiques en domaine non borné, à la simulation numérique d'équations hyperboliques et aux méthodes de bases réduites

ULRICH JERRY RAZAFISON

soutenue le 3 décembre 2015 devant le jury composé de

Chérif AMROUCHE	Université de Pau et des Pays de l'Adour
Claire CHANAIS-HILLAIRET	Université de Lille 1
Paola GOATIN	Inria Sofia Antipolis
Alexei LOZINSKI	Université de Franche-Comté
Yvon MADAY (Président)	Université Pierre et Marie Curie-ParisVI
Bertrand MAURY	Université Paris-Sud

après rapports de

Reinhard FARWIG	Technische Universität Darmstadt
Paola GOATIN	Inria Sofia Antipolis
Bertrand MAURY	Université Paris-Sud

Table des matières

Remerciements	3
Préambule	5
Publication de l'auteur	7
1 Espaces à poids et problèmes elliptiques en domaine non borné	11
1.1 Introduction	11
1.2 Les équations de Navier-Stokes en domaine extérieur de \mathbb{R}^3 [A4, A7]	11
1.3 Rappels sur les espaces à poids isotropes	17
1.4 Le potentiel d'Oseen dans \mathbb{R}^3 [A9]	19
1.5 Le problème div-rot en domaine extérieur de \mathbb{R}^3 [A15]	22
2 Lois de conservation hyperboliques et méthodes volumes finis	27
2.1 Introduction	27
2.2 Un modèle macroscopique de trafic piétonnier [A12, A16]	29
2.3 Modélisation d'écoulement sur des surfaces avec des sillons [A10]	35
2.4 Un modèle de type SI pour l'épidémiologie [A11]	41
2.5 États atteignables pour des systèmes triangulaires [A13]	46
3 Méthodes de bases réduites	51
3.1 Introduction	51
3.2 Bases réduites appliquées aux équations de Maxwell [A8]	53
3.3 Bases réduites appliquées à un problème en chimie quantique [N4]	54
4 Perspectives	61
Bibliographie	70

Remerciements

Tout d'abord, je remercie vivement Reinhard Farwig, Paola Goatin et Bertrand Maury d'avoir accepté de rédiger un rapport sur ce mémoire. Je suis très honoré qu'ils aient pu donner leur avis d'expert sur mes travaux de recherche. Je remercie également Chérif Amrouche, Claire Chanais-Hillaret, Alexei Lozinski et Yvon Maday pour avoir participé à mon jury de soutenance.

Dans le développement de mes activités de recherche, deux personnes ont occupé une place importante : Chérif Amrouche, qui m'a initié à la recherche en me prenant en thèse et Yvon Maday, qui m'a initié au calcul scientifique en me prenant en postdoc. Je tiens une nouvelle fois à les remercier très chaleureusement. J'ai été très heureux d'avoir pu travailler à leur côté et cela a été un véritable enrichissement pour moi. Leurs travaux restent une source d'inspiration.

Je souhaite maintenant remercier l'ensemble de mes collaborateurs, pour nos échanges et pour tout ce qu'ils m'ont apporté. Sans eux, ce mémoire n'aurait pas vu le jour.

Merci également à tous les collègues du Laboratoire de Mathématiques de Besançon et du Collège Mathématiques de l'ESPÉ pour m'avoir fourni des conditions de travail idéales comme enseignant et chercheur.

Un grand merci à tous les membres du « BurEx» 2D24 étendu pour la très bonne ambiance à chaque fois que je passe au Laboratoire Jacques-Louis Lions : Jean-François Babadjian, Laurent Boudin, Stéphane Del Pino, Philippe Hoch, François James, Frédéric Lagoutière, Vincent Millot, Nicolas Seguin, Nicolas Vauchelet.

Merci également à Stéphane Del Pino (déjà cité plus haut) et Pascal Havé, mon équipe de choc pour les soirées de Starcraft II.

Enfin, je tiens à remercier tous mes proches pour leur soutien de tous les instants.

Préambule

Ce mémoire de synthèse rassemble la plupart de nos travaux de recherche réalisés depuis la fin de la thèse [th]. Ils sont regroupés en trois chapitres indépendants correspondant aux trois axes de recherche acquis au cours de la thèse et lors de différents séjours postdoctoraux (au Laboratoire Jacques-Louis Lions, puis au Laboratoire MAPMO). Cependant l'organisation de ce mémoire ne suit pas nécessairement ce parcours.

Le chapitre 1 résume les travaux [A4, A7, A9, A15] qui portent sur l'utilisation des espaces à poids afin de décrire le comportement à l'infini des solutions de problèmes elliptiques en domaine non borné. Nous commençons par présenter nos travaux sur les équations de Navier-Stokes et d'Oseen en domaine extérieur, décrivant un écoulement de fluide visqueux et incompressible autour d'un obstacle borné. Une attention particulière est portée à la description du sillage apparaissant derrière l'obstacle durant l'écoulement. Nous rappelons ensuite les propriétés principales d'une classe particulière d'espaces de Sobolev à poids qui a été initialement utilisée pour résoudre le problème extérieur de Laplace et dont on utilisera dans la suite du chapitre. Nous poursuivons par présenter l'étude de solutions explicites des équations d'Oseen effectuée en collaboration avec Chérif Amrouche et Hamid Bouzit. Enfin, nous terminons le chapitre par un travail réalisé en collaboration avec Hela Louati et Mohamed Meslameni sur le système div-rot en domaine extérieur.

Le chapitre 2 est consacré à la simulation numérique, basée sur des schémas volumes finis, de lois de conservation hyperboliques et présente les travaux [A10, A11, A12, A13, A16]. Nous avons choisi de présenter, en premier lieu, les travaux qui sont directement liés à une application précise. Aussi, nous commençons par un problème de trafic piétonnier décrit par une loi de conservation avec une contrainte sur le flux. Ce travail a débuté dans le cadre du projet ANR jcyj CoToCoLa et a été fait en collaboration avec Boris Andreianov, Carlotta Donadello et Massimiliano D. Rosini. Nous continuons avec un travail effectué lors du séjour postdoctoral au Laboratoire MAPMO dans le cadre du projet ANR blanc Methode et en collaboration avec Stéphane Cordier, Frédéric Darboux, Olivier Delestre, François James et Carine Lucas. L'objectif était proposer un modèle basé sur les équations de Saint-Venant, pour décrire le ruissellement d'eau sur des surfaces agricoles en prenant en compte les effets des sillons sans devoir représenter explicitement ces derniers. Nous poursuivons par un travail réalisé en collaboration avec Antoine Perasso, sur l'étude de la persistance ou non d'une infection au sein d'une population. Le modèle repose sur un système couplé d'une équation différentielle et d'une équation de transport structuré en charge d'infection. Enfin, nous terminons le chapitre par un travail effectué en collaboration avec Boris Andreianov, Carlotta Donadello et Shyam Sundar Ghoshal dans le cadre du projet CoToCoLa, sur la caractérisation des états atteignables d'un système

triangulaire de lois de conservation. Dans les travaux [A11] et [A13], nous présenterons brièvement les résultats théoriques qui ont été illustrés par des simulations ou qui ont motivé les choix dans les schémas numériques.

Le chapitre 3, qui résume les travaux [A8, N4], traite des méthodes numériques, appelées méthodes de bases réduites qui permettent de réduire les coûts et les temps de calcul dans les problèmes paramétriques. Cette partie a été réalisée lors du séjour postdoctoral au Laboratoire Jacques-Louis Lions. Nous commençons par l'application de ces méthodes aux équations de Maxwell pour des problèmes de balayage de fréquence d'appareils à circuits micro-ondes. Ce travail a été fait en collaboration avec Valentín de la Rubia et Yvon Maday. Nous terminons le chapitre par un travail en collaboration avec Yvon Maday sur l'application des méthodes de bases réduites au calcul de l'énergie électronique de molécules en chimie quantique.

Enfin, dans le quatrième et dernier chapitre qui est très court, nous présentons de manière succincte quelques travaux actuellement en cours ou en projet.

Comme les chapitres 1, 2 et 3 sont indépendants, nous avons choisi de commencer par une introduction dans chacun d'eux pour présenter chaque thématique et nos démarches respectifs. Par ailleurs, afin de simplifier l'exposé, certains résultats (en particulier dans le chapitre 1) sont présentés sous une forme simplifiée par rapport à ceux des articles correspondants. Enfin, nous avons choisi dans ce mémoire, de ne pas présenter les travaux [A14] et [N5] car, soit ils n'entrent pas dans les thématiques des trois premiers chapitres, soit ce sont des travaux récents qui demandent d'être mûris.

Publication de l'auteur

Articles publiés ou acceptés pour publication

- [A16] B. ANDREIANOV, C. DONADELLO, U. RAZAFISON, M. D. ROSINI : Qualitative behaviour and numerical approximation of solutions to conservation laws with non-local point constraints on the flux and modeling of crowd dynamics at the bottlenecks, à paraître dans *ESAIM Math. Model. Numer. Anal.*
- [A15] H. LOUATI, M. MESLAMENI, U. RAZAFISON : *Weighted L^p theory for vector potential operators in three-dimensional exterior domains*, à paraître dans *Math. Methods Appl. Sci.*
- [A14] A. PERASSO, U. RAZAFISON : *Identifiability for recovering the mortality rate in an age-structured population dynamics models*, à paraître dans *Inverse Probl. Sci. Eng.*
- [A13] B. ANDREIANOV, C. DONADELLO, S. S. GHOSHAL, U. RAZAFISON : *On the attainable set for a class of triangular systems of conservation laws*, *J. Evol. Equ.*, **15** (2015), no. 3, 503–532
- [A12] B. ANDREIANOV, C. DONADELLO, U. RAZAFISON, M. D. ROSINI : *Riemann problems with non-local point constraints and capacity drop*, *Math. Biosci. Eng.*, **12** (2015), no. 2, 259–278.
- [A11] A. PERASSO, U. RAZAFISON : *Asymptotic behavior and numerical simulations for an infection load-structured epidemiological model; application to the transmission of prion pathologies*, *SIAM J. Appl. Math.*, **74** (2014), no. 5, 1571–1597.
- [A10] U. RAZAFISON, S. CORDIER, O. DELESTRE, F. DARBOUX, C. LUCAS, F. JAMES : *A shallow water model for the numerical simulation of overland flow on surfaces with ridges and furrows*, *Eur. J. Mech. B Fluids*, **31** (2012), 44–52.
- [A9] C. AMROUCHE, H. BOUZIT, U. RAZAFISON : *On the two and three dimensional Oseen potentials*, *Potential Anal.*, **34** (2011), no. 2, 163–179.
- [A8] V. DE LA RUBIA, U. RAZAFISON, Y. MADAY : *Reliable fast frequency sweep for microwave devices via the reduced-basis method*, *IEEE. Trans. Microwave Theory Tech.*, **57** (2009), no. 12 (1), 2923–2937.
- [A7] U. RAZAFISON : *The stationary Navier-Stokes equations in 3D exterior domains. An approach in anisotropically weighted L^q spaces*, *J. Differential Equations*, **245** (2008), 2785–2801.
- [A6] C. AMROUCHE, U. RAZAFISON : *The stationary Oseen equations in \mathbb{R}^3 . An approach in weighted Sobolev spaces*, *J. Math. Fluid Mech.*, **9** (2007), no. 2, 211–225.
- [A5] C. AMROUCHE, U. RAZAFISON : *Weighted Sobolev spaces for a scalar model of the stationary Oseen equations in \mathbb{R}^3* , *J. Math. Fluid Mech.*, **9** (2007), no. 2, 181–210.

-
- [A4] U. RAZAFISON : *Anisotropic weighted L^p spaces for the stationary exterior 3 D-problem of Oseen*, *J. Math. Anal. Appl.*, **323** (2006), no. 1, 275–292.
- [A3] C. AMROUCHE, U. RAZAFISON : *On the Oseen problem in three-dimensional exterior domains*, *Anal. Appl. (Singap.)*, **4** (2006), no. 2, 133–162.
- [A2] C. AMROUCHE, U. RAZAFISON : *Anisotropically weighted Poincaré-type inequalities; Application to the Oseen problem*, *Math. Nachr.*, **274** (2006), no 9–10, 931–947.
- [A1] T. Z. BOULMEZAOUD, U. RAZAFISON : *On the steady Oseen problem in the whole space*, *Hiroshima Math. J.*, **35** (2005), no. 3, 371–401.

Notes et Comptes Rendus de l'Académie des Sciences

- [N5] S. DEL PINO, U. RAZAFISON, D. YAKOUBI : *Une borne inférieure pour la constante de la condition inf-sup pour l'opérateur de divergence*, *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I*, **346** (2008), no. 9–10, 533–538.
- [N4] Y. MADAY, U. RAZAFISON : *A reduced basis method applied to the Restricted Hartree-Fock equations*, *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I*, **346** (2008), no. 3–4, 243–248.
- [N3] C. AMROUCHE, U. RAZAFISON : *Weighted estimates for the Oseen problem in \mathbb{R}^3* , *Appl. Math. Lett.*, **19** (2006), no. 1, 56–62.
- [N2] C. AMROUCHE, U. RAZAFISON : *On the existence of solutions in weighted Sobolev spaces for the exterior Oseen problem*, *C. R. Math. Acad. Sci. Paris, Ser. I*, **341** (2005), no. 9, 587–592.
- [N1] C. AMROUCHE, U. RAZAFISON : *Espaces de Sobolev avec poids et équation scalaire d'Oseen dans \mathbb{R}^n* , *C. R. Math. Acad. Sci. Paris, Ser. I*, **337** (2003), no. 12, 761–766.

Actes de congrès

- [C5] O. DELESTRE, U. RAZAFISON : *Numerical scheme for a viscous shallow water system including new friction laws of second order : validation and application*, *SimHydro 2014 : Modelling of rapid transitory flows, 11-13 juin 2014, Sophia Antipolis*.
- [C4] A. PERASSO, U. RAZAFISON : *Infection load structured SI model with exponential velocity and external source of contamination*, *Proceedings of the World Congress on Engineering, Vol. I* (2013), 263–267.
- [C3] C. AMROUCHE, U. RAZAFISON : *Isotropically and anisotropically weighted Sobolev spaces for the Oseen equations*, *Advances in Mathematical Fluid Mechanics, Springer, Berlin* (2010), 1–24.
- [C2] C. AMROUCHE, U. RAZAFISON : *The Oseen equations in \mathbb{R}^n and weighted Sobolev spaces*, *Monografías del Seminario Matemático García de Galdeano*, **31**, (2004), 41–49.
- [C1] C. AMROUCHE, U. RAZAFISON : *Study of the scalar Oseen equation*, *Monografías del Seminario Matemático García de Galdeano*, **27**, (2003), 57–64.

Thèse

[Th] U. RAZAFISON : Théorie L^p avec poids pour les équations d'Oseen dans des domaines non bornés, *Thèse de Doctorat de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour*, Pau, 2004.

N. B. Les articles [A1, A2, A3, A5, A6] font partie des travaux de thèse.



Chapitre 1

Espaces à poids et problèmes elliptiques en domaine non borné

1.1 Introduction

Ce chapitre porte sur l'analyse théorique d'équations elliptiques posées dans des domaines non bornés tels que l'espace entier ou des domaines extérieurs (c'est-à-dire des complémentaires de compacts). Nous présentons nos travaux sur les équations de Navier-Stokes (section 1.2), d'Oseen (sections 1.2 et 1.4), ainsi que sur le système div-rot (section 1.5). Ces équations sont liées aux problèmes d'écoulements stationnaires de fluides visqueux et incompressibles autour d'obstacles.

Dans un problème posé dans un domaine non borné, il est nécessaire de décrire le comportement à l'infini des solutions. Nous utilisons pour cela des espaces à poids polynomiaux. Le rôle de ces derniers est de contrôler le comportement à l'infini des fonctions considérées. De plus, ils présentent l'avantage de donner une grande liberté de choix quant au comportement à l'infini des fonctions (décroissance forte, modérée ou croissance polynomiale). Les poids n'ont aucune influence sur les propriétés locales des fonctions : les espaces de Sobolev à poids utilisés ont été construits pour coïncider localement avec les espaces de Sobolev usuels. En conséquence tous les théorèmes de traces restent valables dans ces espaces à poids. Cela permet de prendre en compte les conditions au bord des domaines extérieurs.

Dans la section 1.3, nous rappelons quelques propriétés importantes de la famille d'espaces à poids utilisés dans les sections 1.4 et 1.5. Cette famille a été initialement introduite par Hanouzet [72] afin d'avoir une formulation variationnelle de l'équation de Laplace dans un demi-espace. Elle a ensuite été étudiée et généralisée par Le Roux [87], Giroire [64], Amrouche-Girault-Giroire [6, 7] et utilisée dans de nombreux travaux. Notons que dans la thèse [th], nous avons utilisé cette classe pour résoudre les équations d'Oseen.

1.2 Les équations de Navier-Stokes en domaine extérieur de \mathbb{R}^3 [A4, A7]

On considère ici les équations de Navier-Stokes décrivant un écoulement stationnaire de fluide visqueux incompressible autour d'un obstacle borné. Pour cela, considérons un compact \mathcal{B} de \mathbb{R}^3 représentant un obstacle rigide et notons $\Omega = \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{B}$ le domaine de l'écoulement de bord $\partial\Omega$. Le système de coordonnées est placé au centre de masse de l'obstacle que nous

supposons immobile. Le problème s'écrit alors

$$\begin{aligned} -\nu\Delta\mathbf{u} + \rho\mathbf{u} \cdot \nabla\mathbf{u} + \nabla p &= \rho\mathbf{f} & \text{dans } \Omega, \\ \operatorname{div}\mathbf{u} &= 0 & \text{dans } \Omega, \\ \mathbf{u} &= \mathbf{u}_* & \text{sur } \partial\Omega, \\ \lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow +\infty} \mathbf{u}(\mathbf{x}) &= \mathbf{u}_\infty. \end{aligned} \tag{1.1}$$

Dans (1.1), les données sont la viscosité du fluide ν , sa densité ρ , les forces extérieures appliquées au fluide \mathbf{f} , le champ de vitesses au bord de l'obstacle \mathbf{u}_* et le champ de vitesses à l'infini $\mathbf{u}_\infty \in \mathbb{R}^3$. Sans perte de généralité, on suppose que $\mathbf{u}_\infty = h(1, 0, 0)^t$ avec $h > 0$. Les inconnues sont le champ de vitesses \mathbf{u} et la pression p .

Une propriété importante du problème est l'existence d'une zone derrière l'obstacle durant l'écoulement, appelée le sillage, dans laquelle le taux de convergence du champ de vitesses \mathbf{u} vers \mathbf{u}_∞ est plus faible qu'en dehors. Il est alors important de prendre en compte cette propriété dans la description du comportement à l'infini des solutions.

À notre connaissance, les premiers travaux sur (1.1) sont l'œuvre de Leray [88] qui prouve l'existence de solutions faibles ayant une intégrale de Dirichlet finie, c'est-à-dire,

$$\int_{\Omega} |\nabla\mathbf{u}|^2 d\mathbf{x} < +\infty. \tag{1.2}$$

Les solutions satisfaisant (1.2) sont appelées les \mathcal{D} -solutions (on pourra aussi consulter [55, 57, 85]). Le comportement asymptotique de ces \mathcal{D} -solutions et l'existence du sillage ont ensuite été étudiés par Finn [53, 54] et Babenko [17]. Par ailleurs, Finn introduit la classe des solutions *physiquement raisonnables* (ou \mathcal{PR} -solutions), c'est-à-dire, satisfaisant

$$|\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \mathbf{u}_\infty| = O(|\mathbf{x}|^{-1/2-\epsilon}), \quad \text{si } \mathbf{u}_\infty \neq \mathbf{0}, \tag{1.3}$$

où $\epsilon > 0$ peut être arbitrairement petit. Le lecteur pourra aussi consulter [35, 46, 49, 50, 56, 57, 58].

Les équations d'Oseen

Pour étudier le problème (1.1), il est naturel de commencer par étudier des problèmes linéaires qui l'approchent. En linéarisant (1.1) autour de la vitesse à l'infini \mathbf{u}_∞ , on obtient les équations d'Oseen :

$$\begin{aligned} -\nu\Delta\mathbf{v} + \lambda\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial x_1} + \nabla p &= \mathbf{f} & \text{dans } \Omega, \\ \operatorname{div}\mathbf{v} &= 0 & \text{dans } \Omega, \\ \mathbf{v} &= \mathbf{v}_* & \text{sur } \partial\Omega, \\ \lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow +\infty} \mathbf{v}(\mathbf{x}) &= \mathbf{0}, \end{aligned} \tag{1.4}$$

où $\lambda = \rho h > 0$. Intéressons nous au comportement à l'infini de la solution fondamentale d'Oseen notée $(\mathcal{O}, \mathcal{P})$ et qui s'écrit dans \mathbb{R}^3 :

$$\mathcal{O}_{ij} = \left(\delta_{ij} \Delta - \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \Phi(\mathbf{x}) \quad , \quad \mathcal{P}_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi} \frac{x_i}{|\mathbf{x}|^3}, \quad (1.5)$$

où

$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi\lambda} \int_0^{\lambda s(\mathbf{x})/2\nu} \frac{1 - e^{-t}}{t} dt \quad (1.6)$$

et

$$s(\mathbf{x}) = |\mathbf{x}| - x_1. \quad (1.7)$$

Les comportements à l'infini de la vitesse fondamentale d'Oseen et de ses dérivées sont les suivant [57] :

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\mathbf{x}) &= O(|\mathbf{x}|^{-1} (1 + s(\mathbf{x}))^{-1}) \quad , \quad \nabla \mathcal{O} = O(|\mathbf{x}|^{-3/2} (1 + s(\mathbf{x}))^{-3/2}) \\ \partial^2 \mathcal{O}(\mathbf{x}) &= O(|\mathbf{x}|^{-2} (1 + s(\mathbf{x}))^{-2}) \quad , \quad \frac{\partial \mathcal{O}}{\partial x_1} = O(|\mathbf{x}|^{-2} (1 + s(\mathbf{x}))^{-1}). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Le terme $s(\mathbf{x})$ montre ici l'existence du sillage. En effet, dans l'ensemble

$$\mathbf{W} = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, s(\mathbf{x}) \leq 1 \} \quad (1.9)$$

qui représente une parabolôïde symétrique par rapport à l'axe $(0, x_1)$ et ouverte dans la direction $x_1 > 0$, la vitesse fondamentale d'Oseen \mathcal{O} décroît comme $|\mathbf{x}|^{-1}$. En revanche, dans l'ensemble

$$\mathbf{S} = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, s(\mathbf{x}) \geq |\mathbf{x}|/2 \}, \quad (1.10)$$

\mathcal{O} décroît comme $|\mathbf{x}|^{-2}$ montrant ainsi la meilleure décroissance de \mathcal{O} à l'extérieur du sillage \mathbf{W} .

Notre objectif a alors été de chercher des solutions de (1.1) et de (1.4) ayant un comportement à l'infini similaire à la solution fondamentale d'Oseen. Il est donc naturel de choisir le poids anisotrope :

$$\eta_\beta^\alpha(\mathbf{x}) = (1 + |\mathbf{x}|)^\alpha (1 + s(\mathbf{x}))^\beta, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R}, \quad (1.11)$$

et de considérer l'espace de Lebesgue à poids

$$L_{\alpha, \beta}^q(\Omega) = \left\{ u \in \mathcal{D}'(\Omega), \eta_\beta^\alpha u \in L^q(\Omega) \right\}.$$

Cette approche a été utilisée par Farwig [46, 47] dans un cadre hilbertien et nos travaux dans [A4] et [A7] en sont une extension au cadre des espaces de Banach.

Par ailleurs, nos travaux de thèse [Th], ont porté sur l'analyse des équations d'Oseen. Les résultats principaux obtenus sont de deux natures :

- ▷ Nous avons étudié les propriétés des espaces à poids anisotropes ($\beta \neq 0$). En particulier, nous avons établi des résultats de densité et des résultats complets sur les inégalités de type Poincaré généralisant celles obtenues par Farwig [47].
- ▷ Nous avons prouvé des résultats d'existence, d'unicité et de régularité des équations d'Oseen dans le cadre des espaces à poids isotropes ($\beta = 0$). Ces espaces et certaines de leurs propriétés seront rappelés dans la section 1.3.

Nos travaux dans [A4] étendent l'étude des équations d'Oseen réalisée dans la thèse, au cadre des espaces à poids anisotropes afin de tenir compte de l'existence du sillage. Pour cela, introduisons les espaces où seront définies les solutions. Pour les champs de vitesses, nous définissons

$$W_{\alpha,\beta}^{2,q}(\Omega) = \left\{ v \in L_{\alpha-1,\beta}^q(\Omega), \nabla v \in L_{\alpha-1/2,\beta}^q(\Omega), \partial^2 v \in L_{\alpha,\beta}^q(\Omega) \right\}$$

et

$$\widetilde{W}_{\alpha,\beta}^{2,q}(\Omega) = \left\{ v \in W_{\alpha,\beta}^{2,q}(\Omega), \frac{\partial v}{\partial x_1} \in L_{\alpha,\beta}^q(\Omega) \right\}.$$

L'introduction de l'espace $\widetilde{W}_{\alpha,\beta}^{2,q}(\Omega)$ est motivée par la première équation de (1.4). En effet au vu de (1.4), il est naturel de chercher un champ de vitesses avec des dérivées secondes et une dérivée première par rapport à x_1 qui vont avoir le même comportement à l'infini. Notons que, comme indiqué dans l'introduction, on a

$$\widetilde{W}_{\alpha,\beta}^{2,q}(\Omega) \subset W_{loc}^{2,q}(\Omega), \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}.$$

Ainsi les théorèmes de traces usuels s'appliquent et donc si $u \in \widetilde{W}_{\alpha,\beta}^{2,q}(\Omega)$, alors $u|_{\partial\Omega} \in W^{1+1/q',q}(\partial\Omega)$. Pour la pression, nous définissons l'espace

$$X_{\alpha,\beta}^{1,q}(\Omega) = \left\{ v \in L_{\alpha-1/2,\beta-1/2}^q(\Omega), \nabla v \in L_{\alpha,\beta}^q(\Omega) \right\}.$$

Nous avons commencé par étudier le problème d'Oseen dans tout l'espace \mathbb{R}^3 . C'est en effet ce problème qui donne le comportement à l'infini des solutions. Le premier résultat central de [A4] est le suivant :

Théorème 1.1 *Soient α et β deux réels satisfaisant*

$$\max\left(0, \frac{1}{2} - \frac{1}{q}\right) < \beta \leq 1 - \frac{1}{q} \quad \text{et} \quad \frac{1}{2} - \frac{1}{q} < \alpha \leq \frac{1}{2} - \frac{1}{q} + \beta. \quad (1.12)$$

Alors pour tout $\mathbf{f} \in L_{\alpha+1/2,\beta}^q(\mathbb{R}^3)$, le problème d'Oseen (1.4) posé dans tout l'espace \mathbb{R}^3 admet une unique solution

$$(\mathbf{v}, p) \in \widetilde{W}_{\alpha+1/2,\beta}^{2,q}(\mathbb{R}^3) \times X_{\alpha+1/2,\beta}^{1,q}(\mathbb{R}^3) \quad (1.13)$$

définie par

$$v_i = \mathcal{O}_{ij} * f_j, \quad p = \mathcal{P}_j * f_j, \quad i = 1, 2, 3,$$

où les indices répétés impliquent une sommation implicite. De plus, on a l'estimation

$$\|\mathbf{v}\|_{\widetilde{W}_{\alpha+1/2,\beta}^{2,q}(\mathbb{R}^3)} + \|p\|_{X_{\alpha+1/2,\beta}^{1,q}(\mathbb{R}^3)} \leq C \|\mathbf{f}\|_{L_{\alpha+1/2,\beta}^q(\mathbb{R}^3)}.$$

L'obtention de ce théorème passe par trois temps :

- ▷ Dans un premier temps, on part des estimations à poids sur la convolution par la solution fondamentale d'Oseen établies par Kračmar-Novotný-Pokorný [83]. En combinant ces estimations sur $\mathcal{P} * \mathbf{f}$ et les inégalités de Poincaré à poids anisotropes établies dans la thèse (voir aussi [A2]), nous avons montré que sous les hypothèses (1.12) et si $\mathbf{f} \in L_{\alpha+1/2,\beta}^q(\mathbb{R}^3)$, alors $\mathcal{P} * \mathbf{f} \in X_{\alpha+1/2,\beta}^{1,q}(\mathbb{R}^3)$. Cependant certaines estimations sur $\mathcal{O} * \mathbf{f}$ de [83] ne sont pas optimales. En particulier, il est prouvé que sous certaines hypothèses sur α et β et si $\mathbf{f} \in L_{\alpha+1/2,\beta}^q(\mathbb{R}^3)$, alors $\mathcal{O} * \mathbf{f} \in L_{\alpha-1/2-\sigma,\beta}^q(\mathbb{R}^3)$ et $\partial^2(\mathcal{O} * \mathbf{f}) \in L_{\alpha+1/2-\sigma,\beta}^q(\mathbb{R}^3)$ pour tout $\sigma > 0$. La question principale ici est alors de savoir si ces estimations peuvent être améliorées, c'est-à-dire, si on peut prendre $\sigma = 0$.

- ▷ Pour cela, dans un deuxième temps, nous avons suivi les idées de Farwig [46, 47] qui consiste à passer par l'étude de la version scalaire des équations d'Oseen :

$$-\Delta u + \lambda \frac{\partial u}{\partial x_1} = f \quad \text{dans } \mathbb{R}^3. \quad (1.14)$$

Cette équation admet comme solution fondamentale, la fonction

$$E(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi|\mathbf{x}|} e^{-\lambda s(\mathbf{x})/2}.$$

Bien que E a un meilleur comportement à l'infini que la vitesse fondamentale d'Oseen \mathcal{O} , on peut facilement voir que E vérifie aussi (1.8). On peut donc lui appliquer les résultats de [83]. Ces estimations peuvent ensuite être améliorés en multipliant (1.14) par une fonction test adéquate, en intégrant et en utilisant en particulier une nouvelle fois, les inégalités de Poincaré à poids anisotropes. À l'issue de cette partie, nous avons établi que sous (1.12) et si $f \in L^q_{\alpha+1/2,\beta}(\mathbb{R}^3)$, alors (1.14) admet une unique solution $u = E * f \in \widetilde{W}^{2,q}_{\alpha+1/2,\beta}(\mathbb{R}^3)$.

- ▷ Enfin, dans un troisième temps, il suffit d'exploiter les résultats sur (1.14) en raisonnant par identification, composante par composante sur les équations d'Oseen.

Notons que dans la thèse [th] (voit aussi [A6]), nous avons montré que deux couples de distributions tempérées solutions du même problème (1.4) posé dans \mathbb{R}^3 , différaient nécessairement d'un couple de polynômes. Nous y reviendrons plus précisément dans la section 1.4. Dans le théorème 1.1, l'unicité de la solution découle du fait que sous les hypothèses (1.12), les espaces $\widetilde{W}^{2,q}_{\alpha+1/2,\beta}(\mathbb{R}^3)$ et $X^{1,q}_{\alpha+1/2,\beta}(\mathbb{R}^3)$ ne contiennent pas de polynômes.

Pour résoudre le problème extérieur (1.4), nous avons suivi la démarche générale développée par Giroire [64], utilisée par la suite dans [3, 7, 9] ainsi que dans la thèse [th, A3] : les problèmes extérieurs linéaires peuvent être résolus en combinant les propriétés obtenues dans l'espace entier \mathbb{R}^3 et celles obtenues dans un domaine borné. Signalons que cette résolution n'est pas immédiate et passe par plusieurs résultats intermédiaires. En particulier, nous présentons le résultat concernant l'unicité des solutions de (1.4).

Proposition 1.2 *Sous les hypothèses (1.12), si la paire $(\mathbf{u}, p) \in \widetilde{W}^{2,q}_{\alpha+1/2,\beta}(\Omega) \times X^{1,q}_{\alpha+1/2,\beta}(\Omega)$ vérifie (1.4) avec $\mathbf{f} = \mathbf{u}_* = \mathbf{0}$, alors $(\mathbf{u}, p) = (\mathbf{0}, 0)$.*

Ce résultat n'est pas surprenant du fait des propriétés d'unicité des solutions de (1.4) dans \mathbb{R}^3 . Le deuxième résultat central de [A4] est le suivant :

Théorème 1.3 *Soit Ω un domaine extérieur de \mathbb{R}^3 de bord $\partial\Omega$ de classe \mathcal{C}^2 . Soient α et β deux réels satisfaisant (1.12). Alors pour tout*

$$\mathbf{f} \in L^q_{\alpha+1/2,\beta}(\Omega) \quad \text{et} \quad \mathbf{v}_* \in W^{1+1/q',q}(\partial\Omega),$$

le problème d'Oseen (1.4) admet une unique solution

$$(\mathbf{v}, p) \in \widetilde{W}^{2,q}_{\alpha+1/2,\beta}(\Omega) \times X^{1,q}_{\alpha+1/2,\beta}(\Omega).$$

De plus, on a l'estimation

$$\|\mathbf{v}\|_{\widetilde{W}^{2,q}_{\alpha+1/2,\beta}(\Omega)} + \|p\|_{X^{1,q}_{\alpha+1/2,\beta}(\Omega)} \leq C \left(\|\mathbf{f}\|_{L^q_{\alpha+1/2,\beta}(\Omega)} + \|\mathbf{v}_*\|_{W^{1+1/q',q}(\partial\Omega)} \right).$$

Les équations de Navier-Stokes

Pour résoudre le problème de Navier-Stokes (1.1), nous introduisons l'opérateur T qui, pour tout $\mathbf{w} \in \widetilde{W}_{\alpha+1/2,\beta}^{2,q}(\Omega)$ associe $\mathbf{v} = T\mathbf{w}$ solution du problème

$$\begin{aligned} -\nu\Delta\mathbf{v} + \lambda\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial x_1} + \nabla p &= \rho\mathbf{f} - \rho\mathbf{w} \cdot \nabla\mathbf{w} \quad \text{dans } \Omega, \\ \operatorname{div}\mathbf{v} &= 0 \quad \text{dans } \Omega, \\ \mathbf{v} &= \mathbf{u}_* - \mathbf{u}_\infty \quad \text{sur } \partial\Omega, \\ \lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow +\infty} \mathbf{v}(\mathbf{x}) &= \mathbf{0}. \end{aligned}$$

L'objectif a alors été de montrer que l'opérateur T admette un point fixe. Pour cela, le travail principal a consisté à montrer une estimation à poids sur le terme non linéaire $\mathbf{w} \cdot \nabla\mathbf{w}$.

Lemme 1.4 *Soit Ω un domaine extérieur de \mathbb{R}^3 de bord $\partial\Omega$ de classe \mathcal{C}^2 . Supposons que $4/3 < q \leq 2$. Si $\mathbf{w} \in \widetilde{W}_{\alpha+1/2,\beta}^{2,q}(\Omega)$, alors $\mathbf{w} \cdot \nabla\mathbf{w} \in L_{2\alpha+1/2,2\beta}^q(\Omega)$ et*

$$\|\mathbf{w} \cdot \nabla\mathbf{w}\|_{L_{2\alpha+1/2,2\beta}^q(\Omega)} \leq C \|\mathbf{w}\|_{\widetilde{W}_{\alpha+1/2,\beta}^{1,q}(\Omega)}^2.$$

Pour montrer ce résultat, nous avons adapté les méthodes utilisées par Farwig [46] qui reposent sur l'établissement de résultats d'injections dans les espaces à poids anisotropes. Par ailleurs, grâce aux injections de Sobolev standards, nous pouvons montrer des propriétés asymptotiques des fonctions de $W_{\alpha,\beta}^{2,q}(\mathbb{R}^3)$. Pour $s \in \mathbb{R}$, notons tout d'abord $[s]$ la partie entière de s .

Théorème 1.5 *Soient $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ des réels et q un entier satisfaisant $3/2 < q < \infty$. Posons $\theta = 2 - 3/q - [2 - 3/q]$. Si $u \in W_{\alpha,\beta}^{2,q}(\mathbb{R}^3)$, alors il existe $C > 0$ tel que*

$$\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad |u(\mathbf{x})| \leq C \eta_{-\beta}^{\theta-\alpha}(\mathbf{x}) \|u\|_{W_{\alpha,\beta}^{2,q}(\mathbb{R}^3)}.$$

Nous avons alors montré le théorème suivant qui est le résultat principal de [A7].

Théorème 1.6 *Soit Ω un domaine extérieur de \mathbb{R}^3 de bord $\partial\Omega$ de classe \mathcal{C}^2 . Supposons que $4/3 < q \leq 2$ et soient α et β deux réels satisfaisant (1.12). Alors, il existe $\delta, \varepsilon > 0$ tel que pour tout*

$$\mathbf{f} \in L_{\alpha+1/2,\beta}^q(\Omega) \quad \text{et} \quad \mathbf{u}_* \in W^{1+1/q',q}(\partial\Omega),$$

satisfaisant

$$\|\mathbf{f}\|_{L_{\alpha+1/2,\beta}^q(\Omega)} \leq \varepsilon \quad \text{et} \quad \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_\infty\|_{W^{1+1/q',q}(\partial\Omega)} \leq \varepsilon,$$

le problème de Navier-Stokes (1.1) admet une unique solution $(\mathbf{u}, p) \in W_{loc}^{2,q}(\overline{\Omega}) \times W_{loc}^{1,q}(\overline{\Omega})$ tel que

$$(\mathbf{u} - \mathbf{u}_\infty, p) \in \widetilde{W}_{\alpha+1/2,\beta}^{2,q}(\Omega) \times X_{\alpha+1/2,\beta}^{1,q}(\Omega) \quad \text{et} \quad \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_\infty\|_{\widetilde{W}_{\alpha+1/2,\beta}^{2,q}(\Omega)} \leq \delta.$$

De plus, il existe $C(\delta) > 0$ tel que

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_\infty\|_{\widetilde{W}_{\alpha+1/2,\beta}^{2,q}(\Omega)} + \|p\|_{X_{\alpha+1/2,\beta}^{1,q}(\Omega)} \leq C(\delta) \left(\|\mathbf{f}\|_{L_{\alpha+1/2,\beta}^q(\Omega)} + \|\mathbf{u}_* - \mathbf{u}_\infty\|_{W^{1+1/q',q}(\partial\Omega)} \right).$$

1.3. Rappels sur les espaces à poids isotropes

Par ailleurs, si on suppose que $3/2 < q < 2$, alors on a le comportement à l'infini suivant :

$$|\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \mathbf{u}_\infty| = O\left(\eta_{-\beta}^{3/2-3/q-\alpha}(\mathbf{x})\right). \quad (1.15)$$

L'ingrédient principal de la preuve consiste à appliquer le théorème de point fixe de Banach en utilisant le théorème 1.3 et le lemme 1.4. Le comportement asymptotique (1.15) est une application directe du théorème 1.5. Notons que ce théorème a été démontré par Farwig [46] dans le cas $q = 2$ avec un comportement asymptotique de $\mathbf{u} - \mathbf{u}_\infty$ meilleur que (1.15). Grâce à (1.15), nous pouvons remarquer que dans le sillage \mathbf{W} , nous avons le comportement à l'infini suivant

$$|\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \mathbf{u}_\infty| = O(|\mathbf{x}|^{3/2-3/q-\alpha}),$$

alors que dans le secteur \mathbf{S} , nous avons

$$|\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \mathbf{u}_\infty| = O\left(|\mathbf{x}|^{3/2-3/q-(\alpha+\beta)}\right).$$

Le réel β étant strictement positif, ces deux comportements à l'infini montrent le meilleur taux de convergence de la vitesse \mathbf{u} vers \mathbf{u}_∞ en dehors du sillage.

Notons aussi que la vitesse \mathbf{u} vérifie $\nabla \mathbf{u} \in L_{\alpha,\beta}^q(\Omega)$ avec $\alpha \geq 0$ et $\beta > 0$. On en déduit alors que \mathbf{u} est une \mathcal{D} -solution dans le sens de (1.2).

Enfin si on suppose de plus, $\beta > 3/2 - 2/q$ et $\alpha > 2 - 3/q$, alors \mathbf{u} est une $\mathcal{P}\mathcal{R}$ -solution dans le sens de (1.3).

1.3 Rappels sur les espaces à poids isotropes

Dans cette section nous rappelons les espaces de Sobolev à poids qui seront utilisés dans les deux dernières sections de ce chapitre. On considère un domaine extérieur Ω de bord $\partial\Omega$.

Nous introduisons tout d'abord le poids isotrope

$$\rho(\mathbf{x}) = (1 + |\mathbf{x}|^2)^{1/2} \quad (1.16)$$

et pour $\alpha \in \mathbb{R}$, l'espace de Lebesgue à poids

$$L_\alpha^q(\Omega) = \{u \in \mathcal{D}'(\Omega), \rho^\alpha u \in L^q(\Omega)\}.$$

Maintenant pour $m \in \mathbb{N}^*$ et $\alpha \in \mathbb{R}$ satisfaisant

$$3/q + \alpha \notin \{1, \dots, m\}, \quad (1.17)$$

on définit l'espace de Sobolev à poids suivant :

$$W_\alpha^{m,q}(\Omega) = \left\{ u \in \mathcal{D}'(\Omega); \forall \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{N}^3, 0 \leq |\boldsymbol{\lambda}| \leq m, \rho^{\alpha-m+|\boldsymbol{\lambda}|} \partial^{\boldsymbol{\lambda}} u \in L^p(\Omega) \right\}.$$

Dans le cas $m = 1$, cet espace devient simplement

$$W_\alpha^{1,q}(\Omega) = \{u \in \mathcal{D}'(\Omega); u \in L_{\alpha-1}^q(\Omega), \nabla u \in L_\alpha^q(\Omega)\}, \quad 3/q + \alpha \neq 1.$$

L'espace $W_\alpha^{m,q}(\Omega)$ est de Banach muni de la norme

$$\|u\|_{W_\alpha^{m,q}(\Omega)} = \left(\sum_{0 \leq |\lambda| \leq m} \|\rho^{\alpha-m+|\lambda|} \partial^\lambda u\|_{L^q(\Omega)}^q \right)^{1/q}.$$

Nous introduisons la semi-norme

$$|u|_{W_\alpha^{m,q}(\Omega)} = \left(\sum_{|\lambda|=m} \|\rho^\alpha \partial^\lambda u\|_{L^q(\Omega)}^q \right)^{1/q}.$$

Afin de simplifier la présentation, nous avons choisi de nous limiter à la définition de l'espace $W_\alpha^{m,q}(\Omega)$ pour des valeurs de α , q et m vérifiant (1.17). Si cette condition n'est pas vérifiée, les inégalités de Poincaré présentées dans la suite ne sont pas valables. Dans ce cas, la définition de l'espace est modifiée par l'ajout d'un poids logarithmique (voir [6, 7, 64]) pour pouvoir établir ces inégalités. Ainsi, les résultats présentés dans les sections 1.4 et 1.5 seront une version simplifiée de ceux de [A9] et [A15].

Notons \mathcal{P}_j l'espace des polynômes de degrés inférieurs ou égal à j , avec la convention que $\mathcal{P}_j = \{0\}$ si $j < 0$ et pour $s \in \mathbb{R}$, notons $[s]$ la partie entière de s . Nous avons alors

$$\mathcal{P}_{[m-3/q-\alpha]} \subset W_\alpha^{m,q}(\Omega).$$

Sous la condition (1.17), nous avons l'inégalité de Poincaré suivante :

$$\forall u \in W_\alpha^{m,q}(\Omega), \quad \inf_{\mu \in \mathcal{P}_{j'}} \|u + \mu\|_{W_\alpha^{m,q}(\Omega)} \leq C |u|_{W_\alpha^{m,q}(\Omega)}, \quad (1.18)$$

où $j' = \min(m-1, [m-3/q-\alpha])$. Autrement dit, la semi-norme $|\cdot|_{W_\alpha^{m,q}(\Omega)}$ est une norme sur l'espace $W_\alpha^{m,q}(\Omega)/\mathcal{P}_{j'}$ équivalente à la norme quotient.

Si $3/q \notin \{1, \dots, m\}$ et si $u \in W_0^{m,q}(\mathbb{R}^3)$ vérifie

$$\forall \lambda \in \mathbb{N}^3 : 0 \leq |\lambda| \leq [m-3/q], \quad \partial^\lambda u(\mathbf{0}) = 0,$$

alors on a l'inégalité de Poincaré suivante :

$$\|u\|_{W_0^{m,q}(\mathbb{R}^3)} \leq C |u|_{W_0^{m,q}(\mathbb{R}^3)}. \quad (1.19)$$

On se réfère à [6, 7] pour les preuves de ces résultats.

Comme indiqué dans l'introduction, les propriétés locales de l'espace $W_\alpha^{m,q}(\Omega)$ coïncident avec celles de l'espace de Sobolev usuel $W^{m,q}(\Omega)$. Ainsi les théorèmes de trace sont valables sur $\partial\Omega$ et on peut alors définir l'espace

$$\mathring{W}_\alpha^{m,q}(\Omega) = \{u \in W_\alpha^{m,q}(\Omega), \gamma_0 u = 0, \gamma_1 u = 0, \dots, \gamma_{m-1} u = 0\}.$$

Dans le cas de tout l'espace, nous avons l'identité $\mathring{W}_\alpha^{m,q}(\Omega) = W_\alpha^{m,q}(\mathbb{R}^3)$. L'espace $\mathcal{D}(\Omega)$ est dense dans $\mathring{W}_\alpha^{m,q}(\Omega)$ et, par conséquent, l'espace dual de $\mathring{W}_\alpha^{m,q}(\Omega)$, noté $W_{-\alpha}^{-m,q'}(\Omega)$ est un espace de distributions.

Nous donnons à présent un résultat d'isomorphisme de l'opérateur de Laplace défini dans tout l'espace, démontré dans [6] et qui sera utile pour la section 1.5. Notons tout d'abords \mathcal{P}_j^Δ l'espace des polynômes harmoniques de \mathcal{P}_j .

Théorème 1.7 (Amrouche-Girault-Giroire [6]). Soient $m \in \mathbb{N}^*$, α et q satisfaisant

$$\alpha \in \mathbb{Z}, \quad 3/q + \alpha \notin]-\infty, 1] \cap \mathbb{Z}, \quad 3/q' - \alpha \notin]-\infty, 1] \cap \mathbb{Z}. \quad (1.20)$$

Alors l'opérateur de Laplace défini par

$$\Delta : W_{\alpha}^{1,q}(\mathbb{R}^3) / \mathcal{P}_{[1-3/q-\alpha]}^{\Delta} \mapsto W_{\alpha}^{-1,q}(\mathbb{R}^3) \perp \mathcal{P}_{[1-3/q'+\alpha]}^{\Delta}$$

est un isomorphisme.

Notons que dans le théorème précédent, la condition (1.20) contient (1.17) pour les espaces considérés.

1.4 Le potentiel d'Oseen dans \mathbb{R}^3 [A9]

Les résultats de [A9] ont été établis pour les équations d'Oseen dans \mathbb{R}^n , $n = 2, 3$. Mais toujours dans un souci de clarté, on se limite au cas $n = 3$.

Considérons donc les équations d'Oseen dans tout l'espace :

$$\begin{aligned} -\Delta \mathbf{u} + \lambda \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_1} + \nabla p &= \mathbf{f} && \text{dans } \mathbb{R}^3, \\ \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0 && \text{dans } \mathbb{R}^3. \end{aligned} \quad (1.21)$$

L'objectif a été d'étudier l'existence de solutions explicites de (1.21) dans le cas où la donnée \mathbf{f} est dans $L^q(\mathbb{R}^3)$ pour tout $1 < q < \infty$.

Rappelons que si \mathbf{f} appartient à $\mathcal{D}(\mathbb{R}^3)$, alors le problème (1.21) possède une solution explicite $(\mathbf{u}^*, p^*) \in \mathcal{C}^{\infty}(\mathbb{R}^3) \times \mathcal{C}^{\infty}(\mathbb{R}^3)$ donnée par

$$u_i^* = \mathcal{O}_{ij} * f_j \quad \text{et} \quad p^* = \mathcal{P}_j * f_j, \quad (1.22)$$

où $(\mathcal{O}, \mathcal{P})$ est la solution fondamentale définie par (1.5)–(1.7). Nous avons vu dans la section 1.2 que cette solution reste définie lorsque \mathbf{f} appartient à $L_{\alpha+1/2,\beta}^q(\mathbb{R}^3)$ sous certaines hypothèses sur α et β . Une question naturelle est alors de savoir si (1.22) est encore définie lorsque \mathbf{f} appartient à $L^q(\mathbb{R}^3)$ pour tout $1 < q < \infty$. Une première réponse est donnée par les propositions 1.8 et 1.9 ci-dessous. La première proposition donne des résultats sur la convolution par la vitesse fondamentale d'Oseen qui sont une conséquence des résultats obtenus dans la thèse [Th] et dans [5].

Proposition 1.8 Si $\mathbf{f} \in L^q(\mathbb{R}^3)$, alors $v.p. \left(\frac{\partial^2 \mathcal{O}}{\partial x_i \partial x_j} * \mathbf{f} \right) \in L^q(\mathbb{R}^3)$, $\frac{\partial \mathcal{O}}{\partial x_1} * \mathbf{f} \in L^q(\mathbb{R}^3)$ et nous avons l'estimation

$$\left\| v.p. \left(\frac{\partial^2 \mathcal{O}}{\partial x_i \partial x_j} * \mathbf{f} \right) \right\|_{L^q(\mathbb{R}^3)} + \left\| \frac{\partial \mathcal{O}}{\partial x_1} * \mathbf{f} \right\|_{L^q(\mathbb{R}^3)} \leq C \|\mathbf{f}\|_{L^q(\mathbb{R}^3)}.$$

Par ailleurs,

(i) si $1 < q < 2$, alors $\mathcal{O} * \mathbf{f} \in L^{\frac{2q}{2-q}}(\mathbb{R}^3)$,

(ii) si $1 < q < 4$, alors $\nabla \mathcal{O} * \mathbf{f} \in L^{\frac{4q}{4-q}}(\mathbb{R}^3)$.

La deuxième proposition donne des résultats sur la convolution par la pression fondamentale d'Oseen et sont établis par exemple dans [57].

Proposition 1.9 Si $f \in L^q(\mathbb{R}^3)$ alors $v.p.(\nabla \mathcal{P} * f) \in L^q(\mathbb{R}^3)$ et

$$\|v.p.(\nabla \mathcal{P} * f)\|_{L^q(\mathbb{R}^3)} \leq C \|f\|_{L^q(\mathbb{R}^3)}.$$

Si de plus $1 < q < 3$, alors $\mathcal{P} * f \in L^{\frac{3q}{3-q}}(\mathbb{R}^3)$.

Mais en général, si f appartient à $L^q(\mathbb{R}^3)$ avec $q > 3$, alors $\mathcal{P} * f$ n'est pas nécessairement défini. Il suffit de le voir sur le potentiel de Riesz d'ordre 1 défini par (voir [116]) :

$$I_1 f = F_1 * f = (-\Delta)^{1/2} f, \quad \text{où } F_1(\mathbf{x}) = \frac{1}{\gamma(1)} \frac{1}{|\mathbf{x}|^2},$$

avec $\gamma(1) = 2\pi^{3/2}\Gamma(1/2)$ et où Γ est la fonction gamma d'Euler. Prenons l'exemple d'une fonction f définie par

$$f(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \text{si } |\mathbf{x}| < 1, \\ \frac{1}{|\mathbf{x}|} & \text{si } |\mathbf{x}| > 1. \end{cases}$$

Il est alors clair que f appartient à $L^q(\mathbb{R}^3)$ si $q > 3$. Mais pour tout $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ tel que $|\mathbf{x}| < 1/2$, on a

$$I_1 f(\mathbf{x}) = \frac{1}{\gamma(1)} \int_{\{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^3, |\mathbf{y}| > 1\}} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} \frac{1}{|\mathbf{y}|} d\mathbf{y} \geq \frac{C}{\gamma(1)} \int_{\{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^3, |\mathbf{y}| > 1\}} \frac{1}{|\mathbf{y}|^3} = +\infty.$$

Nous avons alors proposé d'apporter une modification à la convolution par la pression fondamentale afin qu'elle reste définie pour $q > 3$. Pour cela, en adaptant les idées de Shimamura et Mizuta [113], pour $f \in L^q(\mathbb{R}^3)$, nous avons défini l'opérateur modifié suivant :

$$\mathcal{P}_i f(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} (\mathcal{P}_i(\mathbf{x} - \mathbf{y}) - \chi_{[3, \infty[}(q) \mathcal{P}_i(-\mathbf{y})) f(\mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad \text{p.p.t. } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \quad (1.23)$$

et pour $f \in L^q(\mathbb{R}^3)$,

$$\mathcal{P} f(\mathbf{x}) = \mathcal{P}_j f_j(\mathbf{x}), \quad \text{p.p.t. } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad (1.24)$$

où χ_I est la fonction caractéristique de l'intervalle I . Formellement nous pouvons constater que dans le cas d'une fonction $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^3)$, l'opérateur modifié défini en (1.23) revient à considérer le reste du développement de Taylor d'ordre zéro, c'est-à-dire,

$$\mathcal{P}_i f(\mathbf{x}) = \mathcal{P}_i * f(\mathbf{x}) - \mathcal{P}_i * f(\mathbf{0}),$$

lorsque $q > 3$. Nous avons alors montré le résultat suivant :

Théorème 1.10 Soit $q \neq 3$. Les opérateurs

$$\mathcal{P}_i : L^q(\mathbb{R}^3) \mapsto W_0^{1,q}(\mathbb{R}^3) \quad \text{et} \quad \mathcal{P} : L^q(\mathbb{R}^3) \mapsto W_0^{1,q}(\mathbb{R}^3)$$

définis en (1.23) et (1.24) respectivement, sont continus. De plus, $\mathcal{P} f$ est solution de l'équation de Laplace suivant :

$$\Delta \mathcal{P} f = \operatorname{div} f \quad \text{dans } \mathbb{R}^3.$$

Remarquons que si $1 < q < 3$, grâce à l'égalité topologique et algébrique

$$W_0^{1,q}(\mathbb{R}^3) = \left\{ u \in L^{\frac{3q}{3-q}}(\mathbb{R}^3), \nabla u \in L^q(\mathbb{R}^3) \right\},$$

nous retrouvons la proposition 1.9. Rappelons aussi que l'hypothèse $q \neq 3$ découle de (1.17). Les points clés de la démonstration dans le cas $q > 3$ sont les suivants :

▷ La définition (1.23) permet d'établir l'estimation

$$|\mathcal{P}_i f(\mathbf{x})| \leq C |\mathbf{x}|^{1-3/q} \|f\|_{L^q(\mathbb{R}^3)}$$

qui entraîne que $\mathcal{P}_i f$ appartient à $L_{-1-\sigma}^q(\mathbb{R}^3)$, pour tout $\sigma > 0$.

▷ Cette dernière estimation permet, à son tour, de montrer que

$$\left\| \frac{\partial}{\partial x_j} \mathcal{P}_i f \right\|_{L^q(\mathbb{R}^3)} \leq C \|f\|_{L^q(\mathbb{R}^3)}.$$

▷ Les deux premiers points impliquent en particulier que $\mathcal{P}_i * f \in W_{loc}^{1,q}(\mathbb{R}^3)$ ce qui donnent un sens à $\mathcal{P}_i f(\mathbf{x})$ pour tout $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ et en particulier, nous avons $\mathcal{P}_i f(\mathbf{0}) = 0$. Nous pouvons alors appliquer l'inégalité de Poincaré (1.19) pour établir le résultat.

Nous avons utilisé la même idée pour modifier l'opérateur convolution par la vitesse fondamentale. Pour $\mathbf{f} \in L^q(\mathbb{R}^3)$ nous avons introduit l'opérateur suivant :

$$(\mathcal{O}\mathbf{f})_i(\mathbf{x}) = \mathcal{O}_{ij} f_j(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} (\mathcal{O}_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) - \chi_{[2,\infty[}(q) \mathcal{O}_{ij}(-\mathbf{y}) - \chi_{[4,\infty[}(q) \mathbf{x}' \cdot \nabla' \mathcal{O}_{ij}(-\mathbf{y})] f_j(\mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad (1.25)$$

où $\mathbf{x}' = (0, x_2, x_3)$ et $\nabla' = \left(0, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3}\right)$.

Définissons à présent l'espace

$$Z_0^{2,q}(\mathbb{R}^3) = \left\{ u \in W_0^{2,q}(\mathbb{R}^3), \frac{\partial u}{\partial x_1} \in L^q(\mathbb{R}^3) \right\}.$$

Nous avons alors le résultat suivant :

Théorème 1.11 *Soit $q \neq 3$. L'opérateur*

$$\mathcal{O} : L^q(\mathbb{R}^3) \mapsto Z_0^{2,p}(\mathbb{R}^3)$$

défini en (1.25) est continu.

Les théorèmes 1.10 et 1.11 fournissent des solutions explicites au problème d'Oseen (1.21) pour une donnée $\mathbf{f} \in L^q(\mathbb{R}^3)$, $1 < q < \infty$. Mais, comme nous l'avons déjà indiqué dans la section 1.2, l'unicité est assurée à des polynômes près. Plus précisément, l'espace de polynômes est le suivant :

$$\mathcal{N}_k = \left\{ (\zeta, \mu) \in \mathcal{P}_k \times \mathcal{P}_{k-1}^\Delta, \quad -\Delta \zeta + \lambda \frac{\partial \zeta}{\partial x_1} + \nabla \mu = \mathbf{0}, \operatorname{div} \zeta = 0 \right\},$$

pour $k \in \mathbb{N}$. Nous pouvons à présent donner le résultat principal de [A9] dans le cas tri-dimensionnel.

Théorème 1.12 Soient $q \neq 3$ et \mathbf{f} appartenant à $L^q(\mathbb{R}^3)$. Alors le problème d'Oseen (1.21) admet au moins une solution $(\mathbf{u}, p) \in Z_0^{2,q}(\mathbb{R}^3) \times W_0^{1,q}(\mathbb{R}^3)$ défini par

$$u_i = \mathcal{O}_{ij} f_j + \zeta_i, \quad p = \mathcal{P}_j f_j + \mu,$$

où $(\zeta, \mu) \in \mathcal{N}_{[2-3/q]}$. De plus, nous avons l'estimation

$$\|\partial^2 \mathbf{u}\|_{L^q(\mathbb{R}^3)} + \left\| \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_1} \right\|_{L^q(\mathbb{R}^3)} + \|\nabla p\|_{L^q(\mathbb{R}^3)} \leq C \|\mathbf{f}\|_{L^q(\mathbb{R}^3)}.$$

1.5 Le problème div-rot en domaine extérieur de \mathbb{R}^3 [A15]

Soit Ω' un ouvert borné simplement connexe de \mathbb{R}^3 à bord $\partial\Omega$ Lipschitzien et soit $\Omega = \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Omega'}$ le domaine extérieur à Ω' . On s'est intéressé ici au problème suivant : étant donné un champs de vecteur \mathbf{u} tel que $\operatorname{div} \mathbf{u} = 0$, on cherche un champs de vecteur $\boldsymbol{\psi}$ satisfaisant :

$$\mathbf{u} = \operatorname{rot} \boldsymbol{\psi} \quad \text{et} \quad \operatorname{div} \boldsymbol{\psi} = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega, \quad (1.26)$$

où \mathbf{u} et $\boldsymbol{\psi}$ satisfont des conditions de bord adéquates.

Ce système possède de nombreuses applications dans les problèmes d'écoulement de fluides visqueux autour d'obstacles. On peut citer par exemple [63] pour l'étude des équations de Stokes en domaine extérieur où une formulation en terme de vorticit  et fonction courant est utilisée ou [8] toujours pour l'étude des  quations de Stokes en domaine extérieur mais avec des conditions de bord non standards. On rencontre aussi ce syst me dans de nombreuses applications en  lectrostatique ou en magn tostatique (voir par exemple [80]).

Ce syst me a  t   tudi  par Girault dans les espaces   poids en utilisant un cadre hilbertien ([61, 62]). Notre objectif dans [A15] a  t  d' tendre ces travaux au cas des espaces de Banach.

Le probl me de Laplace

L' tude d'unicit  du syst me (1.26) passe par des rel vements harmoniques ad quats de conditions de bord. Nous avons alors  tudi  les probl mes de Dirichlet et de Neumann pour l'op rateur de Laplace en domaine ext rieur :

$$-\Delta u = f \quad \text{dans} \quad \Omega, \quad u = g \quad \text{sur} \quad \partial\Omega \quad (1.27)$$

et

$$\Delta u = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega, \quad \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = g \quad \text{sur} \quad \partial\Omega, \quad (1.28)$$

o  \mathbf{n} d signe la normale ext rieure   $\partial\Omega$. Ces probl mes ont  t   tudi s par Giroire [64] dans un cadre hilbertien et par Amrouche-Girault-Giroire [7] dans l'espace $W_0^{1,q}(\Omega)$, avec $1 < q < \infty$. Nos travaux dans [A15] g n ralisent ceux de [7] en consid rant d'autres comportements   l'infini. Remarquons tout d'abord que contrairement au cas d'un domaine born , l'unicit  de la solution de (1.27) n'est pas garantie. Cela d pend du comportement   l'infini de la solution recherch e. Introduisons l'espace

$$\mathcal{A}_{\alpha,q}^\Delta = \left\{ \zeta \in W_\alpha^{1,q}(\Omega); \Delta \zeta = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega, \quad \zeta = 0 \quad \text{sur} \quad \partial\Omega \right\}.$$

Nous avons montr  le r sultat suivant :

Proposition 1.13 Soit Ω un domaine extérieur de bord $\partial\Omega$ lipschitzien si $q = 2$ et de classe $\mathcal{C}^{1,1}$ si $q \neq 2$. Soit α vérifiant (1.20). Alors

$$\mathcal{A}_{\alpha,q}^\Delta = \left\{ v(\lambda) - \lambda, \lambda \in \mathcal{P}_{[1-3/q-\alpha]}^\Delta \right\},$$

où $v(\lambda) \in W_0^{1,2}(\Omega) \cap W_\alpha^{1,q}(\Omega)$ est l'unique solution de

$$\Delta v(\lambda) = 0 \quad \text{dans } \Omega, \quad v(\lambda) = \lambda \quad \text{sur } \partial\Omega. \quad (1.29)$$

En particulier $\mathcal{A}_{\alpha,q}^\Delta = \{0\}$ si $\alpha > 1 - 3/q$.

Le théorème ci-dessous résout le problème (1.27).

Théorème 1.14 Soit Ω un domaine extérieur de bord $\partial\Omega$ lipschitzien si $q = 2$ et de classe $\mathcal{C}^{1,1}$ si $q \neq 2$. Soient α vérifiant (1.20). Si $f \in W_\alpha^{-1,q}(\Omega)$ et $g \in W^{1/q',q}(\partial\Omega)$ vérifient la condition de compatibilité

$$\forall \lambda \in \mathcal{A}_{-\alpha,q'}^\Delta, \quad \langle f, \lambda \rangle_{W_\alpha^{-1,q}(\Omega) \times \dot{W}_{-\alpha}^{1,q'}(\Omega)} = \left\langle g, \frac{\partial \lambda}{\partial \mathbf{n}} \right\rangle_{W^{1/q',q}(\partial\Omega) \times W^{-1/q',q'}(\partial\Omega)},$$

alors le problème de Laplace (1.27) admet une unique solution $u \in W_\alpha^{1,q}(\Omega) / \mathcal{A}_{\alpha,q}^\Delta$.

Comme pour le problème d'Oseen dans la section 1.2, la démonstration de ce théorème repose sur la combinaison des propriétés de l'opérateur de Laplace dans tout l'espace (théorème 1.7) et dans des domaines bornés. Pour pouvoir appliquer le théorème 1.7, on passe par des extensions de la donnée f à \mathbb{R}^3 . Mais ces extensions n'étant pas nécessairement orthogonaux aux polynômes de $\mathcal{P}_{[1-3/q'+\alpha]}^\Delta$, nous avons utilisé les techniques introduites par Giroire [64] qui consiste, dans un premier temps, à montrer l'existence de solutions pour $\alpha < 0$. En effet dans ce cas, l'espace $\mathcal{P}_{[1-3/q'+\alpha]}^\Delta$ est réduit à $\{0\}$ (rappelons qu'ici α est un entier relatif). Dans un deuxième temps, on procède par dualité afin d'obtenir l'existence de solution pour $\alpha > 0$. Pour le problème de Neumann harmonique, nous introduisons

$$\mathcal{N}_{\alpha,q}^\Delta = \left\{ \zeta \in W_\alpha^{1,q}(\Omega); \Delta \zeta = 0 \quad \text{dans } \Omega, \quad \frac{\partial \zeta}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega \right\}$$

et nous avons la caractérisation suivante :

Proposition 1.15 Soit Ω un domaine extérieur de bord $\partial\Omega$ lipschitzien si $q = 2$ et de classe $\mathcal{C}^{1,1}$ si $q \neq 2$. Soit α vérifiant (1.20). Alors

$$\mathcal{N}_{\alpha,q}^\Delta = \left\{ v(\lambda) - \lambda, \lambda \in \mathcal{P}_{[1-3/q-\alpha]}^\Delta \right\},$$

où $v(\lambda) \in W_0^{1,2}(\Omega) \cap W_\alpha^{1,q}(\Omega)$ est l'unique solution de

$$\Delta v(\lambda) = 0 \quad \text{dans } \Omega, \quad \frac{\partial v(\lambda)}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial \lambda}{\partial \mathbf{n}} \quad \text{sur } \partial\Omega. \quad (1.30)$$

En particulier $\mathcal{N}_{\alpha,q}^\Delta = \{0\}$ si $\alpha > 1 - 3/q$ et $\mathcal{N}_{\alpha,q}^\Delta = \mathbb{R}$ si $-3/q < \alpha \leq 1 - 3/q$.

Nous avons ensuite montré le résultat suivant :

Théorème 1.16 Soit Ω un domaine extérieur de bord $\partial\Omega$ lipschitzien si $q = 2$ et de classe $\mathcal{C}^{1,1}$ si $q \neq 2$. Soient α vérifiant (1.20). Si $g \in W^{-1/q,q}(\partial\Omega)$ vérifie la condition de compatibilité

$$\forall \lambda \in \mathcal{N}_{-\alpha,q'}^\Delta(\Omega), \quad \langle g, \lambda \rangle_{W^{-1/q,q}(\partial\Omega) \times W^{1/q,q'}(\partial\Omega)} = 0,$$

alors le problème de Laplace (1.28) admet une unique solution $u \in W_\alpha^{1,q}(\Omega) / \mathcal{N}_{\alpha,q}^\Delta(\Omega)$.

Le système *div-rot*

Nous introduisons tout d'abord les espaces suivants :

$$H_\alpha^q(\mathbf{rot}, \Omega) = \{\mathbf{v} \in L_\alpha^q(\Omega), \mathbf{rot} \mathbf{v} \in L_{\alpha+1}^q(\Omega)\},$$

$$H_\alpha^q(\text{div}, \Omega) = \{\mathbf{v} \in L_\alpha^q(\Omega), \text{div} \mathbf{v} \in L_{\alpha+1}^q(\Omega)\},$$

et

$$X_\alpha^q(\Omega) = H_\alpha^q(\mathbf{rot}, \Omega) \cap H_\alpha^q(\text{div}, \Omega)$$

munis de leurs normes naturelles respectives. Observons que l'espace $\mathcal{D}(\overline{\Omega})$ est dense dans $H_\alpha^q(\mathbf{rot}, \Omega)$ et $H_\alpha^q(\text{div}, \Omega)$. Ainsi, une fonction \mathbf{v} de $H_\alpha^q(\text{div}, \Omega)$ admet une trace normale $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$ appartenant à $W^{-1/q, q}(\partial\Omega)$ et une fonction \mathbf{v} de $H_\alpha^q(\mathbf{rot}, \Omega)$ admet une trace tangentielle $\mathbf{v} \times \mathbf{n}$ appartenant à $W^{-1/q, q}(\partial\Omega)$.

Comme dans les études précédentes, nous commençons tout d'abord par résoudre le problème div-rot dans tout l'espace \mathbb{R}^3 afin de se focaliser uniquement sur le comportement à l'infini des solutions. Introduisons l'ensemble de polynômes :

$$\mathcal{G}_k = \{\nabla \lambda, \lambda \in \mathcal{P}_{k+1}^\Delta\}.$$

Nous avons le résultat suivant :

Théorème 1.17 Soit α vérifiant (1.20). Si $\mathbf{u} \in H_\alpha^q(\text{div}, \mathbb{R}^3)$ vérifie $\text{div} \mathbf{u} = 0$ et

$$\langle \mathbf{rot} \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda} \rangle_{W_\alpha^{-1, q}(\mathbb{R}^3) \times W_{-\alpha}^{1, q'}(\mathbb{R}^3)} = 0, \quad \forall \boldsymbol{\lambda} \in \mathcal{P}_{[1-3/q'+\alpha]}^\Delta, \quad \text{si } \alpha > 1 + 3/q', \quad (1.31)$$

alors il existe un unique champ de vecteur $\boldsymbol{\psi} \in W_\alpha^{1, q}(\mathbb{R}^3) / \mathcal{G}_{[1-3/q-\alpha]}$ vérifiant

$$\mathbf{u} = \mathbf{rot} \boldsymbol{\psi} \quad \text{et} \quad \text{div} \boldsymbol{\psi} = 0 \quad \text{dans } \mathbb{R}^3.$$

La condition de compatibilité (1.31) découle du fait que nous cherchons le potentiel vecteur $\boldsymbol{\psi}$ comme solution de l'équation de Laplace

$$-\Delta \boldsymbol{\psi} = \mathbf{rot} \mathbf{u} \quad \text{dans } \mathbb{R}^3.$$

Or cette équation peut être résolue par le théorème 1.7 à condition que $\mathbf{rot} \mathbf{u}$ soit orthogonal aux polynômes de $\mathcal{P}_{[1-3/q'+\alpha]}^\Delta$. Cependant observons que (1.31) est naturellement vérifiée lorsque $\alpha < 1 + 3/q'$ car $\mathbf{rot} \mathbf{u}$ est naturellement orthogonale aux polynômes de degré au plus un. Ainsi, (1.31) doit être imposée uniquement dans le cas $\alpha > 1 + 3/q'$. Signalons qu'un potentiel vecteur peut toujours exister sans la condition (1.31) dans le cas $\alpha > 1 + 3/q'$. En revanche, il ne sera pas nécessairement à divergence nulle et s'obtient en appliquant un argument de dualité au théorème 1.17. Nous renvoyons à [A15] pour ce résultat.

Intéressons nous à présent au système div-rot posé dans un domaine extérieur. Nous avons le premier théorème ci-dessous.

Théorème 1.18 Soit Ω un domaine extérieur de bord $\partial\Omega$ lipschitzien si $q = 2$ et de classe $\mathcal{C}^{1,1}$ si $q \neq 2$. Soit α vérifiant (1.20). Si $\mathbf{u} \in H_\alpha^q(\text{div}, \Omega)$ vérifie

$$\text{div} \mathbf{u} = 0 \quad \text{et} \quad \langle \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, 1 \rangle_{W^{-1/q, q}(\partial\Omega) \times W^{1/q, q'}(\partial\Omega)} = 0,$$

alors il existe un champ de vecteur $\boldsymbol{\psi} \in W_\alpha^{1, q}(\Omega)$ vérifiant

$$\mathbf{u} = \mathbf{rot} \boldsymbol{\psi} \quad \text{et} \quad \text{div} \boldsymbol{\psi} = 0 \quad \text{dans } \Omega.$$

L'idée principale de la preuve consiste à construire une extension adéquate de \mathbf{u} qui appartient à $H_\alpha^q(\text{div}, \mathbb{R}^3)$, qui soit à divergence nulle et qui vérifie la condition de compatibilité (1.31) dans le cas $\alpha > 1 + 3/q'$. Il suffit ensuite d'appliquer le théorème 1.17 pour trouver un potentiel vecteur définie dans tout l'espace et d'en prendre sa restriction sur Ω . L'avantage de ce résultat est sa validité pour tout comportement à l'infini de \mathbf{u} . En revanche, le potentiel vecteur construit n'est pas nécessairement unique. Afin d'assurer l'unicité du potentiel vecteur, nous imposons une condition sur le bord $\partial\Omega$: soit la nullité de sa composante normale, soit la nullité de sa composante tangentielle. Introduisons tout d'abord les espaces

$$Y_{\alpha,N}^q(\Omega) = \{\mathbf{w} \in X_\alpha^q(\Omega), \text{div } \mathbf{w} = 0, \text{rot } \mathbf{w} = \mathbf{0} \text{ dans } \Omega, \mathbf{w} \times \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega\}$$

et

$$Y_{\alpha,T}^q(\Omega) = \{\mathbf{w} \in X_\alpha^q(\Omega), \text{div } \mathbf{w} = 0, \text{rot } \mathbf{w} = \mathbf{0} \text{ dans } \Omega, \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega\}.$$

Le résultat ci-dessous donne des caractérisations de ces noyaux.

Proposition 1.19 *Soit Ω un domaine extérieur de bord $\partial\Omega$ lipschitzien si $q = 2$ et de classe $\mathcal{C}^{1,1}$ si $q \neq 2$. Soit α vérifiant (1.20). Alors nous avons*

(i)

$$Y_{\alpha,N}^q(\Omega) = \left\{ \nabla(w(\lambda) - \lambda), \lambda \in \mathcal{D}_{[1-3/q-\alpha]}^\Delta \right\}$$

où $w(\lambda) \in W_0^{1,2}(\Omega) \cap W_\alpha^{1,q}(\Omega)$ est l'unique solution du problème (1.29). En particulier, $Y_{\alpha,N}^q(\Omega) = \{0\}$ si $\alpha > 1 - 3/q$.

(ii)

$$Y_{\alpha,T}^q(\Omega) = \left\{ \nabla(w(\lambda) - \lambda), \lambda \in \mathcal{D}_{[1-3/q-\alpha]}^\Delta \right\}$$

où $w(\lambda) \in W_0^{1,2}(\Omega) \cap W_\alpha^{1,q}(\Omega)$ est l'unique solution du problème (1.30). En particulier, $Y_{\alpha,T}^q(\Omega) = \{0\}$ si $\alpha > -3/q$.

Le théorème suivant donne l'existence et l'unicité du potentiel vecteur auquel on impose une composant tangentielle nulle sur $\partial\Omega$.

Théorème 1.20 *Soit Ω un domaine extérieur de bord $\partial\Omega$ lipschitzien si $q = 2$ et de classe $\mathcal{C}^{1,1}$ si $q \neq 2$. Soit α vérifiant (1.20). Si $\alpha < 3/q'$, $3/q' + \alpha \neq 2$ et $\mathbf{u} \in H_\alpha^q(\text{div}, \Omega)$ vérifie*

$$\text{div } \mathbf{u} = 0 \quad \text{et} \quad \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur} \quad \partial\Omega,$$

alors il existe un unique champ de vecteur $\boldsymbol{\psi} \in W_\alpha^{1,q}(\Omega) / Y_{\alpha-1,N}^q(\Omega)$ vérifiant

$$\mathbf{u} = \text{rot } \boldsymbol{\psi}, \quad \text{div } \boldsymbol{\psi} = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\psi} \times \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur} \quad \partial\Omega.$$

Si on impose la nullité de la composante normale, nous avons alors le résultat suivant :

Théorème 1.21 *Soit Ω un domaine extérieur de bord $\partial\Omega$ lipschitzien si $q = 2$ et de classe $\mathcal{C}^{1,1}$ si $q \neq 2$. Soit α vérifiant (1.20). Si $\alpha < 1 + 3/q'$, $3/q' + \alpha \neq 2$ et $\mathbf{u} \in H_\alpha^q(\text{div}, \Omega)$ vérifie*

$$\text{div } \mathbf{u} = 0 \quad \text{et} \quad \langle \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, 1 \rangle_{W^{-1/q,q}(\partial\Omega) \times W^{1/q,q'}(\partial\Omega)} = 0,$$

alors il existe un unique champ de vecteur $\boldsymbol{\psi} \in W_\alpha^{1,q}(\Omega) / Y_{\alpha-1,T}^q(\Omega)$ vérifiant

$$\mathbf{u} = \text{rot } \boldsymbol{\psi}, \quad \text{div } \boldsymbol{\psi} = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur} \quad \partial\Omega.$$

La preuve de ces deux théorèmes utilisent, dans un premier temps, les mêmes ingrédients que celle du théorème 1.18 : on construit une extension adéquate de \mathbf{u} dans l'espace entier \mathbb{R}^3 pour récupérer un potentiel vecteur défini dans \mathbb{R}^3 . À partir de ce stade, la différence est qu'on utilise les théorèmes 1.14 et 1.16 pour effectuer des relèvements adéquats de la trace tangentielle pour le théorème 1.20 et la trace normale pour le théorème 1.21. Une conséquence importantes de ces deux théorèmes est l'obtention des résultats sur la décomposition de Helmholtz.

Théorème 1.22 *Soit Ω un domaine extérieur de bord $\partial\Omega$ lipschitzien si $q = 2$ et de classe $\mathcal{C}^{1,1}$ si $q \neq 2$. Soit α vérifiant (1.20). Si $\alpha < 3/q'$, $3/q' + \alpha \neq 2$ et $\mathbf{g} \in L_\alpha^q(\Omega)$, alors \mathbf{g} admet la décomposition unique*

$$\mathbf{g} = \nabla\varphi + \mathbf{rot}\boldsymbol{\psi},$$

où $\varphi \in W_\alpha^{1,q}(\Omega)$ et $\boldsymbol{\psi} \in W_\alpha^{1,q}(\Omega)$ vérifie

$$\operatorname{div}\boldsymbol{\psi} = 0 \quad \text{dans } \Omega \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\psi} \times \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega.$$

Théorème 1.23 *Soit Ω un domaine extérieur de bord $\partial\Omega$ lipschitzien si $q = 2$ et de classe $\mathcal{C}^{1,1}$ si $q \neq 2$. Soient α et q vérifiant (1.20). Si $\alpha < 3/q'$, $3/q' + \alpha \neq 2$ et $\mathbf{g} \in L_\alpha^q(\Omega)$, alors \mathbf{g} admet la décomposition unique*

$$\mathbf{g} = \nabla\varphi + \mathbf{rot}\boldsymbol{\psi},$$

où $\varphi \in W_\alpha^{1,q}(\Omega)$ et $\boldsymbol{\psi} \in W_\alpha^{1,q}(\Omega)$ vérifie

$$\operatorname{div}\boldsymbol{\psi} = 0 \quad \text{dans } \Omega \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega.$$

Une suite possible des travaux présentés sur le système div-rot est de considérer des domaines extérieurs où les deux premiers nombres de Betti ne s'annulent pas. Cela a été étudié dans des domaines bornés ([11, 82]). À notre connaissance, un des premiers travaux dans les domaines non bornés est dû à Neudert et von Wahl [102]. Toutefois, ils ont considéré des potentiels vecteur réguliers, qui sont au moins de classe \mathcal{C}^1 .

Chapitre 2

Lois de conservation hyperboliques et méthodes volumes finis

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons nos travaux concernant le développement et la mise en œuvre de schémas numériques, basés sur les méthodes volumes finis, pour l'approximation de modèles issus du trafic piétonnier (section 2.2), de la mécanique des fluides (section 2.3), de l'épidémiologie (section 2.4) et d'applications en contrôle (section 2.5). Pour les trois premières sections, les schémas sont utilisés pour réaliser des simulations afin de reproduire et d'étudier certains phénomènes décrits ou contenus dans les modèles. Les équations intervenant dans tous les problèmes considérés sont principalement des lois de conservation hyperboliques qui peuvent s'écrire, dans leur version scalaire, sous la forme

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(f(u)) = 0, & (t, x) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}, \\ u(0, x) = \bar{u}(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (2.1)$$

exprimant la conservation de la quantité inconnue u . Le flux $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction régulière de u . Sur le plan théorique, il est bien connu que les solutions de (2.1) peuvent faire apparaître des discontinuités au cours du temps. On introduit alors la notion de solution faible au sens des distributions. Mais la solution faible du problème (2.1) n'étant pas unique, on introduit un critère supplémentaire appelé condition d'entropie pour sélectionner l'unique solution physique. On parle alors de la solution faible entropique. Pour plus de détails, on se réfère par exemple à [40, 45, 65, 66]. Sur le plan numérique, les méthodes volumes finis sont des méthodes bien adaptées pour le calcul des solutions de (2.1). Rappelons brièvement le principe de base de ces méthodes (pour plus de détails, on pourra consulter [45, 65, 66, 89, 90]). Le domaine (ici l'espace entier \mathbb{R}) est discrétisé en une suite croissante de points $(x_{j+1/2})_{j \in \mathbb{Z}}$, avec $x_{j+1/2} - x_{j-1/2} = \Delta x$ le pas d'espace que l'on supposera toujours constant. On définit les cellules $K_j = [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}[$ et les centres des cellules $x_j = \frac{1}{2}(x_{j-1/2} + x_{j+1/2})$. Le temps est discrétisé en une suite de temps $t^n = n \Delta t$ où Δt est le pas de temps supposé aussi constant. On définit ensuite

$$u_j^0 = \frac{1}{\Delta x} \int_{K_j} \bar{u}(x) dx \quad (2.2)$$

pour pouvoir calculer la suite $(u_j^n)_{j \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}^*}$ où u_j^n est une approximation de la moyenne de u dans la cellule K_j au temps t^n , c'est-à-dire

$$u_j^n \simeq \frac{1}{\Delta x} \int_{K_j} u(t^n, x) dx.$$

Pour calculer la suite $(u_j^n)_{j \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}^*}$, on intègre (2.1) sur $[t^n, t^{n+1}[\times K_j$ et on aboutit à la formule de récurrence :

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathcal{F}_{j+1/2}^n - \mathcal{F}_{j-1/2}^n), \quad (2.3)$$

où

$$\mathcal{F}_{j+1/2}^n = F(u_j^n, u_{j+1}^n) \quad \text{et} \quad F: \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad (2.4)$$

étant le flux numérique qui est une approximation de

$$\frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(t, x_{j+1/2})) dt$$

et c'est elle qui caractérise le schéma.

Il est connu qu'un schéma volumes finis de (2.1) convergent, ne converge pas nécessairement vers l'unique solution entropique de (2.1). Pour cela, des schémas numériques, dits entropiques (voir par exemple [89, 90]) qui vérifient la condition d'entropie au niveau discret ont été développés. De manière standard, nous avons utilisé une classe particulière de schémas entropiques : les schémas monotones où le flux numérique vérifie les propriétés suivantes :

- ▷ la fonction F est lipschitzienne de $[\inf_{\mathbb{R}} \bar{u}, \sup_{\mathbb{R}} \bar{u}]^2$ vers \mathbb{R} ,
- ▷ pour tout $a \in [\inf_{\mathbb{R}} \bar{u}, \sup_{\mathbb{R}} \bar{u}]$, $F(a, a) = f(a)$ (consistance),
- ▷ la fonction F est croissante par rapport à sa première variable et décroissante par rapport à sa deuxième variable.

Dans le cas des lois de conservations scalaires, Un exemple d'un tel flux que nous avons considéré est celui de Godounov [67] qui repose sur la résolution exacte de problèmes de Riemann locaux, c'est-à-dire, lorsque la donnée initiale est constante par morceaux du type :

$$\bar{u}(x) = \begin{cases} u_\ell & \text{si } x < 0, \\ u_r & \text{si } x > 0. \end{cases}$$

Le flux de Godounov est donné par (voir par exemple Osher [103]) :

$$F(a, b) = \begin{cases} \min_{[a,b]} f & \text{si } a \leq b, \\ \max_{[b,a]} f & \text{si } a > b. \end{cases} \quad (2.5)$$

Cependant l'inconvénient de la méthode de Godounov est qu'elle peut être coûteuse. Ainsi dans le cas des systèmes de lois de conservation (les équations de Saint-Venant dans la section 2.3), nous avons utilisé des solveurs de Riemann approchés (par exemple le flux de Harten, Lax et van Leer défini en (2.19)).

2.2 Un modèle macroscopique de trafic piétonnier [A12, A16]

Le modèle ADR

Les problèmes issus du trafic piétonnier peuvent être décrits par plusieurs approches. Une première est l'approche microscopique qui consiste à décrire l'évolution de chaque piéton, soumis à un ensemble de règles, par une équation différentielle. Une deuxième est l'approche macroscopique où on adopte le point de vue de la dynamique des fluides qui consiste à décrire l'évolution de la densité de piétons. Nous avons choisi cette deuxième approche et nous nous sommes placés dans le cadre d'une évacuation de salle avec une sortie représentée par sa capacité, c'est-à-dire, par le nombre maximal de piétons par unité de temps pouvant passer à travers elle. Nous avons considéré pour cela le modèle proposé par Andreianov, Donadello et Rosini dans [13] (ADR), qui s'écrit comme une loi de conservation scalaire avec une contrainte non locale sur le flux :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial f(\rho)}{\partial x} = 0 \quad (t, x) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}, \quad (2.6a)$$

$$\rho(0, x) = \bar{\rho}(x) \quad x \in \mathbb{R}, \quad (2.6b)$$

$$f(\rho(t, 0\pm)) \leq p \left(\int_{\mathbb{R}^-} w(x) \rho(t, x) dx \right) \quad t \in \mathbb{R}^+, \quad (2.6c)$$

où $\rho(t, x)$ est la densité moyenne de piétons en $x \in \mathbb{R}$ et au temps $t \in \mathbb{R}^+$, $\bar{\rho} : \mathbb{R} \rightarrow [0, R]$ est la densité initiale, $R > 0$ est la densité maximale et le flux f est défini de $[0, R]$ vers \mathbb{R}^+ . Dans la contrainte (2.6c), la fonction $p : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ représente la capacité de la sortie localisée en $x = 0$. Elle dépend d'une moyenne pondérée de piétons se trouvant derrière la sortie avec un poids $w : \mathbb{R}^- \rightarrow \mathbb{R}^+$. La contrainte est dite non locale dans le sens où la fonction p dépend de la solution ρ . Elle est une extension de celle introduite par Colombo et Goatin [36] :

$$f(\rho(t, 0\pm)) \leq q(t), \quad (2.7)$$

où q est une fonction prescrite. Enfin toujours dans (2.6c), $\rho(t, 0-)$ est la trace de ρ à gauche de la contrainte et elle est définie par

$$\lim_{\varepsilon \downarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \int_0^{+\infty} \int_{-\varepsilon}^0 |\rho(t, x) - \rho(t, 0-)| \phi(t, x) dx dt = 0 \quad \forall \phi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^2; \mathbb{R}).$$

La trace à droite $\rho(t, 0+)$ est définie de manière similaire. On suppose les conditions suivantes sur le modèle :

- (F) Le flux f est lipschitzien, vérifie $f(0) = f(R) = 0$ et il existe $\sigma \in]0, R]$ tel que $f'(\rho)(\sigma - \rho) > 0$ p.p.t. $\rho \in [0, R] \setminus \{\sigma\}$,
- (P) la fonction p est lipschitzienne de $[0, R]$ vers $]0, f(\sigma)]$ et est décroissante,
- (W) la fonction w appartient à $L^\infty(\mathbb{R}^-; \mathbb{R}^+)$, est croissante, $\|w\|_{L^1(\mathbb{R}^-; \mathbb{R}^+)} = 1$ et il existe $i_w > 0$ tel que $w(x) = 0$ p.p.t. $x \leq -i_w$.

La condition (F) traduit le fait que le flux est nul lorsqu'il n'y a pas de piétons ou lorsque la vitesse des piétons est nulle. Un exemple typique que nous avons utilisé est le flux dû à Lighthill-Whitham [91] et Richards [111] (LWR) et est défini par

$$f(\rho) = \rho v(\rho) = \rho v_{\max} \left(1 - \frac{\rho}{R} \right), \quad (2.8)$$

où v_{\max} est la vitesse maximale des piétons. Avec **(P)** et **(W)**, on impose que la capacité de la sortie dépend d'un certain nombre de piétons se trouvant dans un voisinage proche de la sortie. Ainsi les piétons se trouvant loin de la sortie n'ont aucune influence sur cette dernière. Par ailleurs, l'hypothèse **(P)** impose que la capacité chute pour les hautes densités traduisant l'encombrement de la sortie. Dans la figure 2.1, nous donnons un exemple de la fonctions flux et de la capacité p .

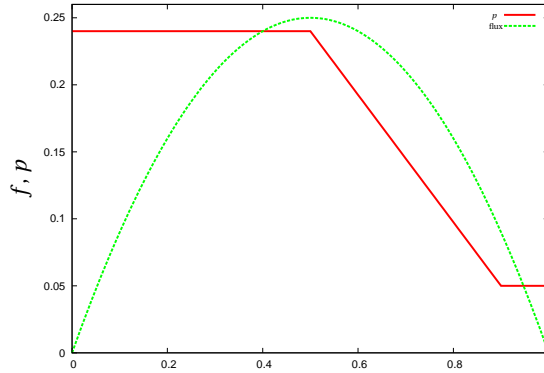


FIGURE 2.1 – le flux LWR pour $v_{\max} = R = 1$ et un exemple de fonction p

La chute de la capacité d'une porte ou d'une sortie lors de l'engorgement de ces dernières, a été étudiée expérimentalement, par exemple dans [32, 76, 84]. Cependant à notre connaissance, peu de modèles macroscopiques capable de la reproduire existent dans la littérature. On peut citer celui proposé par Colombo et Rosini [38] et également étudié dans [34, 37, 39, 112]. Nous nous sommes intéressés à deux conséquences liées à cette chute de capacité et qui ont été observées ou reproduites expérimentalement : l'effet "Faster-Is-Slower" [73, 104, 115] et le paradoxe de Braess [24, 77]. Le premier stipule qu'une augmentation de la vitesse des piétons entraîne un plus grand encombrement de la sortie et donc une augmentation du temps d'évacuation. Le deuxième indique qu'un obstacle bien placé avant la sortie peut réguler le trafic piétonnier, donc réduire l'encombrement de la sortie et entraîner une baisse du temps d'évacuation. Notons que cette description proposé par Hughes [77] est une variante du paradoxe de Braess initialement décrit dans [24] où un réseau routier est considéré avec une distribution initiale de voitures. Chaque voiture a une destination donnée et chaque automobiliste choisit la meilleure route en terme de temps de déplacement. Il est montré qu'ajouter une nouvelle route dans le réseau peut augmenter les temps de déplacement des automobilistes et donc réduire l'efficacité du réseau entier.

Donnons à présent la définition de solution du modèle ADR introduite dans [13] qui consiste à ajouter des termes pour la contribution de la contrainte, dans la définition classique de solution entropique.

Définition 2.1 On suppose que les conditions **(F)**, **(W)** sont satisfaites et que p est une fonction décroissante de $[0, R]$ vers $]0, f(\sigma)]$, éventuellement multivaluée. On dit que $\rho \in L^\infty(\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}; [0, R]) \cap \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+; L^1_{loc}(\mathbb{R}; [0, R]))$ est une solution faible entropique de (2.6) si les conditions suivantes sont satisfaites :

- (i) il existe $q \in L^\infty(\mathbb{R}^+; [0, f(\sigma)])$ tel que pour toute fonction test $\phi \in \mathcal{C}_c(\mathbb{R}^2; \mathbb{R}^+)$ et pour

tout $k \in [0, R]$

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}} \left[|\rho - k| \frac{\partial \phi}{\partial t} + \text{sign}(\rho - k)(f(\rho) - f(k)) \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] dx dt \\ & + 2 \int_{\mathbb{R}^+} \left[1 - \frac{q(t)}{f(\sigma)} \right] f(k) \phi(t, 0) dt \\ & + \int_{\mathbb{R}} |\bar{\rho}(x) - k| \phi(0, x) dx \geq 0 \end{aligned}$$

et

$$f(\rho(t, 0\pm)) \leq q(t) \quad \text{p.p.t. } t \in \mathbb{R}^+.$$

(ii) De plus on a la relation

$$q(t) = p \left(\int_{\mathbb{R}^-} w(x) \rho(t, x) dx \right) \quad \text{p.p.t. } t \in \mathbb{R}^+. \quad (2.9)$$

Cette définition est une extension de celle introduite dans [36] pour le problème de Cauchy (2.6a), (2.6b), avec la contrainte prescrite (2.7) (voir aussi [14, 34]). Sous les hypothèses (F), (W) et (P), il est montré dans [13] que pour toute donnée initiale $\bar{\rho} \in L^\infty(\mathbb{R}; [0, R])$, le problème (2.6) admet une unique solution entropique.

Schéma numérique et résultat de convergence

Pour approcher (2.6), nous avons utilisé le schéma développé par Andreianov, Goatin et Seguin dans [14] pour le problème (2.6a), (2.6b) et (2.7). L'idée consiste à partir d'un schéma volumes finis monotone standard et à limiter le flux numérique avec la contrainte à l'interface où celle-ci est localisée. Ainsi en adaptant les notations de l'introduction pour notre propos, introduisons tout d'abord l'indice j_c tel que $x_{j_c+1/2} = 0$, la position de la contrainte. Le schéma s'écrit donc :

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathcal{F}_{j+1/2}^n - \mathcal{F}_{j-1/2}^n \right), \quad (2.10)$$

où

$$\mathcal{F}_{j+1/2}^n = \begin{cases} F(\rho_j^n, \rho_{j+1}^n) & \text{si } j \neq j_c, \\ \min \{ F(\rho_j^n, \rho_{j+1}^n), q^n \} & \text{si } j = j_c, \end{cases} \quad (2.11)$$

où $F : [0, R]^2 \rightarrow \mathbb{R}$ est un flux monotone et q^n est une approximation de $q(t^n)$. Dans le cas de la contrainte non locale (2.9), on définit

$$q^n = p \left(\Delta x \sum_{j \leq j_c} w(x_j) \rho_j^n \right). \quad (2.12)$$

Dans [14] il est montré que sous la condition de Courant-Friedrichs-Lewy

$$\text{Lip}(F) \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \frac{1}{2}, \quad (2.13)$$

et pour tout $T > 0$, le schéma (2.10)–(2.11) converge en norme $L^1([0, T] \times \mathbb{R})$ vers l'unique solution entropique de (2.6a), (2.6b) et (2.7). Ce résultat est un des ingrédients pour montrer la convergence du schéma (2.10)–(2.11)–(2.12). Introduisons ρ_Δ et q_Δ les fonctions définies par

$$\rho_\Delta(t, x) = \rho_j^n, \quad \text{pour } (t, x) \in [t^n, t^{n+1}] \times K_j, \quad (2.14)$$

et

$$q_\Delta(t) = q^n, \quad \text{pour } t \in [t^n, t^{n+1}[. \quad (2.15)$$

Nous avons eu besoin de deux autres ingrédients afin de montrer la convergence du schéma. Le premier consiste à établir un résultat de stabilité qui est une version discrète de celui montré dans [14].

Proposition 2.2 *Soient la donnée initiale $\bar{\rho} \in L^\infty(\mathbb{R}; [0, R])$ et deux fonctions constantes par morceaux de la forme (2.15), q_Δ et \hat{q}_Δ . Soient ρ_Δ et $\hat{\rho}_\Delta$ deux solutions approchées de (2.6a), (2.6b) et (2.7) associée respectivement à q_Δ et \hat{q}_Δ . Alors, pour tout $T > 0$, on a l'estimation*

$$\|\rho_\Delta - \hat{\rho}_\Delta\|_{L^1([0, T] \times \mathbb{R})} \leq 2T \|q_\Delta - \hat{q}_\Delta\|_{L^1([0, T])}.$$

Le deuxième ingrédient est une estimation BV sur l'approximation de la contrainte non locale (2.9). Toutefois nous avons supposé une régularité supplémentaire sur le poids w .

Proposition 2.3 *Soit q_Δ défini par (2.9) et (2.15). Si la fonction w est lipschitzienne, alors sous la condition de Courant-Friedrichs-Lewy (2.13) et pour tout $T > 0$, il existe une constante $C > 0$ dépendant uniquement de T, f, F, p, w et R tel que*

$$|q_\Delta|_{BV([0, T])} \leq C.$$

Théorème 2.4 *Si la fonction w est lipschitzienne, alors sous la condition de Courant-Friedrichs-Lewy (2.13) et pour tout $T > 0$, le schéma défini par (2.10), (2.11) et (2.12) converge en norme $L^1([0, T] \times \mathbb{R})$ vers l'unique solution entropique de (2.6).*

La preuve de ce théorème peut être résumée en trois points :

- ▷ le théorème de compacité d'Helly permet de montrer qu'à une sous-suite près, q_Δ converge en norme $L^1([0, T])$ vers une fonction $q \in L^\infty([0, T])$
- ▷ le résultat de convergence du schéma (2.10)–(2.11) prouvé dans [14] et la proposition 2.2 permettent de montrer qu'à une sous-suite près, ρ_Δ converge en norme $L^1([0, T] \times \mathbb{R})$ vers une fonction $\rho \in L^1([0, T] \times \mathbb{R})$ l'unique solution entropique de (2.6a), (2.6b) et (2.7) associée à q
- ▷ L'unicité de cette solution entropique permet l'identification $q(t) = p \left(\int_{\mathbb{R}^-} w(x) \rho(t, x) dx \right)$.

Le schéma a été validé sur l'exemple explicite construit dans [13] et l'étude de sa précision a montré que la limitation du flux numérique à la contrainte ne détériorait pas l'ordre 1 du schéma de base comme il a déjà été constaté dans [14].

Simulations numériques

Nous présentons ici deux tests numériques pour montrer la faculté du modèle ADR à reproduire les deux effets liés à la chute de la capacité de la porte, décrits plus haut.

Nous considérons un couloir représenté par le segment $[-6, 1]$ avec une sortie en $x = 0$ et le flux LWR $f(\rho) = \rho v_{\max}(1 - \rho)$. Le poids est défini par $w(x) = 2(1 + x)\chi_{[-1, 0]}(x)$, la densité initiale $\bar{\rho} = \chi_{[-5.75, -2]}$ et la capacité p est la fonction continue représentée dans la figure 2.1. La figure 2.2 représente le temps d'évacuation en fonction de la vitesse maximale v_{\max} des piétons lorsque celle-ci varie dans l'intervalle $[0.1, 5]$. On observe l'existence d'une vitesse optimale $v_{\max} = 1$ pour laquelle le temps d'évacuation est minimale. On observe aussi qu'augmenter la vitesse au-delà de l'optimale ne fait qu'augmenter le temps d'évacuation exprimant ainsi l'effet "Faster-Is-Slower".

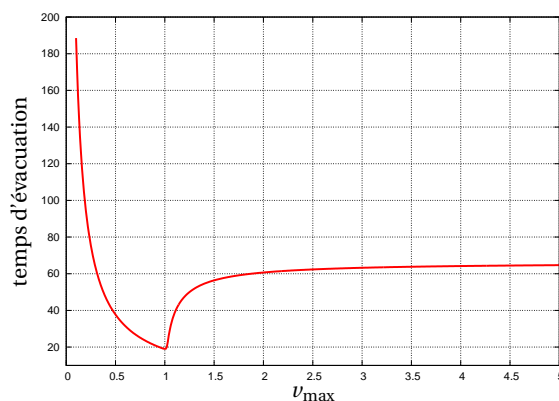


FIGURE 2.2 – Temps d'évacuation en fonction de la vitesse v_{\max}

Dans le deuxième test, nous gardons le couloir précédent avec la sortie en $x = 0$ et nous y plaçons en plus un obstacle que nous supposons être une porte 1.15 fois plus grande que la sortie. La figure 2.3 représente l'évolution du temps d'évacuation lorsque la position l'obstacle varie dans l'intervalle $[-1.9, -0.01]$. À partir de la position -1.8 , on constate que le temps d'évacuation est inférieur à celui sans obstacle et le minimum est atteint pour la position -1.72 .

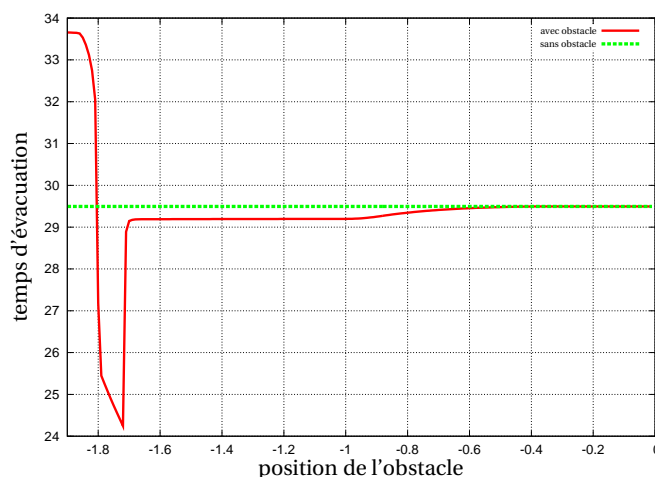


FIGURE 2.3 – Temps d'évacuation en fonction de la position de l'obstacle

Dans la figure 2.4, on considère les densités obtenus lorsque l'obstacle est situé à -1.85 , à -1.72 et lorsqu'il n'y en a pas. On compare leurs profils à cinq temps donnés. On remarque que l'obstacle placé à -1.85 est rapidement engorgé du fait de sa proximité à la densité initiale. Au contraire, placer l'obstacle à sa position optimale -1.72 permet de retarder l'engorgement de la sortie et donc de diminuer le temps d'évacuation.

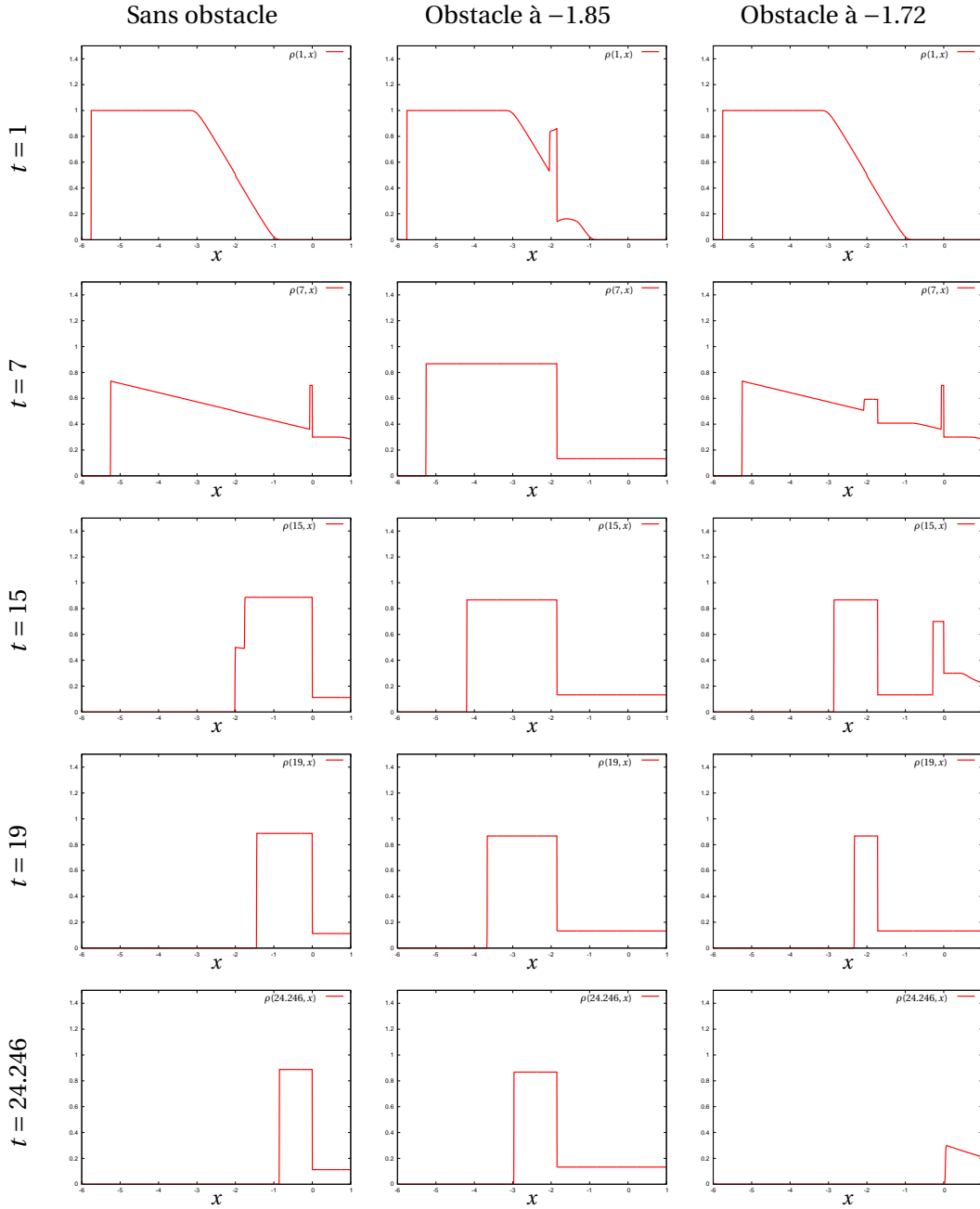


FIGURE 2.4 – Simulations du paradoxe de Braess : profils des densités pour $t = 1, t = 7, t = 15, t = 19$ et $t = 24.246$. La sortie est localisée à $x = 0$

2.3 Modélisation d'écoulement sur des surfaces avec des sillons [A10]

Contexte général

Le ruissellement d'eau de pluie sur des sols cultivés peut poser des problèmes de ressources environnementales tels que la diminution des épaisseurs de sol par érosion ou la baisse de la qualité de l'eau. Il peut aussi entraîner de coulées boueuses qui sont susceptibles de détruire des routes ou des bâtiments. Pour éviter de tels problèmes, une solution est d'améliorer l'aménagement des bassins versants à dominante agricole et pour cela, il est nécessaire de modéliser le ruissellement d'eau sur des sols cultivés. C'est dans ce cadre que s'inscrivent nos travaux dans [A10].

La principale difficulté dans la modélisation vient du fait que sur les surfaces agricoles, les directions des écoulements dépendent de l'interaction entre de nombreux éléments tel que la topographie, les fossés, les sillons qui sont créés par les agriculteurs en labourant leur terre. Nous nous sommes intéressés à l'interaction entre deux éléments les plus rencontrés sur les sols agricoles : la topographie et les sillons. Comme il existe de grandes différences d'échelles entre les paramètres des sillons (les longueurs d'onde peuvent faire quelques dizaines de centimètres) et les dimensions des bassins versants (qui peuvent faire quelques hectares), notre objectif a été alors de développer un modèle qui prenne en compte les effets des sillons sur une topographie sans devoir les représenter explicitement. Le modèle doit prédire les directions de l'écoulement dans chaque parcelle faisant quelques centaines de mètres carré du bassin versant. Notons que les modèles utilisés actuellement en hydrologie ne sont pas satisfaisants dans le sens où ils reposent sur la loi du "tout-ou-rien" [19, 78] qui consiste à considérer que l'écoulement se fait soit dans la direction des sillons, soit dans la direction de la plus grande pente.

Problème de référence

Commençons tout d'abord par décrire le problème de référence. Nous avons considéré un domaine rectangulaire $\Omega = \ell \times L$, avec $\ell \leq L$, et une topographie de référence Z qui représente un plan incliné avec des sillons de forme sinusoïdale. La géométrie des sillons est caractérisée par leur longueur d'onde moyenne et leur amplitude moyenne. Nous supposons aussi que les sillons sont parallèles à la largeur du domaine Ω . Un exemple d'une telle topographie est donné à la figure 2.5.

Nous avons ensuite considéré un écoulement d'eau sur cette topographie qui peut être dû à un événement pluvieux ou à une alimentation par l'amont. On a supposé que l'évolution de l'écoulement est décrit par le modèle de Saint-Venant ([41]) qui peut être dérivé à partir des équations de Navier-Stokes à surface libre en supposant que la hauteur d'eau est petite par rapport aux dimensions horizontales du domaine de l'écoulement ([52, 60, 97, 98]). Dans le domaine Ω , il s'écrit ici comme un système de lois de conservation auquel des termes sources ont été ajoutés :

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} + \operatorname{div}(h\mathbf{u}) = R, \\ \frac{\partial(h\mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(h\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + gh\nabla h = -gh(\nabla Z + S_f(h, \mathbf{u})). \end{cases} \quad (2.16)$$

Pour $t > 0$ et $\mathbf{x} = (x, y) \in \Omega$, les inconnus sont $h = h(t, \mathbf{x})$ la hauteur d'eau et $\mathbf{u} = (u, v)$ la vitesse

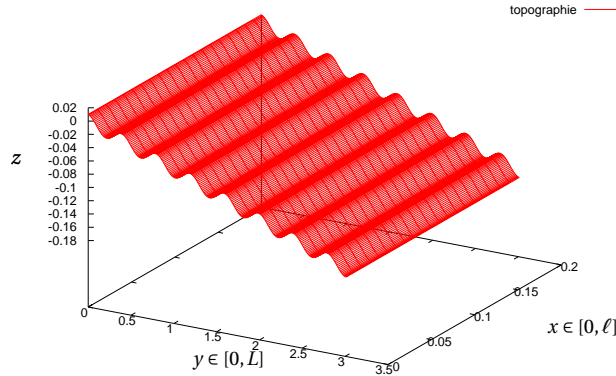


FIGURE 2.5 – Un exemple de topographie de référence

horizontale moyenne de l'écoulement. Dans les termes sources, $Z(\mathbf{x})$ représente la topographie du fond du domaine, ce qui implique que $h + Z$ est la côte de la surface libre de l'écoulement, g est l'accélération de la pesanteur, R est l'intensité de la pluie que nous supposons constante. Enfin $S_f(h, \mathbf{u})$ est une loi de frottement qui décrit la rugosité et la nature du sol. De nombreuses lois de frottements existent dans la littérature ([74]) et nous en avons choisi une empirique appelée loi de Manning qui s'écrit sous la forme

$$S_f = k^2 h^{-4/3} |\mathbf{u}| \mathbf{u},$$

où k est le coefficient de rugosité de Manning. Avec la loi de Darcy-Weisbach, elle fait partie des plus utilisées en hydrologie. Nous avons complété le problème avec les hypothèses suivantes :

1. La direction de l'écoulement est perpendiculaire aux sillons. Notre problème est donc unidimensionnel.
2. On considère uniquement des écoulements de type fluvial, ce qui veut dire $|\mathbf{u}| < \sqrt{gh}$ où \sqrt{gh} est la vitesse de l'information dans l'écoulement.
3. L'infiltration et l'érosion ne sont pas prises en compte.

Avec ces hypothèses les sillons débordent au même moment lors d'un évènement pluvieux ou l'un après l'autre lors d'un écoulement venant de l'amont. En particulier, nous évitons le cas où l'eau peut dévaler les sillons sans les remplir.

Modèle proposé

À partir du problème général de référence décrit précédemment, nous avons proposé un modèle qui prenne en compte les effets dû aux sillons sans représenter ces derniers dans la topographie Z . Ainsi, en gardant uniquement le plan incliné dans la topographie de référence précédente, nous avons proposé d'ajouter un terme de frottement supplémentaire dans le système de Saint-venant (2.16), qui doit freiner l'écoulement lorsque la hauteur d'eau est inférieure à la hauteur moyenne d'eau piégée dans un sillon. Pour cela nous avons tout d'abord introduit la quantité $\langle h_F \rangle$ représentant cette hauteur moyenne d'eau piégée dans un sillon (voir figure 2.6). Elle dépend de la pente de la topographie et des caractéristiques des sillons (lon-

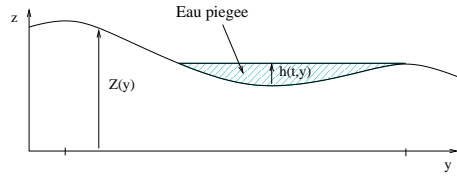


FIGURE 2.6 – Eau piégée dans un sillon

gueur d'onde moyenne et amplitude moyenne). Elle intègre donc toute les caractéristiques des sillons. En pratique, nous en calculons numériquement une approximation. Nous avons ensuite défini le coefficient de frottement suivant :

$$K(h) = K_0 \exp\left(\frac{-h + \langle h_F \rangle}{C \langle h_F \rangle}\right),$$

où C est une constante qui dépend des variations aléatoires des hauteurs des sillons et K_0 est une constante liée aux sillons. Nous pouvons constater que le coefficient $K(h)$ est important lorsque $h \leq \langle h_F \rangle$, ce qui a pour effet de freiner l'écoulement, reproduisant ainsi l'effet recherché des sillons. Au contraire, pour $h > \langle h_F \rangle$, le terme de frottement n'a pas d'effet sur l'écoulement et cela reproduit la situation où les sillons sont remplis. Sur un plan incliné, nous avons alors proposé le modèle suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} + \operatorname{div}(h\mathbf{u}) = R, \\ \frac{\partial(h\mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(h\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + gh\nabla h = -gh(\nabla Z + S_f(h, \mathbf{u})) + S_F(h, \mathbf{u}), \end{cases} \quad (2.17)$$

où la nouvelle loi de frottement supplémentaire est définie par

$$S_F(h, \mathbf{u}) = \begin{pmatrix} 0 \\ -K(h)h\nu \end{pmatrix}.$$

Le choix de cette loi est arbitraire. Elle est un cas particulier de la loi générale que nous avons considérée et qui est définie par

$$\begin{pmatrix} 0 \\ -K(h)h^\alpha |\mathbf{u}|^\beta \nu \end{pmatrix},$$

où $\alpha, \beta \geq 0$. Notons que les sillons étant perpendiculaires à la direction de l'écoulement, la nouvelle loi n'agit que dans cette direction, et donc sur la composante ν de la vitesse de l'écoulement. Cependant, dans le cas où les sillons ne sont pas perpendiculaires à la direction de la plus grande pente, il suffit d'effectuer une rotation du système (2.17).

Schéma numérique

Nous décrivons brièvement ici le schéma choisi. Afin de simplifier la présentation, on se limite à la version unidimensionnelle du modèle (2.17). Sous la forme conservative, il s'écrit alors

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = S_0(U) + S_f(U) + S_F(U), \quad (2.18)$$

où nous avons posé

$$U = \begin{pmatrix} h \\ hu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h \\ q \end{pmatrix}, \quad F(U) = \begin{pmatrix} hu \\ hu^2 + g\frac{h^2}{2} \end{pmatrix}, \quad S_0(U) = \begin{pmatrix} R \\ -ghZ'(x) \end{pmatrix},$$

$$S_f(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ -gk^2h^{-1/3}|u|u \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad S_F(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ -K(h)hu \end{pmatrix}.$$

- (i) En adaptant ici les notations de l'introduction et en considérant pour l'instant uniquement la partie homogène de (2.18) (c'est-à-dire le modèle sans second membre), nous avons alors le schéma volume fini général

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

où comme il a été signalé dans l'introduction, $\mathcal{F}_{j+1/2}^n = F(U_j^n, U_{j+1}^n)$ est le flux de Harten, Lax et van Leer ([20]), noté HLL et défini par

$$F(U_\ell, U_r) = \begin{cases} F(U_\ell) & \text{si } 0 < c_1, \\ \frac{c_2 F(U_\ell) - c_1 F(U_r)}{c_2 - c_1} - \frac{c_1 c_2}{c_2 - c_1} (U_r - U_\ell) & \text{si } c_1 < 0 < c_2, \\ F(U_r) & \text{si } c_2 < 0, \end{cases} \quad (2.19)$$

avec

$$c_1 = \inf_{U=U_\ell, U_r} \inf_{j=1,2} \lambda_j(U), \quad c_2 = \sup_{U=U_\ell, U_r} \sup_{j=1,2} \lambda_j(U)$$

et où $\lambda_1(U) = u - \sqrt{gh}$ et $\lambda_2(U) = u + \sqrt{gh}$ sont les valeurs propres de $F'(U)$.

- (ii) Pour avoir un schéma d'ordre 2 en espace, nous avons utilisé l'opérateur de reconstruction d'ordre 2 appelé ENO modifié ([20]).
- (iii) Le terme de topographie dans $S_0(U)$ doit être traité tout en préservant l'état d'équilibre correspondant au "lac au repos"

$$h + Z = Cte \quad \text{et} \quad u = 0.$$

Pour cela, nous avons utilisé le schéma équilibre basé sur la reconstruction hydrostatique développé par Audusse *et al.* [15].

- (iv) En suivant Bristeau et Coussin [25], nous avons utilisé un traitement semi-implicite du terme de frottement de Manning.
- (v) Afin d'avoir un schéma d'ordre 2 en temps, nous avons utilisé la méthode de Heun.
- (vi) Enfin, le nouveau terme de frottement $S_F(U)$ est traité de manière entièrement explicite.

Notons que les choix (i)–(v) du schéma numérique présentés ci-dessus sont le résultat des travaux menés par Delestre dans sa thèse [42] où en particulier, il a montré que c'était le meilleur compromis entre la précision de l'approximation et les coûts de calcul. Signalons enfin que, dans le cadre du projet ANR Methode, nous avons participé au développement des codes FullSWOF (Full Shallow Water equations for Overland Flow) écrits en C++ et dédiés à la résolution des équations de Saint-Venant 1D et 2D. Ces codes sont actuellement maintenus au laboratoire MAPMO et disponible à <http://www.univ-orleans.fr/mapmo/soft/FullSWOF/>

Tests numériques

Pour illustrer la capacité du modèle (2.17) à prendre en compte les effets dû aux sillons, nous présentons les résultats numériques obtenus sur le cas test de la pluie. Tout d'abord la figure 2.7 montre une coupe de la hauteur d'eau de la solution de référence calculée avec les équations de Saint-Venant (2.16) sur la topographie de référence :

$$Z(x, y) = -0.05y + 0.01 \cos(2\pi y), \quad 0 \leq x \leq 0.1, \quad 0 \leq y \leq 4, \quad (2.20)$$

ce qui donne une longueur d'onde des sillons de 0.1 m et une amplitude de 0.01 m. La solution

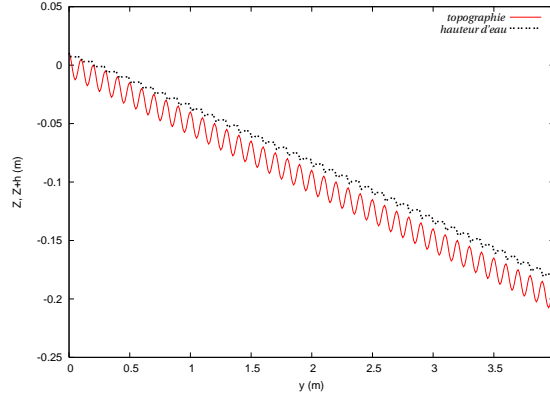


FIGURE 2.7 – Coupe de la solution de référence au temps final

de référence est calculée avec en particulier le pas d'espace $\Delta y = 0.01$. Nous avons supposé une pluie constante pendant toute la simulation et, afin de bien prendre en compte les effets des sillons, nous avons choisi un temps final de simulation qui ne permet pas à l'écoulement d'atteindre un régime stationnaire. On note h_j^n la hauteur obtenue dans la cellule K_j au temps t^n . Ensuite, la solution de notre modèle (2.17) est calculée sur une topographie où on a gardé uniquement la pente dans (2.20) :

$$Z(x, y) = -0.05y. \quad (2.21)$$

On note H_j^n la hauteur obtenue dans la cellule K_j au temps t^n pour des paramètres K_0 et C donnés et $H_{0,j}^n$, celle calculée avec $K_0 = 0$, ce qui correspond au modèle de Saint-Venant (2.16) avec la pente (2.21). Comme les calculs de H_j^n et de $H_{0,j}^n$ se font sur une pente, on considère un pas d'espace Δy égal à la longueur d'onde moyenne des sillons. Ainsi, pour comparer le modèle de référence avec notre modèle, on introduit \overline{h}^n représentant la moyenne de la hauteur d'eau de référence dans le sillon j au temps t^n et on définit l'erreur relative en norme L^2 suivante :

$$e^H = \left(\frac{\sum_n \sum_j |\overline{h}^n - H_j^n|^2}{\sum_n \sum_j |\overline{h}^n - H_{0,j}^n|^2} \right)^{1/2}.$$

Dans la figure 2.8, on représente cette erreur en fonction de $K_0 \in [0.01, 0.6]$ pour $C = 10$ fixé. La valeur minimale de l'erreur e^H est approximativement de 0.2518 obtenue pour $K_0 = 0.02$. En optimisant ensuite l'erreur par rapport aux deux paramètres K_0 et C , on obtient $e^H \approx 0.1417$

correspondant à $K_0 = 0.02$ et $C = 0.4$. On peut constater que le nouveau modèle (2.17) a permis de diminuer l'erreur sur les hauteurs d'eau d'un facteur de 7 par rapport au cas $K_0 = 0$. Cela indique que les sillons ont bien été pris en compte dans le nouveau modèle.

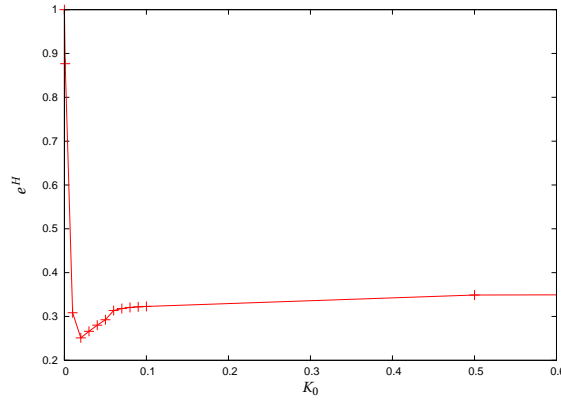


FIGURE 2.8 – Erreur e^H en fonction de K_0

Dans la figure 2.9, on représente les rapports entre les débits à l'exutoire et le débit de la pluie pour le modèle de référence (2.16), notre nouveau modèle (2.17) avec $K_0 = 0.02$ et $C = 0.4$ ainsi que notre modèle avec $K_0 = 0$. Bien que, les sillons n'ont pas été explicités dans le nouveau modèle, on peut remarquer que celui-ci est capable de retenir l'eau pendant un moment indiquant ainsi l'existence des sillons et reproduisant leur remplissage.

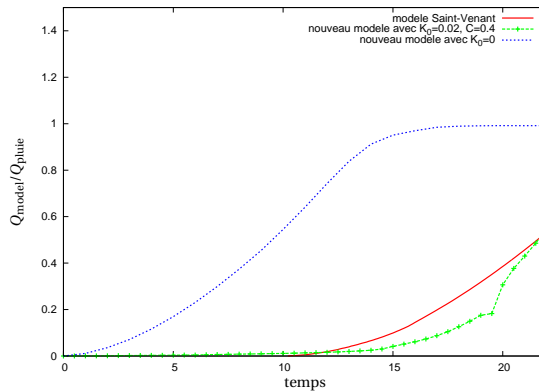


FIGURE 2.9 – Rapports de débits de tous les modèles à l'exutoire en fonction du temps

Par ailleurs, par d'autres tests numériques nous avons constaté que les coefficients K_0 et C calés dépendent uniquement des caractéristiques des sillons. Ils ne dépendent ni des pas de discrétisations du schéma, ni de la nature du sol. Cette propriété permet une utilisation pratique du modèle. Les extensions naturelles des travaux menés ici consistent à considérer des problèmes totalement 2D avec des variations aléatoires des hauteurs des sillons qui pourraient être prises en compte dans le coefficient C .

2.4 Un modèle de type SI pour l'épidémiologie [A11]

Le modèle

En épidémiologie, les modèles à compartiments de type SIR décrivent la propagation d'infections au sein d'une population divisée en trois classes : celle des individus sains ou susceptibles (S), celle des infectés (I) et celle des rétablis ou retirés (R). De nombreux modèles de type SIR existent actuellement dans la littérature reposant soit sur des équations différentielles, soit sur des équations aux dérivées partielles (pour une revue voir par exemple [43, 107, 118]).

Nous nous sommes intéressés ici aux comportements asymptotiques des solutions d'un modèle de type SI décrivant la propagation d'une infection à croissance exponentielle et à issue fatale. On note i la charge d'infection supposée vérifier l'équation différentielle :

$$\frac{di}{dt} = \nu i,$$

où $\nu > 0$ est la vitesse de croissance de l'infection. On introduit $i^- > 0$ la charge d'infection minimale et $J =]i^-, +\infty[$. Le modèle s'écrit comme un système couplé d'une équation différentielle et d'une équation de transport auxquelles sont ajoutées des conditions de bord et initiales :

$$\frac{dS(t)}{dt} = \gamma - (\mu_0 + \alpha)S(t) - S(t)\mathcal{F}(\beta I)(t), \quad t \geq 0, \quad (2.22a)$$

$$\frac{\partial I(t, i)}{\partial t} + \frac{\partial(\nu i I)(t, i)}{\partial i} = -\mu(i)I(t, i) + \Phi(i)S(t)\mathcal{F}(\beta I)(t), \quad t \geq 0, i \in J, \quad (2.22b)$$

$$\nu i^- I(t, i^-) = \alpha S(t), \quad (2.22c)$$

$$S(0) = S_0 \in \mathbb{R}^+, \quad I(0, \cdot) = I_0. \quad (2.22d)$$

Dans (2.22), $S(t)$ les individus sains au temps t et $I(t, i)$ les individus infectés avec la charge d'infection i au temps t sont les inconnus, \mathcal{F} est l'opérateur défini, pour toute fonction intégrable, par :

$$\mathcal{F} : h \rightarrow \int_J h(i) di.$$

En conséquence, $\mathcal{F}(I)(t)$ et $S(t) + \mathcal{F}(I)(t)$ représentent respectivement la population d'infectés et la population totale au temps t . Nous supposons les hypothèses suivantes :

- (i) $\mu_0, \nu > 0$ et $\alpha, \gamma \geq 0$
- (ii) la fonction Φ appartient à $\mathcal{C}^\infty(J)$, est positive, $\lim_{i \rightarrow +\infty} \Phi(i) = 0$ et $\int_J \Phi(i) di = 1$
- (iii) les fonctions μ et β appartiennent à $L^\infty(J)$, avec $\mu(i) \geq \mu_0$ et $\beta(i) \geq \beta_0 > 0$ p. p. t. $i \in J$
- (iv) la fonction I_0 appartient à $L^1_+(J) \equiv \{f \in L^1(J), f \geq 0 \text{ p.p.t. } i \in J\}$.

La condition de bord (2.22c) traduit le fait qu'un taux α d'individus sains deviennent infectés par une source externe avec la charge minimale i^- . Le modèle intègre aussi un processus de contamination par contagion décrit par une loi d'action de masse avec une force d'intensité $\mathcal{F}(\beta I)$. Les individus sains sont infectés par contagion avec une probabilité $\Phi(i)$ d'avoir la charge d'infection i . Enfin, γ est un flux externe, μ_0 est le taux de mortalité des individus sains

et $\mu(i)$ est celui des infectés. Notons que l'hypothèse (iii) sur μ implique que

$$\lim_{i \rightarrow +\infty} \int_{i^-}^i \mu(s) ds = +\infty,$$

traduisant le fait qu'un individu infecté quitte la classe I en mourant avec une charge d'infection finie. Le système (2.22) est une version simplifiée des modèles proposés dans [71, 106, 117] pour décrire la propagation de maladies, telles que la tremblante, dans des troupeaux de moutons. En plus de la structuration en charge d'infection, ces modèles intègrent aussi une structuration en âge et le génotype de chaque individu est spécifié.

Taux de reproduction de base \mathcal{R}_0

Le problème que nous avons étudié, et qui est fondamental en épidémiologie, est la persistance ou non de l'infection. On peut citer par exemple à [27, 69, 114, 119] pour des travaux sur cette question. La définition ci-dessous indique le sens que nous donnons à la notion de persistance.

Définition 2.5

1. L'infection est persistante si

$$\forall (S_0, I_0) \in \mathbb{R}^+ \times L_+^1(J), \quad \mathcal{F}(I)(0) > 0 \Rightarrow \liminf_{t \rightarrow +\infty} \mathcal{F}(I)(t) > 0.$$

2. L'infection est uniformément persistante si il existe $\varepsilon > 0$ tel que

$$\forall (S_0, I_0) \in \mathbb{R}^+ \times L_+^1(J), \quad \mathcal{F}(I)(0) > 0 \Rightarrow \liminf_{t \rightarrow +\infty} \mathcal{F}(I)(t) \geq \varepsilon.$$

Nous avons une définition similaire pour la persistance de la population totale. Nous introduisons à présent un nombre adimensionnel \mathcal{R}_0 , utilisé en écologie et en épidémiologie, représentant le nombre d'infections secondaires produit par un individu infecté moyen dans une population composée uniquement de sains (voir [43, 44]). D'un point de vue mathématique, \mathcal{R}_0 est un seuil de bifurcation : si $\mathcal{R}_0 < 1$, alors il n'y a pas d'infection et si $\mathcal{R}_0 > 1$, alors l'épidémie s'installe. Nous donnons à présent un résultat nécessaire à la persistance de l'infection.

Lemme 2.6 *La population totale est uniformément persistante si $\gamma > 0$ et tend vers 0 si $\gamma = 0$.*

Ce résultat naturel montre simplement que s'il n'y pas de flux entrant d'individus sains dans la population totale, alors celle-ci disparaît du fait de l'hypothèse de l'infection à issue fatale. Nous avons ensuite distingué deux cas dans l'étude de la persistance. Le premier suppose une source externe permanente de contamination qui implique une persistance de l'infection.

Théorème 2.7 *On suppose que $I_0 > 0$ et $\alpha > 0$. Alors l'infection est uniformément persistante et on a la minoration*

$$\liminf_{t \rightarrow +\infty} \mathcal{F}(I)(t) \geq \frac{\alpha \gamma \mu_0}{\|\mu\|_\infty (\mu_0^2 + \alpha \mu_0 + \|\beta\|_\infty \gamma)}.$$

Dans le cas où il n'y a pas de source externe de contamination ($\alpha = 0$), on définit tout d'abord trois seuils :

$$\mathcal{R}_- = \frac{\gamma\beta_0}{\mu_0\|\mu\|_\infty}, \quad \mathcal{R}_0 = \frac{\gamma}{\mu_0} \mathcal{F}(\beta\pi_\mu), \quad \mathcal{R}_+ = \frac{\gamma\|\beta\|_\infty}{\mu_0^2},$$

avec

$$\pi_\mu(i) = \frac{1}{\nu i} \int_{i^-}^i \Phi(s) e^{-\int_s^i \frac{\mu(\ell)}{\nu \ell} d\ell} ds.$$

Notons que nous avons l'encadrement

$$\mathcal{R}_- \leq \mathcal{R}_0 \leq \mathcal{R}_+.$$

L'étude de la persistance de l'infection passe par celle de la stabilité des points d'équilibre du système (2.22).

Proposition 2.8

- ▷ Si $\mathcal{R}_0 \leq 1$, alors le problème (2.22) admet un unique point d'équilibre qui est sans maladie

$$E_0 = \left(\frac{\gamma}{\mu_0}, 0 \right).$$

- ▷ Si $\mathcal{R}_0 > 1$, alors le problème (2.22) admet deux points d'équilibre E_0 et

$$E_* = \left(\frac{\gamma}{\mu_0 \mathcal{R}_0}, \frac{\gamma(\mathcal{R}_0 - 1)}{\mathcal{R}_0} \pi_\mu \right),$$

ce dernier étant un équilibre endémique.

Nous donnons à présent les deux résultats principaux de [A11]. Le premier concerne l'extinction de l'infection.

Théorème 2.9 *On suppose que $I_0 > 0$ et $\mathcal{R}_0 < 1$. Alors E_0 (l'équilibre sans maladie) est localement asymptotiquement stable. Si de plus $\mathcal{R}_+ < 1$, alors E_0 est globalement stable.*

Le second est dédié à la persistance de l'infection.

Théorème 2.10 *On suppose que $I_0 > 0$ et $\mathcal{R}_0 > 1$. Alors E_0 est instable et E_* (l'équilibre endémique) est localement asymptotiquement stable. Si de plus $\mathcal{R}_- > 1$, alors l'infection est uniformément persistente.*

Schéma numérique et illustrations

Nous avons utilisé un schéma d'Euler implicite pour (2.22a) et un schéma upwind implicite en temps pour l'équation de transport (2.22b). Nous décrivons ci-dessous la procédure en adaptant les notations de l'introduction :

- ▷ On calcule les états initiaux et les données :

$$\begin{aligned} S^0 &= S(0), \quad I_j^0 = \frac{1}{\Delta i} \int_{K_j} I_0(i) di, \\ \beta_j &= \frac{1}{\Delta i} \int_{K_j} \beta(i) di, \quad \mu_j = \frac{1}{\Delta i} \int_{K_j} \mu(i) di \quad \text{et} \quad \Phi_j = \frac{1}{\Delta i} \int_{K_j} \Phi(i) di. \end{aligned} \tag{2.23}$$

- ▷ Supposons maintenant que S^n et $I^n = (I_j^n)_{j \geq 1}$ sont calculés :

- On définit

$$\mathcal{T}(\beta I^n) = \Delta i \sum_{j \geq 1} \beta_j I_j^n,$$

- On calcule

$$S^{n+1} = \frac{\gamma \Delta t + S^n}{1 + \Delta t (\mu_0 + \alpha + \mathcal{T}(\beta I^n))}, \quad (2.24)$$

- On calcule I^{n+1} en résolvant le système linéaire

$$-v \frac{\Delta t}{\Delta i} i_{j-1/2} I_{j-1}^{n+1} + \left(1 + v \frac{\Delta t}{\Delta i} i_{j+1/2}\right) I_j^{n+1} = I_j^n + \Delta t \Phi_j S^{n+1} \mathcal{T}(\beta I^n). \quad (2.25)$$

La proposition suivante donne les propriétés standards du schéma.

Proposition 2.11 *Supposons que pour tout $n \geq 0$, S^n et I^n sont calculés par (2.23)–(2.25). Alors*

- (i) *pour tout $n \geq 0$, $j \geq 1$, on a $S^n \geq 0$ et $I_j^n \geq 0$;*
- (ii) *sous les hypothèses où μ et β sont des fonctions constantes avec*

$$\mu(i) = \mu_1 \geq \mu_0 \quad \text{et} \quad \beta(i) = \beta_0,$$

alors $(S^n)_{n \geq 0}$ et $(I^n)_{n \geq 0}$ vérifient une équation de balance discrète

$$\frac{S^{n+1} - S^n}{\Delta t} + \frac{\Delta i}{\Delta t} \sum_{j \geq 1} (I_j^{n+1} - I_j^n) = \gamma - \mu_0 S^{n+1} - \mu_1 \mathcal{T}(I^{n+1}); \quad (2.26)$$

- (iii) *soit $T > 0$. Pour tout $t^n \leq T$, on a*

$$S^n \leq \gamma T + S^0, \quad (2.27)$$

$$\mathcal{T}(I^n) \leq e^{T \|\beta\|_\infty (\gamma T + S^0)} (\mathcal{T}(I^0) + \alpha T (\gamma T + S^0)). \quad (2.28)$$

Nous présentons maintenant des simulations numériques qui illustrent les résultats des théorèmes 2.9 et 2.10. Les valeurs des paramètres sont données dans le tableau 2.1, la fonction Φ est définie comme une loi Gamma de paramètres g et c

$$\Phi(i) = \frac{i^{c-1} e^{-i/g}}{\Gamma(c) g^c},$$

où Γ est la fonction gamma d'Euler et g et c sont donnés dans le tableau 2.1. Les valeurs des paramètres et la fonction Φ sont choisies d'après [106, 117].

TABLE 2.1 – Valeurs des paramètres

définition des paramètres	symbole	valeur
intervalle de charge d'infections	$[i^-, i^+]$	$[10^{-2}, 10^2]$ années
taux de mortalité de base	μ_0	0.39 années ⁻¹
taux de transmission horizontale	β	$4 \cdot 10^{-2}$ (individu · année) ⁻¹
vitesse de la charge d'infection	v	1.15 année ⁻¹
distribution de charge d'infection Φ	$(g; c)$	$(7 \cdot 10^{-3}; 49)$

Le taux de mortalité des infectés est défini par

$$\mu(i) = \mu_0 \left(1 - \frac{1 + i^{-2}}{1 + i^2}\right).$$

Nous avons considéré deux scénarios pour illustrer d'une part la persistance de l'infection et d'autre part son extinction. Le nombre d'individus sains initial est supposé constant et égal à 10. Dans le premier scénario, nous avons considéré deux valeurs du flux externe $\gamma = 10$ et $\gamma = 7$. Dans le premier cas on a $\mathcal{R}_- \approx 1.31$ et dans le deuxième, on a $\mathcal{R}_- \approx 0.92 < 1 < \mathcal{R}_0 \approx 1.17$. Dans les figures 2.10 (a) et (b), on remarque la persistance de la maladie, bien qu'on soit parti d'un seul individu infecté initial. Dans le deuxième scénario, on considère deux autre valeurs du flux externe $\gamma = 3$ et $\gamma = 5$ correspondant respectivement à $\mathcal{R}_+ \approx 0.788 < 1$ et $\mathcal{R}_0 \approx 0.84 < 1 < \mathcal{R}_+ \approx 1.31$. On part cette fois-ci d'un nombre important d'infectés (50 individus), et on observe dans les figures 2.11 (a) et (b) la convergence à zéro de la population d'infectés, montrant ainsi la stabilité globale de l'équilibre sans maladie et par conséquent l'extinction de la maladie.

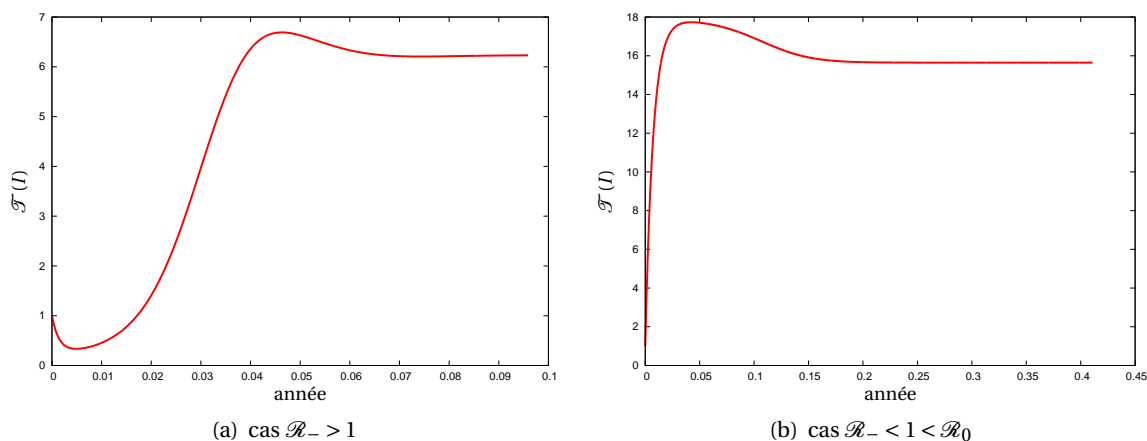


FIGURE 2.10 – Scenario 1 : persistance de l'infection

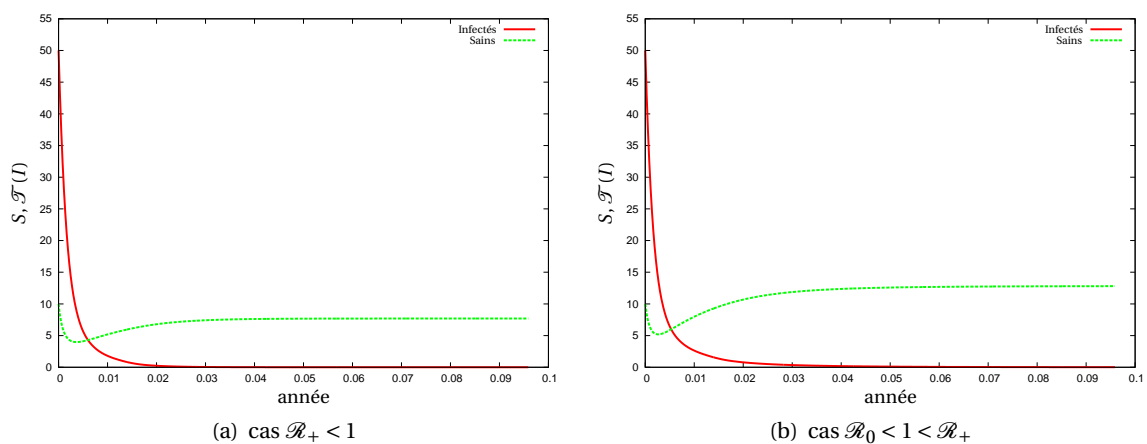


FIGURE 2.11 – Scenario 2 : extinction de l'infection

2.5 États atteignables pour des systèmes triangulaires [A13]

Sur un domaine $[0, T] \times \mathbb{R}$, nous considérons un système triangulaire de lois de conservation de la forme :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 & (t, x) \in [0, T] \times \mathbb{R}, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial (g(u)v)}{\partial x} = 0 & (t, x) \in [0, T] \times \mathbb{R}, \end{cases} \quad (2.29)$$

où f et g sont deux fonctions de classe \mathcal{C}^1 et où f est strictement convexe. Notre objectif a été d'une part, de caractériser l'ensemble \mathcal{U}_T des couples $(u_T, v_T) \in L^\infty(\mathbb{R}; \mathbb{R}^2)$ qui peuvent être atteints par une solution de (2.29) en partant d'une donnée initiale adéquate, d'autre part, de développer un schéma numérique rétrograde pour approcher cette solution. Nous présentons tout d'abord brièvement, les résultats théoriques qui ont motivé le schéma numérique.

L'étude des états atteignables des lois de conservation scalaires de la forme :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 \quad (t, x) \in [0, T] \times \mathbb{R} \quad (2.30)$$

où f est un flux convexe, est un ingrédient principal dans la caractérisation de l'ensemble \mathcal{U}_T . Nous avons utilisé pour cela un résultat établi par Adimurthi, Ghoshal et Veerappa Gowda [1, 2] (voir aussi Ancona et Marson [12])

Théorème 2.12 (Adimurthi-Ghoshal-Veerappa Gowda [1, 2]) Soient f une fonction convexe de classe \mathcal{C}^1 et $T > 0$ un réel. Alors

(i) L'ensemble des états atteignables dans $L^\infty(\mathbb{R})$ par une solution entropique de (2.30) au temps T est donné par

$$\mathcal{A}_T(\mathbb{R}, f) = \left\{ u \in L^\infty(\mathbb{R}) : \exists \rho : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \text{ continue à droite, croissante, telle que } f'(u) = \frac{x - \rho(x)}{T} \right\}.$$

(ii) De plus, pour tout $u_T \in \mathcal{A}_T(\mathbb{R}, f)$, il existe une unique solution isentropique u de (2.30) vérifiant $u(T, \cdot) = u_T$.

Dans le théorème 2.12 (ii), le fait que u soit une solution isentropique va motiver le premier choix dans le schéma numérique. En effet, si u est une solution isentropique alors elle est une solution entropique direct et rétrograde du problème (2.30) (voir Korobkov et Panov [81]), c'est-à-dire, la fonction $w(t, \cdot) = u(T - t, \cdot)$ est l'unique solution entropique de

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(-f(w)) = 0 \\ w|_{t=0} = u_T. \end{cases} \quad (2.31)$$

Nous pouvons alors utiliser un schéma volumes finis monotone standard et défini dans l'introduction afin d'approcher u . Notons que u peut avoir des discontinuités en $t = 0$ et $t = T$. Ainsi, la deuxième équation de (2.29) est une équation de transport avec des coefficients qui peuvent être discontinus. Nous avons alors utilisé le schéma upwind étudié dans [51, 68] afin d'approcher v .

Deux cas sont à distinguer dans la caractérisation de l'ensemble \mathcal{U}_T .

- (i) Le premier est celui où le système (2.29) est strictement hyperbolique c'est-à-dire $f'(u) \neq g(u)$ pour u appartenant à un intervalle $[a, b]$ donné et où l'état final u_T est à valeur dans $[a, b]$. Dans ce cas, dit non résonant, le système (2.29) admet des entropies non triviales qui permettent de caractériser l'espace \mathcal{U}_T sous la stricte convexité de la fonction f .

Théorème 2.13 *On suppose que f est strictement convexe. On suppose de plus que $f'(u) \neq g(u)$ pour tout $u \in [a, b]$ un intervalle donné. Soit un temps final $T > 0$ et $u_T \in \mathcal{A}_T(\mathbb{R}, f)$ un état final tel que u_T soit à valeur dans $[a, b]$. Soit $v_T \in L^\infty(\mathbb{R})$. Alors il existe un unique état initial $U_0 = (u_0, v_0)$, tel que le système (2.29) admet une unique solution isentropique $U = (u, v)$ sur $[0, T] \times \mathbb{R}$, vérifiant $U(0, \cdot) = U_0$ et $U(T, \cdot) = (u_T, v_T)$. Autrement dit*

$$\mathcal{U}_T = \mathcal{A}_T(\mathbb{R}, f) \times L^\infty(\mathbb{R}). \quad (2.32)$$

À l'inverse, si $u_T \notin \mathcal{A}_T(\mathbb{R}, f)$, alors pour tout $v_T \in L^\infty(\mathbb{R})$, l'état final $U_T = (u_T, v_T)$ est pas atteignable par aucune solution entropique de (2.29) au temps T .

- (ii) Dans le cas résonant, le système n'admet plus d'entropies non triviales et nous avons considéré qu'une solution rétrograde $U = (u, v)$ de (2.29) correspondant à un état final $U_T = (u_T, v_T)$ donné est une solution admissible du système si u est une solution isentropique de la première loi de conservation de (2.30) avec u_T comme état final et que v est une l'unique solution faible de l'équation de transport avec v_T comme état final. Dans ce deuxième cas, l'ensemble \mathcal{U}_T défini en (2.32) n'est plus atteignable. Seuls les états appartenant à un ensemble dense de \mathcal{U}_T est atteignable.

Théorème 2.14 *On suppose que f est localement uniformément convexe :*

$$\text{pour tout compact } K \subset \mathbb{R}, \text{ il existe } \alpha(K) > 0, f''|_K \geq \alpha(K).$$

On suppose de plus que $f'(u) = g(u)$ pour u appartenant à un intervalle $[a, b]$ donné et que l'état final u_T est à valeur dans $[a, b]$. Soit $\mathbb{A}_T = W^{1,\infty}(\mathbb{R}) \cap \left(\bigcup_{\delta > 0} \mathcal{A}_{T+\delta}(f, \mathbb{R}) \right)$. Alors,

- ▷ *Tout $U_T \in \mathbb{A}_T \times L^\infty(\mathbb{R})$ est contrôlable de manière exacte au temps $t = T$;*
- ▷ *Tout $U_T \in \mathcal{A}_T(\mathbb{R}, f) \times L^\infty(\mathbb{R})$ est contrôlable de manière approchée en norme $L^1_{loc}(\mathbb{R})$ au temps T .*

Schéma numérique et simulations

Nous décrivons à présent le schéma numérique rétrograde pour (2.29) sur un domaine $[\sigma, T] \times J$ où $\sigma > 0$ et $J = [C_1, C_2]$. Il découle des résultats présentés ci-dessus et de leurs conséquences. Il est basé sur la résolution directe du problème :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{f}(u)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial v}{\partial t} - \frac{\partial (g(u)v)}{\partial x} = 0 \end{cases} \quad (2.33)$$

où $\tilde{f}(u) = -f(u)$ et $(u(0, \cdot), v(0, \cdot)) = (u_T, v_T) \in \mathcal{A}_T(J, f) \times L^\infty(J)$.

La première étape consiste à chercher un domaine de calcul fixe. Pour cela, on exploite les domaines de dépendance de chaque équation qui compose (2.33). On définit

$$B_1^{(1)} = C_1 + (T - \sigma)\tilde{f}'(u_0(C_1)), \quad B_2^{(1)} = C_2 + (T - \sigma)\tilde{f}'(u_0(C_2)),$$

$$B_1^{(2)} = C_1 + (T - \sigma)g(u_0(C_1)), \quad B_2^{(2)} = C_2 + (T - \sigma)g(u_0(C_2)).$$

Posons

$$B_1 = \min \{C_1, B_1^{(1)}, B_1^{(2)}\}, \quad B_2 = \max \{C_2, B_2^{(1)}, B_2^{(2)}\},$$

alors le domaine de calcul recherché est $K = [B_1, B_2]$. On étend ensuite les données u_T et v_T :

$$u_T(x) = \begin{cases} u_T(C_1) & \text{si } x \in [B_1, C_1] \\ u_T(C_2) & \text{si } x \in [C_2, B_2] \end{cases} \quad \text{et} \quad v_T(x) = \begin{cases} v_T(C_1) & \text{si } x \in [B_1, C_1] \\ v_T(C_2) & \text{si } x \in [C_2, B_2] \end{cases}.$$

On introduit les points

$$B_1 = x_{1/2} < x_{3/2} < \dots < x_{M-1/2} < x_{M+1/2} = B_2.$$

En adaptant ici les notations de l'introduction et étant donné (u_j^n, v_j^n) , on calcule tout d'abord u_j^{n+1} en utilisant le schéma de Godounov

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathcal{F}_{j+1/2}^n - \mathcal{F}_{j-1/2}^n),$$

où $\mathcal{F}_{j+1/2}^n = F(u_j^n, u_{j+1}^n)$ est le flux numérique de Godounov défini par (2.5). On calcule ensuite v_j^{n+1} en utilisant le schéma upwind développé dans [51, 68] : on définit tout d'abord

$$g_{j+1/2}^n = (1 - \theta)g(u_j^n) + \theta g(u_{j+1}^n), \quad 0 \leq \theta \leq 1.$$

Pour $s \in \mathbb{R}$, notons $s^+ = \max(s, 0)$, on calcule alors

$$v_j^{n+1} = v_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left\{ [(g_{j+1/2}^n)^+ v_j^n - (g_{j-1/2}^n)^+ v_{j-1}^n] + [(g_{j+1/2}^n)^- v_{j+1}^n - (g_{j-1/2}^n)^- v_j^n] \right\}.$$

Nous présentons à présent quelques résultats numériques obtenus par le schéma décrit précédemment. On considère le domaine $[0.1, 1] \times [-0.5, 0.5]$ et on choisit les états finaux suivants :

$$u_T(x) = \begin{cases} x + 0.4 & \text{si } x < 0 \\ x - 0.3 & \text{si } x \geq 0 \end{cases} \quad \text{et} \quad v_T(x) = \begin{cases} 0.75 & \text{si } x < 0 \\ -0.25 & \text{si } x \geq 0 \end{cases}. \quad (2.34)$$

Dans un premier exemple, on se place dans le cas non résonant en considérant le système suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2} \right) = 0, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial (u^2 v)}{\partial x} = 0. \end{cases} \quad (2.35)$$

À partir des états finaux (2.34), on effectue une résolution rétrograde de (2.35) sur le domaine $[0.1, 1] \times [-0.5, 0.5]$. Puis en partant des états initiaux obtenus, on effectue une résolution directe de (2.35). En notant u^{N+1} et v^{N+1} les approximations respectives de u_T et v_T obtenues, nous introduisons les erreurs relatives en norme L^1 suivantes :

$$e_b = \frac{\sum_{j=1}^M |u_T(x_j) - u_j^{N+1}|}{\sum_{j=1}^M |u_T(x_j)|} \quad \text{et} \quad e_t = \frac{\sum_{j=1}^M |v_T(x_j) - v_j^{N+1}|}{\sum_{j=1}^M |v_T(x_j)|}.$$

Les deux premières colonnes du tableau 2.2 montrent les convergences des erreurs e_b et e_t en faisant varier le pas d'espace, avec un pas de temps fixé $\Delta t = 3.9 \times 10^{-4}$. Les ordres de convergence sont de 0.61 pour e_b et de 1 pour e_t . Dans la figure 2.12, nous présentons les états finaux approchés et exactes pour $\Delta x = 1.56 \times 10^{-3}$ et $\Delta t = 3.9 \times 10^{-4}$. Nous pouvons alors constater que les états finaux ont bien été approchés.

Dans un deuxième exemple, on se place dans un cas résonant en considérant le système :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2} \right) = 0, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} = 0, \end{cases} \quad (2.36)$$

La troisième colonne du tableau 2.2 montre la convergence de l'erreur e_t que nous avons appelé ici $e_{t,sr}$, lorsqu'on procède de la même manière que dans le cas non résonant. L'ordre de convergence est de 0.57 et est bien inférieur à celui du cas non résonant. Dans la figure 2.13 (a), nous représentons v_T et l'approximation obtenue pour $\Delta x = 1.56 \times 10^{-3}$, $\Delta t = 3.9 \times 10^{-4}$ et on peut remarquer que l'approximation de v_T n'est pas aussi bonne que dans le cas non résonant. Pour améliorer l'approximation, on considère une donnée finale de l'équation de Burgers appartenant à $\mathcal{A}_{T+\delta}$ pour $\delta > 0$. Pour cela, à partir de u_T défini en (2.34), nous résolvons de manière directe puis rétrograde l'équation de Burgers sur un intervalle $[T, T + \delta]$. En notant u_T^δ la solution obtenue, on peut remarquer que cela consiste à régulariser u_T en s'inspirant de la définition de l'espace \mathbb{A}_T introduit dans le théorème 2.14. On procède ensuite de la même manière que dans le cas non résonant avec les états finaux u_T^δ et v_T . La quatrième colonne du tableau 2.2 montre la convergence de e_t appelé ici $e_{t,ar}$. L'ordre de convergence est de 0.93 et est bien meilleur que celui sans régularisation. Dans la figure 2.13 (b), nous représentons v_T et son approximation obtenue et on peut constater que l'approximation est meilleure que celle présentée dans la figure 2.13 (a).

Δx	e_b	e_t	$e_{t,sr}$	$e_{t,ar}$
0.05	0.3	0.065	0.15	0.11
0.025	0.23	0.041	0.11	0.081
0.0125	0.16	0.023	0.086	0.037
6.25×10^{-3}	0.1	0.019	0.058	0.015
3.125×10^{-3}	0.068	7.2×10^{-3}	0.038	8×10^{-3}
1.56×10^{-3}	0.041	3.9×10^{-4}	0.023	4.4×10^{-3}
7.8×10^{-4}	0.023	2.2×10^{-4}	0.014	3.1×10^{-3}

TABLE 2.2 – les erreurs e_b et e_t

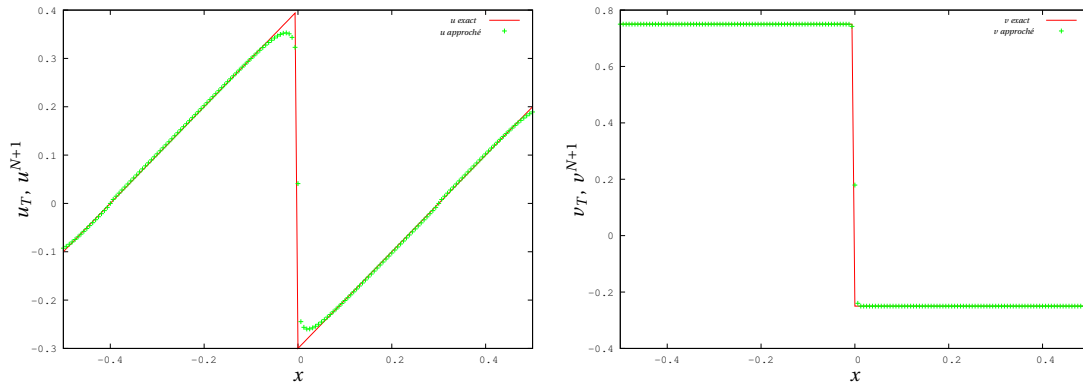


FIGURE 2.12 – cas non résonant : états finaux $\Delta x = 1.56 \times 10^{-3}$ et $\Delta t = \Delta x/2$

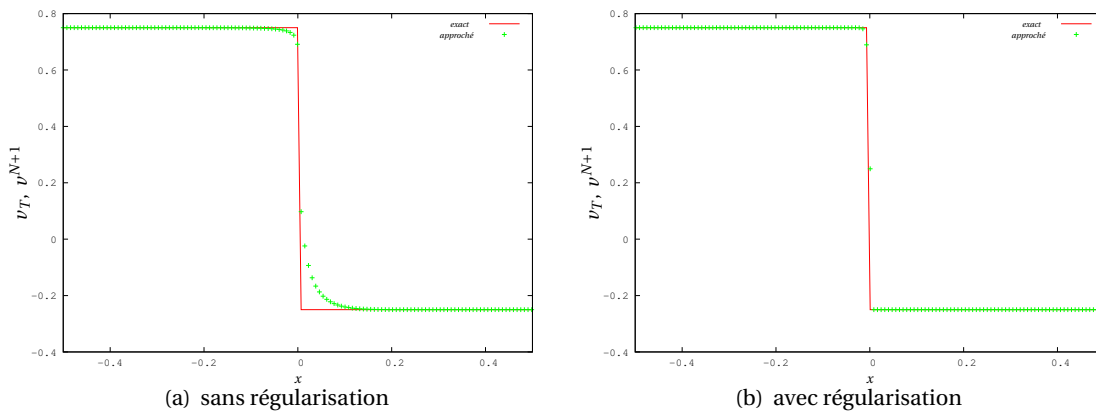


FIGURE 2.13 – cas résonant : états finaux v_T et v^{N+1} pour $\Delta x = 1.56 \times 10^{-3}$ et $\Delta t = \Delta x/2$

Chapitre 3

Méthodes de bases réduites

3.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à la présentation de nos travaux concernant l'application des méthodes de bases réduites aux équations de Maxwell (section 3.2) et au modèle Restricted Hartree-Fock pour le problème électronique en chimie quantique (section 3.3).

Les méthodes de bases réduites sont des méthodes numériques permettant de réduire les coûts et les temps de calcul dans les études paramétriques. En effet, dans beaucoup de domaines tel que l'optimisation, le même problème dépendant d'un ou de plusieurs paramètres qui varient, doit être simulé un très grand nombre de fois. En utilisant uniquement des méthodes numériques standards (éléments finis, volumes finis, Galerkin discontinue,...) les coûts de calculs peuvent être très importants. Les méthodes de bases réduites permettent l'évaluation rapide et fiable des solutions du problème considéré. À notre connaissance, elles ont été initialement introduites en mécanique des structures [4, 79]. Nous allons décrire les grandes lignes de ces méthodes à travers un problème générique simple où elles sont les plus efficaces. Pour un paramètre $\boldsymbol{\mu}$ donné, appartenant à un ensemble D de \mathbb{R}^p , $p \geq 1$, supposons que l'on cherche $u(\boldsymbol{\mu})$ appartenant à un espace de Hilbert X et vérifiant

$$a(u(\boldsymbol{\mu}), v; \boldsymbol{\mu}) = f(v), \quad \forall v \in X, \quad (3.1)$$

où l'application $a(\cdot, \cdot; \boldsymbol{\mu}) : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ est bilinéaire uniformément continue et coercive par rapport au paramètre $\boldsymbol{\mu}$, c'est-à-dire, il existe $C(\boldsymbol{\mu}) > 0$ tel que

$$|a(w, v; \boldsymbol{\mu})| \leq C(\boldsymbol{\mu}) \|w\|_X \|v\|_X, \quad \forall w, v \in X, \quad \forall \boldsymbol{\mu} \in D,$$

et il existe $\beta > 0$ tel que

$$|a(w, w; \boldsymbol{\mu})| \geq \beta \|w\|_X^2, \quad \forall w \in X, \quad \forall \boldsymbol{\mu} \in D.$$

Dans (3.1), f est une forme linéaire et continue sur X . Il est clair que sous toutes ces hypothèses, le problème (3.1) est bien posé dans X . On suppose de plus que $a(\cdot, \cdot; \boldsymbol{\mu})$ est affine par rapport au paramètre $\boldsymbol{\mu}$, c'est-à-dire,

$$a(w, v; \boldsymbol{\mu}) = \sum_{q=1}^Q \alpha^q(\boldsymbol{\mu}) a^q(w, v), \quad (3.2)$$

où Q est un entier fini, $\alpha^q : D \rightarrow \mathbb{R}$ sont des fonctions et $a^q(.,.) : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ sont des applications bilinéaires indépendantes du paramètre $\boldsymbol{\mu}$. Nous verrons l'utilité de l'écriture (3.2) dans la suite. En général, dans la pratique, nous n'avons pas accès à la solution exacte $u(\boldsymbol{\mu})$ mais à une approximation que nous noterons toujours $u(\boldsymbol{\mu})$ appartenant à un espace de dimension finie $Y \subset X$. L'espace Y peut par exemple être un espace d'éléments finis et nous supposons que sa dimension, que nous noterons \mathcal{N} , est suffisamment grande pour la confondre avec la solution du problème continue. Par la suite, nous en référerons en parlant d'approximation "exacte".

Les méthodes de bases réduites reposent sur l'observation qu'en général la solution $u(\boldsymbol{\mu})$ est régulière par rapport au paramètre $\boldsymbol{\mu}$. Ainsi, la variété définie par

$$\mathcal{M}^\boldsymbol{\mu} = \{u(\boldsymbol{\mu}), \boldsymbol{\mu} \in D\},$$

possède une épaisseur de Kolmogorov dans X qui tend très vite vers zéro. Rappelons que l'épaisseur de Kolmogorov dans X d'un sous-espace $A \subset X$ est définie par (voir [108])

$$d_n(A, X) = \inf_{X_n} \sup_{x \in A} \inf_{x_n \in X_n} \|x - x_n\|_X,$$

où l'infimum est pris sur tous les espaces $X_n \subset X$ de dimension finie n . La convergence vers zéro de l'épaisseur de Kolmogorov de $\mathcal{M}^\boldsymbol{\mu}$ dans X reste encore bonne si on restreint l'infimum uniquement aux espaces de dimension finie engendrés par des éléments de $\mathcal{M}^\boldsymbol{\mu}$ (voir par exemple [94]). L'idée consiste alors à sélectionner un ensemble de paramètre $S_{n_b} = \{\boldsymbol{\mu}_1, \dots, \boldsymbol{\mu}_{n_b}\}$ et à introduire le nouvel espace d'approximation

$$W_{n_b} = \text{vect}\{\xi_i \equiv u(\boldsymbol{\mu}_i), 1 \leq i \leq n_b\},$$

où les fonctions de base ξ_i sont calculées avec l'approximation "exacte" et où n_b est très petit devant \mathcal{N} . On en déduit la formulation bases réduites : pour $\boldsymbol{\mu} \in D$, on cherche $u_{n_b}(\boldsymbol{\mu}) \in W_{n_b}$ solution de

$$a(u_{n_b}(\boldsymbol{\mu}), v; \boldsymbol{\mu}) = f(v), \quad \forall v \in W_{n_b}.$$

En écrivant $u_{n_b}(\boldsymbol{\mu}) = \sum_{j=1}^{n_b} u_{n_b j}(\boldsymbol{\mu}) \xi_j$ et en utilisant (3.2), on peut écrire

$$\sum_{j=1}^{n_b} \sum_{q=1}^Q \alpha^q(\boldsymbol{\mu}) a^q(\xi_i, \xi_j) u_{n_b j}(\boldsymbol{\mu}) = f(\xi_i), \quad 1 \leq i \leq n_b. \quad (3.3)$$

On aboutit ainsi à la résolution d'un système linéaire de la petite taille n_b . Signalons que Maday, Patera et Turinici [96] ont montré la convergence exponentielle de la méthode pour le problème (3.1).

L'autre ingrédient des méthodes bases réduites se situe au niveau de la mise en œuvre qui repose sur une décomposition hors-ligne/en-ligne que permet l'écriture (3.2).

- ▷ La partie hors-ligne est dédiée à la construction de la base W_{n_b} , à l'évaluation et au stockage des vecteurs $\ell(\xi_i)$, $f(\xi_i)$ et des matrices $a^q(\xi_i, \xi_j)$. Cette partie peut coûter cher car elle dépend de la grande dimension \mathcal{N} de l'approximation "exacte". Cependant, comme elle ne dépend pas du paramètre $\boldsymbol{\mu}$, elle n'est faite qu'une seule fois.
- ▷ Dans la partie en-ligne, pour tout nouveau paramètre $\boldsymbol{\mu}$, on assemble la matrice du système linéaire défini en (3.3) et on résout ce dernier. Cette partie ne coûte pas cher puisqu'elle ne dépend que de la petite taille n_b .

Cette décomposition permet de réduire les temps de calculs. Venons maintenant à la sélection des paramètres $\boldsymbol{\mu}_1, \dots, \boldsymbol{\mu}_{n_b}$ pour la construction de la base W_{n_b} . Elle est basée sur un algorithme Greedy [26, 109]. Étant donné un espace $W_{n_b} = \text{vect}\{\xi_i, 1 \leq i \leq n_b\}$, Le paramètre suivant $\boldsymbol{\mu}_{n_b+1}$ est sélectionné de la manière suivante

$$\boldsymbol{\mu}_{n_b+1} = \arg \max_{\boldsymbol{\mu} \in \Sigma_{\boldsymbol{\mu}}} \left\| u(\boldsymbol{\mu}) - \sum_{k=1}^{n_b} \langle u(\boldsymbol{\mu}), \xi_k \rangle_X \xi_k \right\|_Y,$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle_X$ désigne le produit scalaire dans X et $\Sigma_{\boldsymbol{\mu}}$ est une grille de paramètres de D . La nouvelle fonction de base ξ_{n_b+1} est alors la solution $u(\boldsymbol{\mu}_{n_b+1})$ orthonormalisée. Notons que le premier paramètre $\boldsymbol{\mu}_1$ est choisi au hasard dans $\Sigma_{\boldsymbol{\mu}}$.

Dans la pratique, les méthodes de bases réduites sont accompagnées d'estimateurs *a posteriori* afin de les rendre fiables (voir par exemple [92, 93, 109, 110]). Signalons enfin que des extensions de ces méthodes à des problèmes non linéaires et qui n'ont pas de dépendance affine par rapport à leurs paramètres existent. Elles reposent sur des développements des méthodes bases réduites annexes pour approcher les termes non linéaires et non affines (voir par exemple [18, 70, 95]).

3.2 Bases réduites appliquées aux équations de Maxwell [A8]

Les équations de Maxwell et approximation "exacte"

Dans un domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, on considère les équations de Maxwell harmoniques en temps :

$$\mathbf{rot} \mathbf{H} = i w \varepsilon_0 \varepsilon_r \mathbf{E}, \quad \text{dans } \Omega, \quad (3.4a)$$

$$\mathbf{rot} \mathbf{E} = -i w \mu_0 \mu_r \mathbf{H}, \quad \text{dans } \Omega, \quad (3.4b)$$

$$\mathbf{n} \times \mathbf{E} = \boldsymbol{\Phi}, \quad \text{sur } \partial\Omega, \quad (3.4c)$$

où les inconnus \mathbf{E} et \mathbf{H} sont respectivement les champs électrique et magnétique, ε_r et μ_r sont respectivement la permittivité électrique et la perméabilité relatives du milieu, ε_0 et μ_0 étant celles du vide. Enfin le champ $\boldsymbol{\Phi}$ est lié au champ électrique tangentiel au bord $\partial\Omega$. Posons $k = w \sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}$ et $\eta_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}$, le problème qui nous a intéressé est alors une formulation faible de (3.4) : pour une fréquence $k \in D \subset \mathbb{R}$ donné en entrée, on cherche $\mathbf{H}(k) \in X \equiv H(\mathbf{rot}; \Omega)$ solution de

$$a(\mathbf{H}(k), \mathbf{w}; k) = \varphi(\mathbf{w}; k), \quad \forall \mathbf{w} \in H(\mathbf{rot}; \Omega), \quad (3.5)$$

où

$$a(\mathbf{H}, \mathbf{w}; k) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{\varepsilon_r} \mathbf{rot} \mathbf{H} \cdot \mathbf{rot} \mathbf{w} - k^2 \mu_r \mathbf{H} \cdot \mathbf{w} \right) dx, \quad \varphi(\mathbf{w}; k) = -\frac{ik}{\eta_0} \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\Phi} \cdot \mathbf{w} ds.$$

Les éléments finis de Nédélec [99, 100, 101] ont été utilisés comme approximation "exacte".

Formulation bases réduites

On peut remarquer que l'application bilinéaire $a(\cdot, \cdot; k)$ est affine par rapport au paramètre k :

$$a(\mathbf{v}, \mathbf{w}; k) = a^K(\mathbf{v}, \mathbf{w}) - k^2 a^M(\mathbf{v}, \mathbf{w}),$$

avec

$$a^K(\mathbf{v}, \mathbf{w}) = \frac{1}{\varepsilon_r} \int_{\Omega} \mathbf{rot} \mathbf{v} \cdot \mathbf{rot} \mathbf{w} \, dx \quad \text{et} \quad a^M(\mathbf{v}, \mathbf{w}) = \mu_r \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} \, dx.$$

Introduisons l'espace bases réduites

$$W_{n_b} = \text{vect} \left\{ \xi_j \equiv \mathbf{H}(k_j), \quad 1 \leq j \leq n_b \right\},$$

construit à l'aide de l'algorithme Greedy. La formulation bases réduites est alors : pour $k \in D \subset \mathbb{R}$, on cherche $\mathbf{H}_{n_b}(k) \in W_{n_b}$ vérifiant

$$a(\mathbf{H}_{n_b}(k), \mathbf{w}; k) = \varphi(\mathbf{w}; k), \quad \forall \mathbf{w} \in W_{n_b}.$$

En écrivant $\mathbf{H}_{n_b}(k) = \sum_{j=1}^{n_b} h_{n_b j}(k) \xi_j$, on aboutie à la résolution du système suivant :

$$\sum_{j=1}^{n_b} (a^K(\xi_\ell, \xi_j) - k^2 a^M(\xi_\ell, \xi_j)) h_{n_b j} = \varphi(\xi_\ell, k), \quad 1 \leq \ell \leq n_b. \quad (3.6)$$

Nous pouvons ici appliquer la même procédure hors-ligne/en-ligne présentée dans l'introduction. La particularité dans (3.6) réside dans le second membre φ qui doit être évalué pour chaque paramètre k donné en entrée et donc qui ne peut pas être complètement calculée hors-ligne. Nous avons considéré des seconds membres affines par rapport à k de la forme

$$\varphi(\mathbf{w}; k) = -\frac{ik}{\eta_0} g(k) f(\mathbf{w}),$$

où f et g sont des fonctions données. Ainsi, la partie $-\frac{ik}{\eta_0} f(\xi_\ell)$, $1 \leq \ell \leq n_b$ est calculée hors-ligne. Les estimateurs *a posteriori* développés sont basés sur l'erreur résiduelle définie par

$$a(\mathbf{H}(k) - \mathbf{H}_{n_b}(k), \mathbf{w}; k) = \varphi(\mathbf{w}, k) - a(\mathbf{H}_{n_b}(k), \mathbf{w}; k) \equiv \psi(\mathbf{H}_{n_b}(k), \mathbf{w}; k).$$

La norme $\|\psi(\mathbf{H}_{n_b}(k), \cdot; k)\|_{X'}$ permet d'évaluer la précision de l'approximation bases réduites. Une expression de cette norme que l'on peut utiliser pour la calculer est obtenue en exploitant les expressions de $\varphi(\cdot, k)$, de $a(\cdot, \cdot; k)$ et en utilisant le théorème de représentation de Riesz.

Nous donnons ici un exemple où le problème est appliqué à un balayage de fréquence d'un résonateur diélectrique. La figure 3.1 montre l'erreur résiduelle lorsque la fréquence k varie de 4 à 8 GHz et lorsqu'on considère des bases réduites dont les dimensions varient de 7 à 17. On peut remarquer que cette erreur est inférieure à la tolérance placée à 10^{-3} pour une base réduite de dimension 17. Notons qu'ici, 43420 degrés de liberté ont été utilisés pour la méthode éléments finis.

3.3 Bases réduites appliquées à un problème en chimie quantique [N4]

Le modèle Restricted Hartree-Fock

Le calcul de l'état fondamental, c'est-à-dire l'état de plus basse énergie, d'un système moléculaire est le problème central en chimie quantique. Il est en effet le point de départ pour déterminer les propriétés physico-chimique du système. Sous l'approximation de Born-Oppenheimer,

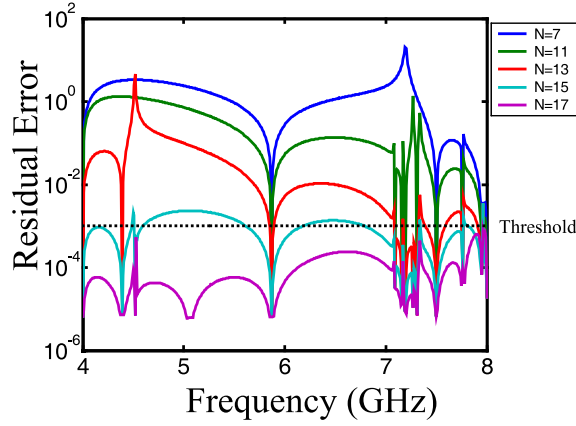


FIGURE 3.1 – Erreur résiduelle pour différentes dimensions de la base réduites

nous avons considéré un système moléculaire composé de M noyaux situés en $\bar{\mathbf{x}}_1 \in \mathbb{R}^3, \dots, \bar{\mathbf{x}}_M \in \mathbb{R}^3$ de charges électriques z_1, \dots, z_M et de n_e paires d'électrons. Le problème s'écrit alors comme un problème d'optimisation géométrique :

$$\inf \left\{ W(\bar{\mathbf{x}}_1, \dots, \bar{\mathbf{x}}_M), (\bar{\mathbf{x}}_1, \dots, \bar{\mathbf{x}}_M) \in \mathbb{R}^{3M} \right\}, \quad (3.7)$$

où l'énergie totale du système est définie par

$$W(\bar{\mathbf{x}}_1, \dots, \bar{\mathbf{x}}_M) = U(\bar{\mathbf{x}}_1, \dots, \bar{\mathbf{x}}_M) + \sum_{1 \leq k < \ell \leq M} \frac{z_k z_\ell}{|\bar{\mathbf{x}}_k - \bar{\mathbf{x}}_\ell|} \quad (3.8)$$

et où dans (3.8), le premier terme désigne l'énergie électronique et le deuxième terme désigne la répulsion internucléaire. On se concentre sur le calcul de l'énergie électronique, aussi appelé problème électronique. Dans le modèle Restricted Hartree-Fock, il s'écrit comme le problème de minimisation suivante :

$$U(\bar{\mathbf{x}}_1, \dots, \bar{\mathbf{x}}_M) = \inf \left\{ E^{RHF}(\Phi \equiv (\varphi_1, \dots, \varphi_{n_e})), \varphi_i \in H^1(\mathbb{R}^3), \int_{\mathbb{R}^3} \varphi_i \varphi_j = \delta_{ij}, 1 \leq i, j \leq n_e \right\}, \quad (3.9)$$

avec

$$E^{RHF}(\Phi) = \sum_{i=1}^{n_e} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \varphi_i|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} \rho_\Phi V + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho_\Phi(\mathbf{x}) \rho_\Phi(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d\mathbf{x} d\mathbf{y} - \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\tau_\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d\mathbf{x} d\mathbf{y},$$

où la matrice densité $\tau_\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, la densité électronique $\rho_\Phi(\mathbf{x})$ et le potentiel V sont donnés par

$$\tau_\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 2 \sum_{i=1}^{n_e} \varphi_i(\mathbf{x}) \varphi_i(\mathbf{y}), \quad \rho_\Phi(\mathbf{x}) = \tau_\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}), \quad V(\mathbf{x}) = - \sum_{k=1}^M \frac{z_k}{|\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}_k|}.$$

Dans (3.9), φ_i représente la fonction d'onde de la i ème paire d'électrons et est appelée orbitale moléculaire. Dans l'expression de E^{RHF} , le premier terme représente l'énergie cinétique des électrons, le deuxième, l'interaction électrostatique entre noyaux et électrons, le troisième, la répulsion inter-électronique et enfin le quatrième, un terme d'échange.

Nous voyons ici toutes les difficultés du calcul de (3.7) qui résident dans la résolution du problème électronique (3.9) pour un grand nombre de configurations $(\bar{\mathbf{x}}_1, \dots, \bar{\mathbf{x}}_M)$. De plus,

pour des systèmes d'intérêt réel, le nombre d'électrons est très grand (de l'ordre de 10^4). Il s'avère alors indispensable de réduire la complexité de (3.7).

Posons $\boldsymbol{\mu} = (\bar{\mathbf{x}}_1, \dots, \bar{\mathbf{x}}_M)$ et $X \equiv (H^1(\mathbb{R}^3))^{n_e}$. Les équations d'Euler-Lagrange associées au problème (3.9) consiste à chercher $(\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{\mu}), \boldsymbol{\lambda}) \in X \times \mathbb{R}^{\frac{n_e(n_e+1)}{2}}$ tel que

$$\begin{aligned} \forall (\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\omega}) \in X \times \mathbb{R}^{\frac{n_e(n_e+1)}{2}}, \\ \sum_{i=1}^{n_e} \left[\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \nabla \varphi_i \nabla \psi_i + \int_{\mathbb{R}^3} V \varphi_i \psi_i + 2 \sum_{j=1}^{n_e} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\varphi_j(\mathbf{y})|^2 \varphi_i(\mathbf{x}) \psi_i(\mathbf{x})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d\mathbf{x} d\mathbf{y} \right. \\ \left. - \sum_{j=1}^{n_e} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\varphi_i(\mathbf{y}) \varphi_j(\mathbf{y}) \varphi_j(\mathbf{x}) \psi_i(\mathbf{x})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d\mathbf{x} d\mathbf{y} - \sum_{j=1}^{n_e} \lambda_{ij} \int_{\mathbb{R}^3} \varphi_i \psi_j \right] \\ + \sum_{i=1}^{n_e} \sum_{j=i}^{n_e} \omega_{ij} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \varphi_i \varphi_j - \delta_{ij} \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Approximation "exacte"

Il nous a semblé utile de présenter ici la méthode numérique que nous supposons exacte, utilisée pour le calcul de la solution du modèle Restricted Hartree-Fock. On se réfère à [28, 86] pour une description plus détaillée. Elle est basée sur une approximation de type Galerkin. On introduit l'espace de dimension finie

$$\mathcal{V} = \text{vect} \{ \chi_k, 1 \leq k \leq \mathcal{N} \} \subset H^1(\mathbb{R}^3), \quad (3.11)$$

et l'espace

$$Y = \left\{ \boldsymbol{\Phi} \equiv (\varphi_1, \dots, \varphi_{n_e}), \varphi_i \in \mathcal{V}, \int_{\mathbb{R}^3} \varphi_i \varphi_j = \delta_{ij} \right\}.$$

Posons maintenant $C \in \mathcal{M}(\mathcal{N}, n_e)$ la matrice définie par :

$$\forall 1 \leq i \leq n_e, \quad \varphi_i(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} C_{ki} \chi_k(\mathbf{x})$$

et introduisons la matrice densité $D = CC^T$. Le problème (3.9) peut s'écrire sous la forme

$$\inf \{ E^{RHF}(D), D \in \mathcal{M}_S(\mathcal{N}), DSD = D, \text{Tr}(SD) = n_e \}. \quad (3.12)$$

où

$$S_{ij} = \int_{\mathbb{R}^3} \chi_i \chi_j, \quad (3.13)$$

$$\forall D \in \mathcal{M}_S(\mathcal{N}), \quad E^{RHF}(D) = 2\text{Tr}(hD) + \text{Tr}(G(D)D),$$

$$h_{ij} = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \nabla \chi_i \nabla \chi_j + \int_{\mathbb{R}^3} V \chi_i \chi_j, \quad (3.14)$$

$$G(D)_{ij} = \sum_{k, \ell=1}^{\mathcal{N}} \left[(ij|k\ell) - (ik|j\ell) \right] D_{k\ell},$$

$$(ij|k\ell) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\chi_i(\mathbf{x}) \chi_j(\mathbf{x}) \chi_k(\mathbf{y}) \chi_\ell(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d\mathbf{x} d\mathbf{y}. \quad (3.15)$$

Les équations d'Euler-Lagrange associées à (3.12) s'écrivent

$$\begin{cases} F(D)C = SCA, \\ C^T SC = I_{n_e}, \\ D = CC^T, \end{cases} \quad (3.16)$$

où $F(D) = h + G(D)$ est la matrice de Fock et $\Lambda \in \mathcal{M}_S(n_e)$ est la matrice des multiplicateurs de Lagrange associées aux contraintes d'orthonormalité $C^T SC = I_{n_e}$. On constate que (3.16) est un problème non linéaire aux valeurs propres. Nous avons utilisé l'algorithme ODA (Optimal Damping Algorithm) développé par Cancès et Le Bris [29] et qui repose sur la résolution du problème relaxé suivant :

$$\inf \left\{ E^{RHF}(D), D \in \mathcal{M}_S(n_e), DSD \leq D, \text{Tr}(SD) = n_e \right\}. \quad (3.17)$$

Les problèmes (3.12) et (3.17) ont les mêmes minima locaux (voir [28]). Mais l'avantage du problème (3.17) réside dans le fait que l'ensemble

$$\tilde{\mathcal{P}}_{n_e} = \left\{ \tilde{D} \in \mathcal{M}_S(n_e), \tilde{D}S\tilde{D} \leq \tilde{D}, \text{Tr}(S\tilde{D}) = n_e \right\}$$

est convexe. L'algorithme ODA s'écrit :

$$\triangleright F(\tilde{D}_n)C_{n+1} = SC_{n+1}E_{n+1}, \text{ avec } E_{n+1} = \text{Diag}(\epsilon_1^{n+1}, \dots, \epsilon_{n_e}^{n+1})$$

$$\triangleright C_{n+1}^T SC_{n+1} = I_{n_e}$$

$$\triangleright D_{n+1} = C_{n+1}C_{n+1}^T$$

$$\triangleright \tilde{D}_{n+1} = \text{arginf} \left\{ E^{RHF}(\tilde{D}), \tilde{D} \in \text{Seg}[\tilde{D}_n, D_{n+1}] \right\}$$

où $\epsilon_1^{n+1} \leq \epsilon_2^{n+1} \leq \dots \leq \epsilon_{n_e}^{n+1}$ sont les n_e plus petites valeurs propres de

$$F(\tilde{D}_n)\Phi = \epsilon S\Phi,$$

les vecteurs propres associés forment les colonnes de la matrice C_{n+1} , et

$$\text{Seg}[\tilde{D}_n, D_{n+1}] = \left\{ (1 - \lambda)\tilde{D}_n + \lambda D_{n+1}, \lambda \in [0, 1] \right\}.$$

Du fait de la diagonalisation de la matrice de Fock $F(\tilde{D}_n)$, la complexité de l'algorithme ODA est en $O(\mathcal{N}^3)$. Par ailleurs, comme on a toujours $\mathcal{N} \geq n_e$, on peut voir que le calcul de l'énergie électronique est en pratique limité à des systèmes moléculaires de petite taille.

Venons en à l'espace de dimension finie introduit en (3.11). Nous avons fait le choix d'un espace \mathcal{V} engendré par des bases d'orbitales atomiques. Ces dernières sont des fonctions de bases utilisées pour résoudre le problème Restricted Hartree-Fock (3.9) au niveau des atomes. On parle alors d'approximation LCAO (Linear Combinaison of Atomic Orbitals). Ainsi, pour un système moléculaire donné, les fonctions de bases χ_μ engendrant \mathcal{V} regroupent toutes les orbitales atomiques relatives à tous les atomes du système. Les orbitales atomiques les plus efficaces sont des combinaisons finies de gaussiennes-polynômes de la forme $\chi_\mu = \xi(\cdot - \bar{\mathbf{x}}_k)$, où

$$\xi(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^K C_k x_1^{n_1^k} x_2^{n_2^k} x_3^{n_3^k} e^{-\alpha_k |\mathbf{x}|^2}.$$

Cette classe d'orbitales atomiques, introduite par Boys [23], réduit grandement les coûts des calculs des termes (3.13), (3.14) et (3.15). En particulier, (3.15) peut être réduit au calcul d'intégrale sur $[0, 1]$ de la forme

$$F(w) = \int_0^1 e^{-ws^2} ds.$$

Notons qu'un code appelé A.S.P.I.C (Atomic Simulations Packages In C++) a été développé, entre le Cermics et le Laboratoire Jacques-Louis Lions, et permet en particulier de résoudre le modèle Restricted Hartree-Fock avec l'approximation LCAO. Nous avons programmé à l'intérieur d'A.S.P.I.C afin d'insérer nos procédures bases réduites que nous allons à présent décrire.

Formulations bases réduites

Nous avons développé une approche bases réduites pour le problème Restricted Hartree-Fock écrit sous la forme des équations d'Euler-Lagrange (3.10). Considérons un ensemble $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^{3M}$ et le paramètre $\boldsymbol{\mu} = (\bar{\mathbf{x}}_1, \dots, \bar{\mathbf{x}}_M) \in \mathcal{D}$. Les équations (3.10) étant un problème non linéaire aux valeurs propres, deux approches sont possibles : l'approche mode par mode, où

$$\varphi_i(\boldsymbol{\mu}) \simeq \sum_{k=1}^{n_b} \beta_i^k(\boldsymbol{\mu}) \varphi_i(\boldsymbol{\mu}_k), \quad 1 \leq i \leq n_e,$$

et l'approche vectorielle

$$\varphi_i(\boldsymbol{\mu}) \simeq \sum_{k=1}^{n_b} \beta^k(\boldsymbol{\mu}) \varphi_i(\boldsymbol{\mu}_k), \quad 1 \leq i \leq n_e.$$

Mais on peut constater que dans la première approche, la dimension de la base réduite est $n_b \times n_e$; le nombre de degré liberté croît de manière linéaire avec le nombre d'électrons. À l'inverse, on peut remarquer que les coefficients $\beta^k(\boldsymbol{\mu})$ de la deuxième approche, ne dépendent pas du nombre d'électrons. De plus, des tests préliminaires basés sur la meilleure approximation par projection, ont montré que la deuxième approche nécessitait un nombre de degrés de liberté plus faible. Ainsi nous avons choisi de poursuivre avec cette dernière approche. Remarquons maintenant qu'au vu de l'algorithme ODA présenté précédemment, la construction de la base réduite nécessite de chercher les n_e fonctions propres $\varphi_i(\boldsymbol{\mu}_k)$ associées aux n_e premières valeurs propres rangées par ordre croissant. Mais du fait de croisements possibles de valeurs propres, pour deux valeurs proches $\boldsymbol{\mu}$ et $\boldsymbol{\mu}^*$ du paramètre, la fonction $\varphi_i(\boldsymbol{\mu}^*)$ peut être plus proche de $\varphi_{i+1}(\boldsymbol{\mu})$ que de $\varphi_i(\boldsymbol{\mu})$; de même $+\varphi_i(\boldsymbol{\mu})$ et $-\varphi_i(\boldsymbol{\mu})$ sont des fonctions propres possibles. Nous avons donc proposé une procédure pour classer et orienter les fonctions propres par similarité en suivant l'approche utilisée dans [30, 105]. Nous avons ensuite utilisé l'algorithme Greedy présenté dans l'introduction pour construire la base réduite $W_{n_b} = \text{vect}\{\Phi(\boldsymbol{\mu}_k), 1 \leq k \leq n_b\}$.

Les tests préliminaires sur la meilleure approximation ont montré des résultats satisfaisants et les vérifications effectuées sur les contraintes orthogonalité nous ont conduit à ne pas nécessairement tous en tenir compte dans la formulation bases réduites du problème (3.10) qui s'écrit alors : trouver $(\Phi_{n_b}(\boldsymbol{\mu}), \boldsymbol{\lambda}_{n_b}(\boldsymbol{\mu})) \in W_{n_b} \times \mathbb{R}^{n_e + \varepsilon(n_e - 1)}$ tel que pour tout $(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\omega}) \in W_{n_b} \times$

$$\begin{aligned}
 & \mathbb{R}^{n_e + \varepsilon(n_e - 1)}, \\
 & \sum_{i=1}^{n_e} \left[\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \nabla \varphi_{n_b, i} \nabla \psi_i + \int_{\mathbb{R}^3} V \varphi_{n_b, i} \psi_i + 2 \sum_{j=1}^{n_e} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\varphi_{n_b, j}(\mathbf{y})|^2 \varphi_{n_b, i}(\mathbf{x}) \psi_i(\mathbf{x})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d\mathbf{x} d\mathbf{y} \right. \\
 & - \sum_{j=1}^{n_e} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\varphi_{n_b, i}(\mathbf{y}) \varphi_{n_b, j}(\mathbf{y}) \varphi_{n_b, j}(\mathbf{x}) \psi_i(\mathbf{x})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d\mathbf{x} d\mathbf{y} - \lambda_{n_b, ii} \int_{\mathbb{R}^3} \varphi_{n_b, i} \psi_j \left. \right] + \sum_{i=1}^{n_e} \omega_{ii} \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\varphi_{n_b, i}|^2 - 1 \right) \\
 & + \varepsilon \left[\sum_{i=1}^{n_e - 1} -\lambda_{n_b, ii+1} \int_{\mathbb{R}^3} \varphi_{n_b, i} \psi_{i+1} + \omega_{ii+1} \int_{\mathbb{R}^3} \varphi_{n_b, i} \varphi_{n_b, i+1} \right] = 0,
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

où $\Phi_{n_b}(\boldsymbol{\mu}) = (\varphi_{n_b, i}, 1 \leq i \leq n_e)$ et $\boldsymbol{\lambda}_{n_b}(\boldsymbol{\mu}) = (\lambda_{n_b, 11}(\boldsymbol{\mu}), \dots, \lambda_{n_b, n_e n_e}(\boldsymbol{\mu}), \varepsilon \lambda_{n_b, 12}, \dots, \varepsilon \lambda_{n_b, n_e - 1 n_e}(\boldsymbol{\mu}))$ et où ε prend les valeurs 0 ou 1. En comparant avec (3.10), on constate que nous avons gardé toutes les contraintes de normalité et le cas échéant, les contraintes d'orthogonalité adjacentes en choisissant $\varepsilon = 1$. Le système est de taille $n_b + n_e + \varepsilon(n_e - 1)$ et nous avons utilisé une méthode de Newton pour le résoudre.

Les résultats numériques obtenus sur la molécule d'eau, avec comme paramètre un couple $\boldsymbol{\mu} = (\theta, d)$ où θ est l'angle entre les deux liaisons hydrogène et oxygène et d est une des deux distances $H-O$, ont montré une convergence d'ordre 9 de la méthode. L'ordre de convergence en erreur relative sur l'énergie E^{RHF} est le double. Cela indique que E^{RHF} peut être bien approchée avec une base réduite de petite dimension. Dans la figure 3.2 nous avons représenté deux courbes d'énergie totale W définie en (3.8), de la molécule d'eau en fonction de l'angle entre les deux liaisons. Pour une des courbes, le calcul de E^{RHF} a été fait avec l'approximation "exacte" LCAO en considérant 65 degrés de libertés. Pour l'autre courbe, E^{RHF} a été calculé par bases réduites avec $n_b = 7$; ce qui fait 13 degrés de libertés en comptant les $n_e = 5$ contraintes de normalité (ici nous avons pris $\varepsilon = 0$). Nous pouvons remarquer que les deux courbes sont confondues. L'erreur relative en énergie E^{RHF} est de l'ordre de 10^{-8} .

Notons qu'ici, nous n'avons pas utilisé la décomposition hors-ligne/en-ligne présentée dans l'introduction et donc, les temps de calcul restent coûteux. Le développement de cette décomposition en traitant les termes non linéaires et non affines par rapport aux paramètres par les méthodes introduites dans [18, 70, 95], constitue une continuation naturelle de travaux réalisés ici. Une autre extension possible réside dans le développement d'estimateurs *a posteriori* pour évaluer la précision de l'approximation.

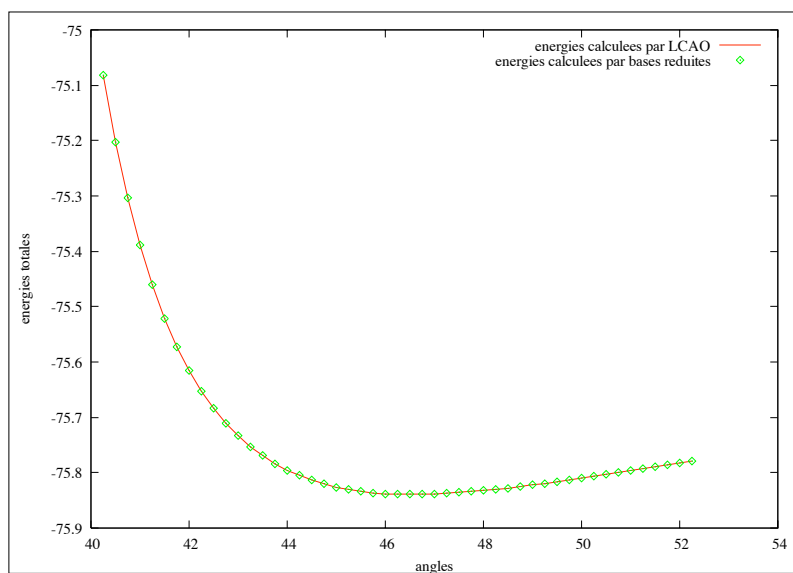


FIGURE 3.2 – comparaison entre les deux énergies totales

Chapitre 4

Perspectives

Nous réunissons dans ce chapitre quelques travaux en cours ou des projets de recherche à explorer qui sont dans la continuité de ceux présentés dans ce mémoire.

Problèmes elliptiques en domaine non borné. Après avoir étudié les équations stationnaire d'Oseen dans tout l'espace et dans des domaines extérieurs, avec Mohamed Meslameni, nous réfléchissons sur une question naturelle : *que peut-on dire sur ces équations dans un demi-espace ?*

À notre connaissance, il existe très peu de travaux sur ce problème dans la littérature. Nous pouvons uniquement citer ceux de Hillairet et Wittwer [75] sur la version scalaire des équations d'Oseen (1.14) dans un demi-plan. Contrairement au cas du domaine extérieur, le bord d'un demi-espace est non borné. Ainsi les théorèmes de trace usuels ne sont plus utilisables ici et cela constitue une difficulté supplémentaire. Mais la plus grande difficulté réside dans le fait, qu'à notre connaissance, l'anisotropie des équations d'Oseen semble rendre difficile (voire impossible) l'utilisation du principe de réflexion qui consiste à se ramener à tout l'espace et qui a été utilisé pour les problèmes de Laplace et de Stokes (voir par exemple [10, 21, 22, 48]).

Trafic routier et piétonnier. Nous poursuivons les travaux menées dans la section 2.2 sur deux points.

- ▷ Nous introduisons actuellement une classe plus générale de contraintes afin de pouvoir tenir compte du temps dans l'influence de l'efficacité d'une sortie. En reprenant la contrainte (2.7), nous définissons

$$q(t) = \mathcal{Q}[\rho](t), \quad p.p. \text{ sur } [0, T], \quad (4.1)$$

où T est un temps final donné et \mathcal{Q} est une application définie par

$$\mathcal{Q} : \mathcal{C}^0([0, T]; L^1(\mathbb{R}, \mathbb{R})) \rightarrow L^1([0, T]; [0, f_{\max}]),$$

où, en gardant les mêmes notations que celles de la section 2.2, le flux f est définie de $[0, R]$ vers $[0, f_{\max}]$. Notons que la contrainte non locale (2.6c) du modèle ADR entre dans cette classe. Nous donnons un autre exemple ci-dessous :

$$\mathcal{Q}[\rho](t) = p \left(\int_{\mathbb{R}^-} \int_0^t w(x) \kappa(t-s) \rho(s, x) ds dx \right),$$

où $w \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}, \mathbb{R}^+)$ est à support compact et croissante, $\kappa \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^+; \mathbb{R}^+)$ est à support compact et décroissante. Ici, l'opérateur \mathcal{Q} reproduit la situation où l'efficacité de la sortie dépend des valeurs de la densité dans $\text{supp } \kappa(t - \cdot) \times \text{supp } w$. Par ailleurs, l'hypothèse de décroissance de la fonction κ traduit le fait que les valeurs de la densité éloignées dans le temps n'ont pas d'influence sur l'efficacité de la sortie. Ces contraintes généralisées permettent de prendre en compte des feux de circulation et, par conséquent, d'étudier les questions d'optimisation de trafic. Nous avons aussi bon espoir que ce type de contraintes peut permettre de prendre en compte certaines réactions moyennes des piétons ou des automobilistes qui peuvent influencer l'efficacité d'une sortie. Un exemple d'un tel comportement moyen est l'auto-organisation qui a été mise en évidence par des données expérimentales par Cepolina et Tyler [31]. Ce comportement se traduit par une remontée de l'efficacité d'une sortie après la chute, sans toutefois atteindre le niveau initial.

- ▷ Dans le trafic routier, des données expérimentales suggèrent que le modèle LWR (2.6a), (2.6b), (2.8) est insuffisant pour décrire un trafic encombré. Des modèles plus précis, dit de second ordre, qui font intervenir un système de deux lois de conservation ont été développés. Avec Julien Yves Rolland qui a rejoint le groupe, nous prévoyons d'étudier les effets de la chute d'une capacité d'une sortie avec des modèles de second ordre. Actuellement nous avons considéré le modèle d'Aw-Rascle [16] et Zhang [120] (ARZ) que l'on peut écrire sous la forme :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v) = 0 \\ \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(y v) = 0, \end{cases} \quad (4.2)$$

où y est définie par

$$y = \rho w, \quad w = v + \mathfrak{p}(\rho),$$

et \mathfrak{p} est appelé fonction d'anticipation qui prend en compte la réaction des automobilistes par rapport à l'état du trafic se trouvant devant eux. Nous ajoutons au modèle la contrainte définie

$$\rho(t, 0\pm)v(t, 0\pm) \leq q(t), \quad (4.3)$$

où q est définie par (2.6c) et sera, dans un avenir plus ou moins proche, définie par la contrainte généralisée (4.1). Dans l'approximation de (4.2) par volumes finis, nous utilisons les schémas proposés dans [33, 59] pour calculer les discontinuités de contact et pour la prise en compte de la contrainte.

Modèle d'épidémiologie. À travers une thèse qui débutera en septembre 2015, que nous encadrerons avec Mustapha Mokhtar-Kharroubi et Antoine Perasso, nous envisageons d'étendre les travaux menés dans [A14] sur au moins deux points :

- ▷ Le premier consiste à étudier le comportement en temps long du modèle (2.22) avec une condition de bord non locale et non autonome, afin d'étudier l'impact d'une source de contamination externe de maladie. Cela permet aussi de prendre en compte des cas plus réalistes de source de contamination externe.
- ▷ Le deuxième consiste à considérer des fonctions de croissance de la maladie plus générale et non nécessairement exponentielle.

Bibliographie

- [1] ADIMURTHI, GHOSHAL, S. S., AND GOWDA, G. D. V. Optimal controllability for scalar conservation laws with convex flux. *J. Hyperbolic Differ. Equ.* **11**, 3 (2014), 477–491.
- [2] ADIMURTHI, GHOSHAL, S. S., AND VEERAPPA GOWDA, G. D. Exact controllability of scalar conservation laws with strict convex flux. *Math. Control Relat. Fields* **4**, 4 (2014), 401–449.
- [3] ALLIOT, F., AND AMROUCHE, C. Weak solutions for the exterior Stokes problem in weighted Sobolev spaces. *Math. Methods Appl. Sci.* **23**, 6 (2000), 575–600.
- [4] ALMROTH, B. O., STERN, P., AND BROGAN, F. A. Automatic choice of global shape functions in structural analysis. *AIAA Journal* **16** (1978), 525–528.
- [5] AMROUCHE, C., AND BOUZIT, H. L^p -inequalities for scalar Oseen potential. *J. Math. Anal. Appl.*, **337** (2008), 753–770.
- [6] AMROUCHE, C., GIRAULT, V., AND GIROIRE, J. Weighted Sobolev spaces for Laplace’s equation in \mathbb{R}^n . *J. Math. Pures Appl. (9)* **73**, 6 (1994), 579–606.
- [7] AMROUCHE, C., GIRAULT, V., AND GIROIRE, J. Dirichlet and Neumann exterior problems for the n -dimensional Laplace operator : an approach in weighted Sobolev spaces. *J. Math. Pures Appl. (9)* **76**, 1 (1997), 55–81.
- [8] AMROUCHE, C., AND MESLAMENI, M. Stokes problem with several types of boundary conditions in an exterior domain. *Electron. J. Differential Equations No.* **196**, 28 pp (2013).
- [9] AMROUCHE, C., MESLAMENI, M., AND NEČASOVÁ, Š. The stationary Oseen equations in an exterior domain : an approach in weighted Sobolev spaces. *J. Differential Equations* **256**, 6 (2014), 1955–1986.
- [10] AMROUCHE, C., AND RAUDIN, Y. Reflection principles and kernels in \mathbb{R}_+^n for the biharmonic and Stokes operators. Solutions in a large class of weighted Sobolev spaces. *Adv. Differential Equations* **15**, 3-4 (2010), 201–230.
- [11] AMROUCHE, C., AND SELOULA, N. E. H. L^p -theory for vector potentials and Sobolev’s inequalities for vector fields : application to the Stokes equations with pressure boundary conditions. *Math. Models Methods Appl. Sci.* **23**, 1 (2013), 37–92.
- [12] ANCONA, F., AND MARSON, A. On the attainable set for scalar nonlinear conservation laws with boundary control. *SIAM J. Control Optim.* **36**, 1 (1998), 290–312 (electronic).
- [13] ANDREIANOV, B., DONADELLO, C., AND ROSINI, M. D. Crowd dynamics and conservation laws with nonlocal constraints and capacity drop. *Math. Models Methods Appl. Sci.* **24**, 13 (2014), 2685–2722.
- [14] ANDREIANOV, B., GOATIN, P., AND SEGUIN, N. Finite volume schemes for locally constrained conservation laws. *Numer. Math.* **115**, 4 (2010), 609–645. With supplementary material available online.

-
- [15] AUDUSSE, E., BOUCHUT, F., BRISTEAU, M.-O., KLEIN, R., AND PERTHAME, B. A fast and stable well-balanced scheme with hydrostatic reconstruction for shallow water flows. *SIAM J. Sci. Comput.* **25**, 6 (2004), 2050–2065.
- [16] AW, A., AND RASCLE, M. Resurrection of “second order” models of traffic flow. *SIAM J. Appl. Math.* **60**, 3 (2000), 916–938.
- [17] BABENKO, K. On stationary solutions of the problem of flow past a body of a viscous incompressible fluid. *Math. USSR, Sb.* **20** (1973), 1–25.
- [18] BARRAULT, M., MADAY, Y., NGUYEN, N. C., AND PATERA, A. T. An ‘empirical interpolation’ method : application to efficient reduced-basis discretization of partial differential equations. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris* **339**, 9 (2004), 667–672.
- [19] BEVEN, K. On undermining the science? *Hydrol. Process.* **20** (2006), 2050–2065.
- [20] BOUCHUT, F. *Nonlinear stability of finite volume methods for hyperbolic conservation laws and well-balanced schemes for sources*. Frontiers in Mathematics. Birkhäuser Verlag, Basel, 2004.
- [21] BOULMEZAOUD, T. Z. On the Stokes system and on the biharmonic equation in the half-space : an approach via weighted Sobolev spaces. *Math. Methods Appl. Sci.* **25**, 5 (2002), 373–398.
- [22] BOULMEZAOUD, T. Z. On the Laplace operator and on the vector potential problems in the half-space : an approach using weighted spaces. *Math. Methods Appl. Sci.* **26**, 8 (2003), 633–669.
- [23] BOYS, S. F. Electronic wavefunctions I : A general method of calculation for the stationary states of any molecular system. *Proc. Roy. Soc. A* **200** (1950), 542–554.
- [24] BRAESS, D., NAGURNEY, A., AND WAKOLBINGER, T. On a paradox of traffic planning. *Transp. Sci.* **39** (2005), 446–450.
- [25] BRISTEAU, M.-O., AND COUSSIN, B. Boundary conditions for the shallow water equations solved by kinetics schemes. *Inria report RR-4282* (2001).
- [26] BUFFA, A., MADAY, Y., PATERA, A. T., PRUD’HOMME, C., AND TURINICI, G. *A priori* convergence of the greedy algorithm for the parametrized reduced basis method. *ESAIM Math. Model. Numer. Anal.* **46**, 3 (2012), 595–603.
- [27] BURTON, J., BILLINGS, L., CUMMINGS, D. A. T., AND SCHWARTZ, I. B. Disease persistence in epidemiological models : the interplay between vaccination and migration. *Math. Biosci.* **239**, 1 (2012), 91–96.
- [28] CANCÈS, E., DEFRANCESCHI, M., KUTZELNIGG, W., LE BRIS, C., AND MADAY, Y. Computational quantum chemistry : a primer. In *Le Bris, Claude (ed.), Special volume : Computational chemistry*. Amsterdam : North-Holland. *Handb. Numer. Anal.* **10**, 3-270 . 2003.
- [29] CANCÈS, E., AND LE BRIS, C. Can we outperform the DIIS approach for electronic structure calculation. *Int. J. Quantum Chem.* **79** (2000), 82–90.
- [30] CANCÈS, E., LE BRIS, C., MADAY, Y., NGUYEN, N. C., PATERA, A. T., AND PAU, G. S. H. Feasibility and competitiveness of a reduced basis approach for rapid electronic structure calculations in quantum chemistry. In *High-dimensional partial differential equations in science and engineering*, vol. **41** of *CRM Proc. Lecture Notes*. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2007, pp. 15–47.

- [31] CEPOLINA, E., AND TYLER, N. Understanding capacity drop for designing pedestrian environments. In *6th International Walk21 Conference*. Zurich, 2005.
- [32] CEPOLINA, E. M. Phased evacuation : An optimisation model which takes into account the capacity drop phenomenon in pedestrian flows. *Fire Safety J.* **44**, 4 (2009), 532–544.
- [33] CHALONS, C., AND GOATIN, P. Transport-equilibrium schemes for computing contact discontinuities in traffic flow modeling. *Commun. Math. Sci.* **5**, 3 (2007), 533–551.
- [34] CHALONS, C., GOATIN, P., AND SEGUIN, N. General constrained conservation laws. Application to pedestrian flow modeling. *Netw. Heterog. Media* **8**, 2 (2013), 433–463.
- [35] CLARK, D. C. The vorticity at infinity for solutions of the stationary Navier-Stokes equations in exterior domains. *Indiana Univ. Math. J.* **20** (1970/1971), 633–654.
- [36] COLOMBO, R. M., AND GOATIN, P. A well posed conservation law with a variable unilateral constraint. *J. Differential Equations* **234**, 2 (2007), 654–675.
- [37] COLOMBO, R. M., GOATIN, P., AND ROSINI, M. D. A macroscopic model for pedestrian flows in panic situations. In *Current advances in nonlinear analysis and related topics*, vol. 32 of *GAKUTO Internat. Ser. Math. Sci. Appl.* Gakkōtoshō, Tokyo, 2010, pp. 255–272.
- [38] COLOMBO, R. M., AND ROSINI, M. D. Pedestrian flows and non-classical shocks. *Math. Methods Appl. Sci.* **28**, 13 (2005), 1553–1567.
- [39] COLOMBO, R. M., AND ROSINI, M. D. Existence of nonclassical solutions in a pedestrian flow model. *Nonlinear Anal. Real World Appl.* **10**, 5 (2009), 2716–2728.
- [40] DAFERMOS, C. M. *Hyperbolic conservation laws in continuum physics*, vol. 325 of *Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences]*. Springer-Verlag, Berlin, 2000.
- [41] DE SAINT-VENANT, A. J.-C. Théorie du mouvement non-permanent des eaux, avec application aux crues des rivières et à l’introduction des marées dans leur lit. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris* **73** (1871), 147–154.
- [42] DELESTRE, O. *Simulation du ruissellement d’eau de pluie sur des surfaces agricoles*. Thèse de Doctorat. Université d’Orléans, 2010.
- [43] DIEKMANN, O., AND HEESTERBEEK, J. A. P. *Mathematical epidemiology of infectious diseases*. Wiley Series in Mathematical and Computational Biology. John Wiley & Sons, Ltd., Chichester, 2000. Model building, analysis and interpretation.
- [44] DIEKMANN, O., HEESTERBEEK, J. A. P., AND METZ, J. A. J. On the definition and the computation of the basic reproduction ratio R_0 in models for infectious diseases in heterogeneous populations. *J. Math. Biol.* **28**, 4 (1990), 365–382.
- [45] EYMARD, R., GALLOUËT, T., AND HERBIN, R. Finite volume methods. In *Handbook of numerical analysis, Vol. VII*, Handb. Numer. Anal., VII. North-Holland, Amsterdam, 2000, pp. 713–1020.
- [46] FARWIG, R. The stationary exterior 3D-problem of Oseen and Navier-Stokes equations in anisotropically weighted Sobolev spaces. *Math. Z.* **211**, 3 (1992), 409–447.
- [47] FARWIG, R. A variational approach in weighted Sobolev spaces to the operator $-\Delta + \partial/\partial x_1$ in exterior domains of \mathbb{R}^3 . *Math. Z.* **210**, 3 (1992), 449–464.
- [48] FARWIG, R. A note on the reflection principle for the biharmonic equation and the Stokes system. *Acta Appl. Math.* **37**, 1-2 (1994), 41–51.

-
- [49] FARWIG, R. The stationary Navier-Stokes equations in a 3D-exterior domain. In *Recent topics on mathematical theory of viscous incompressible fluid (Tsukuba, 1996)*, vol. 16 of *Lecture Notes Numer. Appl. Anal.* Kinokuniya, Tokyo, 1998, pp. 53–115.
- [50] FARWIG, R., AND SOHR, H. Weighted estimates for the Oseen equations and the Navier-Stokes equations in exterior domains. In *Theory of the Navier-Stokes equations*, vol. 47 of *Ser. Adv. Math. Appl. Sci.* World Sci. Publishing, River Edge, NJ, 1998, pp. 11–30.
- [51] FATEMI, E., ENGQUIST, B., AND OSHER, S. Numerical solution of the high frequency asymptotic expansion for the scalar wave equation. *J. Comput. Phys.* **120**, 1 (1995), 145–155.
- [52] FERRARI, S., AND SALERI, F. A new two-dimensional shallow water model including pressure effects and slow varying bottom topography. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.* **38**, 2 (2004), 211–234.
- [53] FINN, R. Estimates at infinity for stationary solutions of the Navier-Stokes equations. *Bull. Math. Soc. Sci. Math. Phys. R. P. Roumaine (N.S.)* **3**(51) (1959), 387–418.
- [54] FINN, R. On the exterior stationary problem for the Navier-Stokes equations, and associated perturbation problems. *Arch. Rational Mech. Anal.* **19** (1965), 363–406.
- [55] FUJITA, H. On the existence and regularity of the steady-state solutions of the Navier-Stokes equations. *J. Fac. Sci. Univ. Tokyo* **9** (1961), 59–102.
- [56] GALDI, G. P. On the asymptotic structure of D -solutions to steady Navier-Stokes equations in exterior domains. In *Mathematical problems relating to the Navier-Stokes equation*, vol. 11 of *Ser. Adv. Math. Appl. Sci.* World Sci. Publishing, River Edge, NJ, 1992, pp. 81–104.
- [57] GALDI, G. P. *An introduction to the mathematical theory of the Navier-Stokes equations. Vol. I*, vol. 38 of *Springer Tracts in Natural Philosophy*. Springer-Verlag, New York, 1994.
- [58] GALDI, G. P. *An introduction to the mathematical theory of the Navier-Stokes equations. Vol. II*, vol. 39 of *Springer Tracts in Natural Philosophy*. Springer-Verlag, New York, 1994.
- [59] GARAVELLO, M., AND GOATIN, P. The Aw-Rascle traffic model with locally constrained flow. *J. Math. Anal. Appl.* **378**, 2 (2011), 634–648.
- [60] GERBEAU, J.-F., AND PERTHAME, B. Derivation of viscous Saint-Venant system for laminar shallow water ; numerical validation. *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B* **1**, 1 (2001), 89–102.
- [61] GIRAULT, V. The gradient, divergence, curl and Stokes operators in weighted Sobolev spaces of \mathbb{R}^3 . *J. Fac. Sci. Univ. Tokyo Sect. IA Math.* **39**, 2 (1992), 279–307.
- [62] GIRAULT, V. The Stokes problem and vector potential operator in three-dimensional exterior domains : an approach in weighted Sobolev spaces. *Differential Integral Equations* **7**, 2 (1994), 535–570.
- [63] GIRAULT, V., GIROIRE, J., AND SEQUEIRA, A. A stream-function–vorticity variational formulation for the exterior Stokes problem in weighted Sobolev spaces. *Math. Methods Appl. Sci.* **15**, 5 (1992), 345–363.
- [64] GIROIRE, J. *Étude de quelques problèmes aux limites extérieurs et résolution par équations intégrales*. Thèse de Doctorat d’Etat. Université Pierre et Marie Curie, Paris, 1987.

- [65] GODLEWSKI, E., AND RAVIART, P.-A. *Hyperbolic systems of conservation laws*, vol. 3/4 of *Mathématiques & Applications (Paris) [Mathematics and Applications]*. Ellipses, Paris, 1991.
- [66] GODLEWSKI, E., AND RAVIART, P.-A. *Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws*, vol. 118 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 1996.
- [67] GODUNOV, S. K. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. *Mat. Sb. (N.S.)* **47** (89) (1959), 271–306.
- [68] GOSSE, L., AND JAMES, F. Numerical approximations of one-dimensional linear conservation equations with discontinuous coefficients. *Math. Comp.* **69**, 231 (2000), 987–1015.
- [69] GOURLEY, S. A., RÖST, G., AND THIEME, H. R. Uniform persistence in a model for blue-tongue dynamics. *SIAM J. Math. Anal.* **46**, 2 (2014), 1160–1184.
- [70] GREPL, M. A., MADAY, Y., NGUYEN, N. C., AND PATERA, A. T. Efficient reduced-basis treatment of nonaffine and nonlinear partial differential equations. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.* **41**, 3 (2007), 575–605.
- [71] HAGENAARS, T. J., DONNELLY, C. A., FERGUSON, N. M., AND ANDERSON, R. M. The transmission dynamics of the aetiological agent of scrapie in a sheep flock. *Math. Biosci.* **168**, 2 (2000), 117–135.
- [72] HANOUZET, B. Espaces de Sobolev avec poids. Application au problème de Dirichlet dans un demi espace. *Rend. Sem. Mat. Univ. Padova* **46** (1971), 227–272.
- [73] HELBING, D., FARKAS, I., AND VICSEK, T. Simulating dynamical features of escape panic. *Nature* **407** (2000), 487–490.
- [74] HERVOUET, J. M. *Hydrodynamique des écoulements à surface libre, modélisation numérique avec la méthode des éléments finis*. Presses des Ponts et Chaussées, 2003.
- [75] HILLAIRET, M., AND WITWER, P. On the vorticity of the Oseen problem in a half plane. *Phys. D* **237**, 10-12 (2008), 1388–1421.
- [76] HOOGENDOORN, S. P., AND DAAMEN, W. Pedestrian behavior at bottlenecks. *Transp. Sci.* **39**, 2 (2005), 147–159.
- [77] HUGHES, R. L. The flow of human crowds. *Annu. rev. Fluid Mech.* **35**, 1 (2003), 169–182.
- [78] JETTEN, V., DE ROO, A., AND FAVIS-MORTLOCK, D. Evaluation of field-scale and catchment-scale soil erosion models. *Catena* **37** (1999), 521–541.
- [79] K., N. A., AND M., P. J. Reduced basis technique for nonlinear analysis of structures. *AIAA Journal* **18**, 4 (1980), 455–462.
- [80] KAISER, R., NEUDERT, M., AND VON WAHL, W. On the existence of force-free magnetic fields with small nonconstant α in exterior domains. *Comm. Math. Phys.* **211**, 1 (2000), 111–136.
- [81] KOROBKOV, M. V., AND PANOV, E. Y. On isentropic solutions of first-order quasilinear equations. *Mat. Sb.* **197**, 5 (2006), 99–124.
- [82] KOZONO, H., AND YANAGISAWA, T. L^r -variational inequality for vector fields and the Helmholtz-Weyl decomposition in bounded domains. *Indiana Univ. Math. J.* **58**, 4 (2009), 1853–1920.

-
- [83] KRAČMAR, S., NOVOTNÝ, A., AND POKORNÝ, M. Estimates of Oseen kernels in weighted L^p spaces. *J. Math. Soc. Japan* **53**, 1 (2001), 59–111.
- [84] KRETZ, T., GRÜNEBOHM, A., KAUFMAN, M., MAZUR, F., AND SCHRECKENBERG, M. Experimental study of pedestrian counterflow in a corridor. *J. Statist. Mech. : Theory and Experiment* **2006**, 10 (2006), P10001.
- [85] LADYZHENSKAYA, O. A. *The mathematical theory of viscous incompressible flow*. Second English edition, revised and enlarged. Translated from the Russian by Richard A. Silverman and John Chu. Mathematics and its Applications, Vol. 2. Gordon and Breach Science Publishers, New York, 1969.
- [86] LE BRIS, C. Computational chemistry from the perspective of numerical analysis. *Acta Numer.* **14** (2005), 363–444.
- [87] LE ROUX, M. N. *Résolution numérique du problème du potentiel dans le plan par une méthode variationnelle d'éléments finis*. Thèse de 3^e cycle. Université de Rennes, 1974.
- [88] LERAY, J. Étude de diverses équations intégrales non linéaires et de quelques problèmes que pose l'hydrodynamique. *J. Math. Pures Appl.* **12** (1933), 1–82.
- [89] LEVEQUE, R. J. *Numerical methods for conservation laws*, second ed. Lectures in Mathematics ETH Zürich. Birkhäuser Verlag, Basel, 1992.
- [90] LEVEQUE, R. J. *Finite volume methods for hyperbolic problems*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [91] LIGHTHILL, M. J., AND WHITHAM, G. B. On Kinematic Waves. II. A Theory of Traffic Flow on Long Crowded Roads. *Proc. Roy. Soc. London Ser. A* **229** (1955), 317–345.
- [92] MACHIELS, L., MADAY, Y., OLIVEIRA, I. B., PATERA, A. T., AND ROVAS, D. V. Output bounds for reduced-basis approximations of symmetric positive definite eigenvalue problems. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.* **331**, 2 (2000), 153–158.
- [93] MACHIELS, L., MADAY, Y., AND PATERA, A. T. Output bounds for reduced-order approximations of elliptic partial differential equations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **190**, 26-27 (2001), 3413–3426.
- [94] MADAY, Y. Reduced basis method for the rapid and reliable solution of partial differential equations. In *International Congress of Mathematicians. Vol. III*. Eur. Math. Soc., Zürich, 2006, pp. 1255–1270.
- [95] MADAY, Y., NGUYEN, N. C., PATERA, A. T., AND PAU, G. S. H. A general multipurpose interpolation procedure : the magic points. *Commun. Pure Appl. Anal.* **8**, 1 (2009), 383–404.
- [96] MADAY, Y., PATERA, A. T., AND TURINICI, G. A priori convergence theory for reduced-basis approximations of single-parameter elliptic partial differential equations. In *Proceedings of the Fifth International Conference on Spectral and High Order Methods (ICOSAHOM-01) (Uppsala)* (2002), vol. **17**, pp. 437–446.
- [97] MARCHE, F. Derivation of a new two-dimensional viscous shallow water model with varying topography, bottom friction and capillary effects. *Eur. J. Mech. B Fluids* **26**, 1 (2007), 49–63.
- [98] MIGLIO, E., QUARTERONI, A., AND SALERI, F. Finite element approximation of quasi-3D shallow water equations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **174**, 3-4 (1999), 355–369.

- [99] MONK, P. *Finite element methods for Maxwell's equations*. Numerical Mathematics and Scientific Computation. Oxford University Press, New York, 2003.
- [100] NÉDÉLEC, J.-C. Mixed finite elements in \mathbf{R}^3 . *Numer. Math.* **35**, 3 (1980), 315–341.
- [101] NÉDÉLEC, J.-C. A new family of mixed finite elements in \mathbf{R}^3 . *Numer. Math.* **50**, 1 (1986), 57–81.
- [102] NEUDERT, M., AND VON WAHL, W. Asymptotic behaviour of the div-curl problem in exterior domains. *Adv. Differential Equations* **6**, 11 (2001), 1347–1376.
- [103] OSHER, S. Riemann solvers, the entropy condition, and difference approximations. *SIAM J. Numer. Anal.* **21**, 2 (1984), 217–235.
- [104] PARISI, D., AND DORSO, C. Microscopic dynamics of pedestrian evacuation. *Physica A* **354** (2005), 606 – 618.
- [105] PAU, G. S. H. *Reduced basis method for quantum models of periodic solids*. Thèse de Doctorat. Massachusetts Institute of Technology, 2007.
- [106] PERASSO, A., LAROCHE, B., CHITOUR, Y., AND TOUZEAU, S. Identifiability analysis of an epidemiological model in a structured population. *J. Math. Anal. Appl.* **374**, 1 (2011), 154–165.
- [107] PERTHAME, B. *Transport equations in biology*. Frontiers in Mathematics. Birkhäuser Verlag, Basel, 2007.
- [108] PINKUS, A. *n-widths in approximation theory*, vol. 7 of *Ergebnisse der Mathematik und ihrer Grenzgebiete (3) [Results in Mathematics and Related Areas (3)]*. Springer-Verlag, Berlin, 1985.
- [109] PRUD'HOMME, C., ROVAS, D., VEROY, K., MADAY, Y., PATERA, A. T., AND TURINICI, G. Reliable real-time solution of parametrized partial differential equations : Reduced basis output bound methods. *J. Fluids Engrg.* **124**, 1 (2002), 70–80.
- [110] PRUD'HOMME, C., ROVAS, D. V., VEROY, K., AND PATERA, A. T. A mathematical and computational framework for reliable real-time solution of parametrized partial differential equations. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.* **36**, 5 (2002), 747–771. Programming.
- [111] RICHARDS, P. I. Shock waves on the highway. *Oper. Res.* **4**, 1 (1956), 42–51.
- [112] ROSINI, M. D. Nonclassical interactions portrait in a macroscopic pedestrian flow model. *J. Differential Equations* **246**, 1 (2009), 408–427.
- [113] SHIMOMURA, T., AND MIZUTA, Y. Taylor expansion of Riesz potentials. *Hiroshima Math. J.* **25**, 3 (1995), 595–621.
- [114] SMITH, H. L., AND THIEME, H. R. *Dynamical systems and population persistence*, vol. 118 of *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, Providence, RI, 2011.
- [115] SORIA, S. A., JOSENS, R., AND PARISI, D. R. Experimental evidence of the “Faster is Slower” effect in the evacuation of ants. *Safety Sci.* **50**, 7 (2012), 1584–1588.
- [116] STEIN, E. M. *Singular integrals and differentiability properties of functions*. Princeton Mathematical Series, No. 30. Princeton University Press, Princeton, N.J., 1970.
- [117] STRINGER, S. M., HUNTER, N., AND WOOLHOUSE, M. E. J. A mathematical model of the dynamics of scrapie in a sheep flock. *Math. Biosci.* **153**, 2 (1998), 79–98.

- [118] THIEME, H. R. *Mathematics in population biology*. Princeton Series in Theoretical and Computational Biology. Princeton University Press, Princeton, NJ, 2003.
- [119] THIEME, H. R., TRIDANE, A., AND KUANG, Y. An epidemic model with post-contact prophylaxis of distributed length. I. Thresholds for disease persistence and extinction. *J. Biol. Dyn.* **2**, 2 (2008), 221–239.
- [120] ZHANG, H. A non-equilibrium traffic model devoid of gas-like behavior. *Transportation Res., Part B* **36**, 3 (2002), 275 – 290.