

Développement et analyse de schémas numériques robustes et précis sur mailles grossières

Informations principales

- Unité de recherche : LAGA
- Discipline : Mathématiques
- Direction de thèse : E. Audusse (USP) & C. Escalante Sanchez (Univ. Malaga)
- Contact : audusse@math.univ-paris13.fr
- Domaine de recherche : Analyse numérique en lien avec l'océanographie
- Mots-clés : Analyse numérique, méthode volumes finis, réseaux de neurones, systèmes hyperboliques, mécanique des fluides, équilibre géostrophique.

Contexte

Dans de nombreux contextes, et en particulier, pour ce qui nous intéresse, en océanographie aux grandes échelles, il est nécessaire, pour des contraintes de temps de calcul, de travailler avec des grilles espace-temps relativement grossières. Deux problèmes se posent alors :

- Préserver des structures stationnaires grandes échelles importantes pour l'écoulement : ces structures peuvent être résolues par le schéma mais si elles sont effectivement approchées à l'ordre d'erreur du schéma, lié à la taille de la discrétisation, l'erreur numérique peut être importante et peut, en temps court, masquer des perturbations physiques de taille inférieure et, en temps long, diffuser ces structures sur des échelles de temps bien inférieures à celles effectivement observées. Nous proposons, en nous plaçant dans la catégorie des schémas volumes finis dits équilibrés, ou well-balanced, de développer des schémas précis autour de l'équilibre géostrophique, équilibre fondamental de la structure des océans et de l'atmosphère aux grandes échelles et qui pose des problèmes aujourd'hui non résolus en raison de son caractère intrinsèquement bidimensionnel ;
- Modéliser les structures petites échelles qui impactent les grandes échelles : ces structures de taille inférieure à la maille ne peuvent pas être résolues explicitement par le schéma mais comme elles ont un impact sur les échelles résolues, via la dissipation de l'énergie, par exemple, elles doivent être modélisées pour obtenir des résultats cohérents. Plusieurs modélisations sont possibles. Les fermetures empiriques sont à la base de la plupart des codes industriels actuels. Les fermetures stochastiques ont été introduites pour étudier les modèles dont la dynamique est chaotique. Les fermetures par apprentissage profond constitue une alternative récente quand les données disponibles sont suffisantes. Nous proposons de travailler sur les fermetures par apprentissage et de proposer une analyse s'appuyant sur une approche relevant de l'analyse fonctionnelle et de l'analyse numérique, ce qui est encore peu courant

dans la littérature sur le sujet.

Encadrement

La thèse sera réalisée en codirection entre Paris 13 et l'université de Malaga. Plus précisément, je serai le codirecteur à Paris 13 et Cipriano Escalante Sanchez sera le codirecteur à Malaga. La collaboration entre les deux pôles au sein du réseau européen Numerical methods for hyperbolic problems with source terms (NumHyp) est ancienne. Carlos Pares, responsable de l'équipe à Malaga, a coorganisé la première conférence de la série en 2009 à Castro Urdiales et j'ai coorganisé la deuxième à Roscoff. Nous sommes tous deux membres du comité scientifique du réseau depuis 2013. Un véritable travail commun ne s'est toutefois enclenché qu'en 2024 à l'occasion du séjour de Carlos Pares en temps que professeur invité à Paris 13. C'est lors de ce séjour qu'ont démarré les travaux qui nous conduisent aujourd'hui à proposer ce sujet de thèse. Cipriano Escalante Sanchez est un jeune chercheur de l'équipe de Malaga. Son travail de thèse a été sélectionné en 2018 par la société espagnole de mathématiques appliquées (SEMA) pour représenter l'Espagne pour le prix de thèse européen ECCOMAS. Il a depuis publié de nombreux articles, en particulier sur les schémas "équilibre" pour des modèles de type Saint-Venant.

Projet

Schémas préservant l'équilibre géostrophique

Les schémas volumes finis dits "équilibre" ont pour but de préserver exactement des états stationnaires particuliers d'un système d'équations. Ces schémas ont été développés à l'origine, à la fin des années 90, pour préserver l'équilibre dit du lac au repos dans les équations de Saint-Venant. Ils ont depuis été étendus à de nombreux autres contextes, la plupart du temps pour des équilibres monodimensionnels ou pour des équilibres multidimensionnels très simples (par exemple à vitesse nulle en hydrodynamique).

Nos deux équipes, à Paris et à Malaga, ont été parmi les premières à s'intéresser au développement de ce type de schémas. Mon travail de thèse au sein de l'équipe INRIA BANG, publié en 2004 [Audusse et al., JCP 2004], portait ainsi sur l'étude de cette première génération de schémas volumes finis "équilibre" destinés à préserver l'équilibre dit du lac au repos. La méthode a eu un impact important dans la communauté volumes finis hyperboliques, y compris en terme d'implémentation logiciel, et de très nombreuses variantes et améliorations ont été publiées, voir par exemple [Castro et al., M3AS, 2007; Bouchut-Morales, SIAM-JNA 2010; Morales et al., AMC, 2013; Chen-Noelle, SIAM-JNA, 2017; Berthon et al. JSC, 2019; Ersing et al., JCP 2025]. En particulier, une première extension visant la préservation de l'équilibre géostrophique, mais uniquement en une dimension

d'espace, a été proposée dans [Bouchut et al., JFM, 2004]. L'équipe de Malaga, qui compte parmi ses membres des coauteurs des trois premières publications mentionnées ci-dessus, a elle aussi publié son premier travail portant spécifiquement sur les schémas équilibres en 2004 [Castro & Pares, M2AN 2004] et a conduit depuis de très nombreux travaux sur le sujet qui ont eux aussi eu un impact important, à la fois aux niveaux académique et opérationnel puisque les systèmes d'alerte aux tsunamis de plusieurs pays méditerranéens reposent sur leurs développements logiciels [J. Macías et al., 2017 et M.J. Castro et al. 2017]. L'équipe a récemment publié un travail consacré à la préservation des équilibres géostrophiques monodimensionnels [González Tabernero et al., App. Math. Comp, 2024].

Plus récemment, nos deux équipes se sont intéressées à la préservation des équilibres géostrophiques bidimensionnels. Ces états stationnaires, liés à un équilibre entre forces de pression et (pseudo-)force induite par la rotation de la terre, sont d'une importance considérable pour les écoulements aux très grandes échelles atmosphériques et océaniques. Ils sont intrinsèquement bidimensionnels et font intervenir des vitesses non nulles (le champ de vitesse est simplement à divergence nulle). Ils posent donc des défis nouveaux. Nous avons, chacun de notre côté, publié des premiers travaux sur grilles cartésiennes. D'une part, avec des collègues de l'équipe ANGE, nous avons pu proposer ce qui est, à notre connaissance, le premier schéma volumes finis colocalisé qui préserve asymptotiquement l'équilibre géostrophique et possède des propriétés de stabilité non linéaire [Audusse et al., SIAM JSC 2025]. Une limitation importante de ce travail est que le schéma proposé est spécifique et que la méthode ne peut donc pas s'adapter à un cadre pré-existant, ce qui limite les possibilités d'implémentation dans des codes opérationnels. D'autre part, l'équipe de Málaga a proposé un schéma volumes finis d'ordre deux et trois asymptotiquement bien équilibré pour le système de Saint-Venant avec Coriolis en coordonnées sphériques sur des maillages cartésiens [A. González et al., SIAM JNA 2025], mais pour laquelle on ne sait pas démontrer, pour le moment, une propriété de stabilité. Nous avons ainsi décidé d'engager un travail commun sur le sujet, qui constituera le premier axe de recherche de cette thèse, avec comme objectif de proposer une méthode générique, au sens où elle pourrait être appliquée à tous schémas volumes finis et sur maillages quelconques, ce qui permettrait de modifier facilement les codes opérationnels existants, et possédant des propriétés de convergence asymptotique.

Etude mathématique de l'algorithme Aphynity

Introduite en 2021 par une équipe de Sorbonne Université, la méthode Aphynity [Yuan Yin et al J. Stat. Mech., 2021] consiste à corriger par apprentissage un modèle formulé sous forme d'équation aux dérivées partielles (EDP) associée à un schéma numérique de résolution. Dans cette approche, un terme prenant la forme d'un réseau de neurones est ajouté à l'EDP pour corriger une erreur de discrétisation, de mesure ou de modèle. L'apprentissage est alors réalisé en boucle externe du schéma utilisé, si bien que l'entraînement

se déroule indirectement, à travers celui-ci. La méthode Aphynity a eu un impact notable dans la communauté du "scientific machine learning" mais son analyse mathématique et numérique n'a jamais été menée et c'est ce que nous proposons comme deuxième axe de travail dans cette thèse.

Au sein du pôle parisien, dans deux travaux préliminaires, nous avons considéré une version simplifiée de cette méthode, où la fonctionnelle de coût minimisée pendant l'apprentissage (la "loss") traduisait seulement l'erreur de reproduction de données de trajectoires, là où Aphynity pose cette reproduction comme une contrainte et considère une loss basée sur la minimisation de la correction. Un chapitre de la thèse de Léon Migus traitait de cette approche du point de vue informatique, en investiguant les effets des différents choix possibles pour les schémas numériques et pour l'architecture du réseau [Migus, SU, 2023]. Le dernier chapitre de la thèse de Norbert Tognon abordait ces questions sous un angle mathématique et donnait lieu à un tout premier résultat d'approximation qui montrait que, sous certaines hypothèses, l'ordre d'approximation du terme correctif dans le problème inverse était celui de l'ordre du schéma numérique dans le problème direct [Tognon, SU, 2025]. L'équipe de Malaga s'est elle aussi intéressée à l'utilisation de techniques d'apprentissage en lien avec des schémas numériques. Des collègues de cette équipe ont ainsi présenté très récemment (EGU 2026) un travail dans lequel des modèles de réseaux neuronaux sont entraînés sur de grands ensembles de scénarios de tsunamis issus de leurs simulations numériques, permettant une inférence rapide des indicateurs d'impact côtier.

Nous souhaitons maintenant mettre nos expertises en commun pour aborder l'étude de la méthode Aphynity elle-même. Dans un premier temps, nous souhaitons étudier le système d'optimalité associé à la méthode pour démontrer des résultats d'existence et d'unicité puis des résultats sur l'ordre d'approximation. La difficulté sera ici de prendre en compte la contrainte de reproduction des données de trajectoire considérée dans Aphynity. Dans un second temps, nous étudierons les aspects plus opérationnels, en particulier l'élaboration d'une stratégie visant à ajuster le réseau de neurone et le schéma numérique considérés en proposant une méthode constructive permettant d'équilibrer les erreurs d'approximation du réseau et du schéma. Un des résultats du travail pourrait être de proposer des variantes permettant de certifier des résultats mathématiques robustes.

Références

Pole Paris

- Time parallelization and machine learning for optimal control and inverse problems, N. Tognon, PhD Thesis, Sorbonne Université, 2025.
- Energy stable and linearly well-balanced numerical schemes for the non-linear Shallow Water equations with Coriolis force, E. Audusse, V. Dubos, N. Gaveau, Y.

- Penel. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2025.
- Réseaux de neurones profonds et équations aux dérivées partielles, L. Migus, PhD Thesis, Sorbonne Université, 2023.
- Analysis of modified Godunov type schemes for the two-dimensional linear wave equation with Coriolis source term on cartesian meshes, E. Audusse, M.H. Do, P. Omnes, Y. Penel, *Journal of Computational Physics*, 2018.
- A fast and stable well-balanced scheme with hydrostatic reconstruction for shallow water flows, E. Audusse, F. Bouchut, M.O. Bristeau, R. Klein, B. Perthame, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2004.

Pole Malaga

- AI- and HPC-Driven Tsunami Decision Support for the Spanish TEWS : Atlantic Results and Western Mediterranean Extension, J.F. Rodríguez Gálvez, J. Macías Sánchez, B. Gaite Castrillo, C. Sánchez Linares, A. González del Pino, M.J. Castro Díaz, J.V. Cantavella Nadal, L.C. Puertas González, EGU 2026.
- High-order well-balanced schemes for shallow models for dry avalanches. M.J. Castro Díaz, C. Escalante, J. Garres-Díaz, T. Morales de Luna, *Applied Numerical Mathematics*, 2025.
- Asymptotically well-balanced geostrophic reconstruction finite volumes numerical schemes for the 2D rotating NLSWE in spherical coordinates, A. González del Pino, M.J. Castro and J. Macías. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2025.
- High-order well-balanced numerical schemes for one-dimensional shallow-water systems with Coriolis terms. V. García-Tabernero, M.J. Castro Diaz and J.A. García-Rodríguez. *Applied Mathematics and Computation*, 2024.
- Well-balanced schemes and path-conservative numerical methods. M.J. Castro, T. Morales de Luna and C. Parés. *Handbook of numerical analysis*, 2017.