DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

Schémas volumes finis positifs d'ordre arbitraire pour la diffusion sur maillage quelconque

Xavier BLANC, François HERMELINE, Emmanuel LABOURASSE, Julie PATELA (julie.patela@cea.fr) | 23 Mai 2023

Sommaire

Sommaire

Problème continu

L'opérateur de diffusion apparaît dans de nombreux problèmes (conduction thermique, diffusion radiative, équations de Navier-Stokes...).

Cas de l'équation de la chaleur stationnaire

$$\begin{cases} -\nabla \cdot \kappa \nabla \bar{u} = f & \text{sur} \quad \Omega, \\ \bar{u} = g & \text{sur} \quad \partial\Omega \end{cases}$$

avec $\bar{u} \in H^1(\Omega)$, $f \in L^2(\Omega)$, $g \in H^{1/2}(\partial\Omega)$, $\kappa \in L^\infty(\Omega)$, $\kappa(x) \geq \kappa_0 > 0, \forall x$.

Propriétés de ce problème :

- Il existe une unique solution et elle satisfait le principe du maximum faible (*i.e* $f, g \geq 0 \implies \bar{u} \geq 0$),
- Conservativité : $\forall \omega \subset \Omega, \displaystyle\int_\omega f = -\int_{\partial\omega} (\kappa \nabla \bar{u}) \cdot n.$

Propriétés souhaitées pour ce schéma :

- Conservativité,
- Préserver la positivité de la solution discrète,
- Consistance, Convergence.

Objectif

Discrétiser l'opérateur de diffusion de manière robuste et précise sur maillage déformé.

- Conservativité
- Positivité
- Ordre très élevé (au moins 3)

Quelques repères bibliographiques

- Xavier Blanc, Emmanuel Labourasse, Journal of Applied Mathematics and Mechanics, 2016 : Positivité (ordre 2).
- Bruno Després, ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis, EDP Sciences, 2014 : Ordre élevé, principe du maximum (1D, maillage cartésien).
- Jean-Sylvain Camier, François Hermeline, International journal for numerical methods in engineering, 2016 : Positivité (ordre 2).
- Jérôme Droniou, Chritophe Le Potier, SIAM Journal on Numerical Analysis, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2011 : Principe du maximum (ordre 2).
- ...

Schéma d'ordre élevé positif en 1D[1]

- Schéma d'ordre arbitraire
- Conservatif
- Positivité (et principe du maximum si symétrisation)
- Coefficient de diffusion discontinu
- Consistance des flux à l'ordre k
- Convergence du schéma à l'ordre $k-1$ sous hypothèse de stabilité
- Convergence du schéma à l'ordre k sous hypothèse de coercivité

[1] Xavier Blanc, François Hermeline, Emmanuel Labourasse, Julie Patela, *High-order monotone finite-volume schemes for 1D elliptic problems*, 2022.

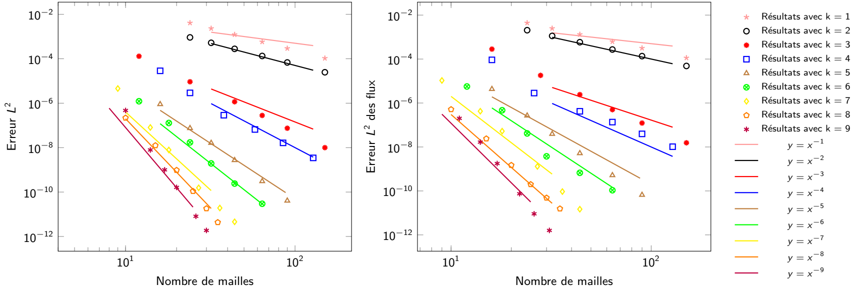
Résultats 1D

Considérons la fonction

$$\bar{u}(x) = \sin(\pi x) - 2x^2 + 4$$

avec $\kappa = \exp(x)$. On a alors

$$\begin{cases} f(x) = 4\exp(x) + 4x\exp(x) - \pi\cos(\pi x)\exp(x) + \pi^2\exp(x)\sin(\pi x), \\ g(0) = 4 \text{ et } g(1) = 2. \end{cases}$$



Sommaire

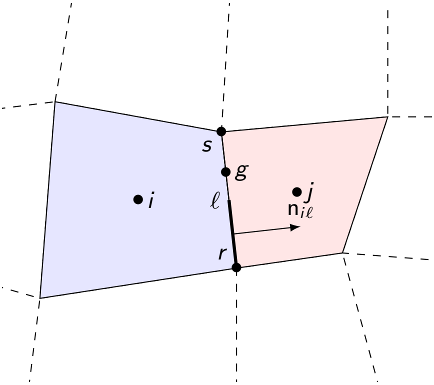


Figure: Maillage primal

- r et s : des sommets,
- ℓ : une arête du maillage primal, de mesure $|\ell|$,
- i et j : des mailles,
- g : un point de quadrature des Gauss sur l'arête ℓ,
- x_r : la position du sommet r,
- x_j : la position du centre de gravité de la maille j,
- x_ℓ : la position du centre de l'arête ℓ,
- V_j : le volume de la maille j.
- $\mathrm{n}_{i\ell}$: la normale unitaire à l'arête ℓ, sortante pour la maille i.

Considérons le problème suivant

$$\begin{cases} -\nabla \cdot \kappa \nabla \bar{u} = f & \text{dans } \Omega, \\ \bar{u} = g & \text{sur } \Gamma, \end{cases}$$

avec $\bar{u} \in \mathcal{C}^k(\Omega)$, $f \in L^2(\Omega)$, $g \in H^{1/2}(\partial\Omega)$, $\kappa \in L^\infty(\Omega)$, $\kappa(x) \geq \kappa_0 > 0, \forall x$.

La première étape de construction d'un schéma aux volumes finis est d'intégrer sur une maille i. Nous avons donc

$$-\sum_{\ell \in \partial i} \underbrace{\int_\ell \kappa \nabla \bar{u} \cdot \mathrm{n}}_{\text{Flux à approcher}} = \int_i f,$$

c'est-à-dire

$$-\sum_{\ell \in \partial i} |\ell| \sum_{g \in \ell} \omega_g \kappa_g \left(\nabla \bar{u}\right)_g \cdot \mathrm{n}_{i\ell} \approx \int_i f,$$

avec ω_g les poids de la quadrature de Gauss.

Nous devons approcher le gradient

$$\left(\nabla \bar{u}\right)_g \cdot \mathrm{n}_{i\ell}.$$

Schéma idéal

- Convergent à un ordre élevé
- Linéaire
- Conservatif
- Positivité

$\Longrightarrow$ Trop de contraintes, donc nous devons négocier et nous sacrifions la linéarité

Caractéristiques principales du schéma

- Nos choix :
  - Schéma aux volumes finis,
  - Basé sur des développements de Taylor,
  - Utiliser une reconstruction polynomiale pour évaluer les dérivées.
- Pour avoir la positivité :
  - Schéma non linéaire.

Sommaire

Développements de Taylor intégrés à l'ordre k au voisinage de x_g

$$\begin{aligned}
\bar{u}_j &= \frac{1}{V_j}\int_j \bar{u}(x)dx = \bar{u}(x_g) + (x_j - x_g)\cdot\nabla\bar{u}(x_g) \\
&+ \sum_{p=2}^{k}\frac{1}{V_j p!}\sum_{m=0}^{p}\binom{p}{m}\frac{\partial^p \bar{u}}{\partial x^m \partial y^{(p-m)}}(x_g)\int_j (x-x_g)^m (y-y_g)^{(p-m)}dx + \mathcal{O}\left(h^{k+1}\right), \\
\bar{u}_i &= \bar{u}(x_g) + (x_i - x_g)\cdot\nabla\bar{u}(x_g) \\
&+ \sum_{p=2}^{k}\frac{1}{V_i p!}\sum_{m=0}^{p}\binom{p}{m}\frac{\partial^p \bar{u}}{\partial x^m \partial y^{(p-m)}}(x_g)\int_i (x-x_g)^m (y-y_g)^{(p-m)}dx + \mathcal{O}\left(h^{k+1}\right).
\end{aligned}$$

En faisant la différence entre les deux expressions et en isolant $\nabla\bar{u}(x_g)$

$$(x_j - x_i)\cdot\nabla\bar{u}(x_g) = \bar{u}_j - \bar{u}_i - \underbrace{\sum_{p=2}^{k}\frac{1}{p!}\sum_{m=0}^{p}\binom{p}{m}\frac{\partial^p \bar{u}}{\partial x^m \partial y^{(p-m)}}(x_g)}$$

$$\underbrace{\left(\frac{1}{V_j}\int_j (x-x_g)^m (y-y_g)^{(p-m)}dx - \frac{1}{V_i}\int_i (x-x_g)^m (y-y_g)^{(p-m)}dx\right) + \mathcal{O}\left(h^{k+1}\right)}_{\bar{r}_{ij}}.$$

En répétant ce processus sur les sommets r et s de l'arête, on obtient

$$(\mathrm{x}_s - \mathrm{x}_r) \cdot \nabla \bar{u}(\mathrm{x}_g) = \bar{u}(\mathrm{x}_s) - \bar{u}(\mathrm{x}_r) \underbrace{- \sum_{p=2}^{k} \frac{1}{p!} \sum_{m=0}^{p} \binom{p}{m} \frac{\partial^p \bar{u}}{\partial x^m \partial y^{(p-m)}}(\mathrm{x}_g) \left((x - x_g)^m (y - y_g)^{(p-m)} - (x - x_g)^m (y - y_g)^{(p-m)} \right) + \mathcal{O}\left(h^{k+1}\right)}_{\bar{r}_{rs}}.$$

Nous avons alors le système

$$\begin{cases} \nabla \bar{u}(\mathrm{x}_g) \cdot (\mathrm{x}_j - \mathrm{x}_i) = \bar{u}_j - \bar{u}_i + \bar{r}_{ij}, \\ \nabla \bar{u}(\mathrm{x}_g) \cdot (\mathrm{x}_s - \mathrm{x}_r) = \bar{u}(\mathrm{x}_s) - \bar{u}(\mathrm{x}_r) + \bar{r}_{rs}. \end{cases}$$

Nous pouvons décomposer la normale $\mathrm{n}_{i\ell}$ dans la base $((\mathrm{x}_j - \mathrm{x}_i), (\mathrm{x}_s - \mathrm{x}_r))$

$$\mathrm{n}_{i\ell} = \alpha_{i\ell}(\mathrm{x}_j - \mathrm{x}_i) + \beta_{i\ell}(\mathrm{x}_s - \mathrm{x}_r),$$

avec $\alpha_{i\ell} \geq 0$.
Ainsi, nous avons

$$(\nabla \bar{u})_g \cdot \mathrm{n}_{i\ell} = \alpha_{i\ell} \left(\bar{u}_j - \bar{u}_i + \bar{r}_{ij} \right) + \beta_{i\ell} \left(\bar{u}(\mathrm{x}_s) - \bar{u}(\mathrm{x}_r) + \bar{r}_{rs} \right).$$

Reconstruction polynomiale

Calcul d'un polynôme par maille en utilisant ses mailles voisines afin d'effectuer une reconstruction polynomiale de la solution.

Polynôme de d°k : $\frac{(k+1)(k+2)}{2}$ coefficients $\Rightarrow (k+1)(k+2)$ mailles voisines de i[2,3]

$$P_i(\mathrm{x}) = \sum_{m=0}^{k} \sum_{n=0}^{k-m} a_{mn}(\mathrm{u})(x - x_i)^m (y - y_i)^n.$$

Pour cela, nous calculons les coefficients du polynôme $P_i(\mathrm{x})$ tels que

$$\frac{1}{V_j} \int_j P_i(\mathrm{x}) = u_j, \forall j \in \mathcal{S}_i.$$

Méthode des moindres carrés

$$M^T M \mathrm{a} = M^T \mathrm{d}$$

Nous avons donc

$$\partial_x^\ell \bar{u}(\mathrm{x}_g) \approx P_i^{(\ell)}(\mathrm{x}_g).$$

[2] Michael Dumbser, Walter Boscheri, Matteo Semplice, Giovanni Russo, *Central weighted eno schemes for hyperbolic conservation laws on fixed and moving unstructured meshes*, SIAM Journal on Scientific Computing, 2017.

[3] Martin Kser, Armin Iske, *Ader schemes on adaptive triangular meshes for scalar conservation laws*, Journal of Computational Physics, 2005.

Choix du stencil

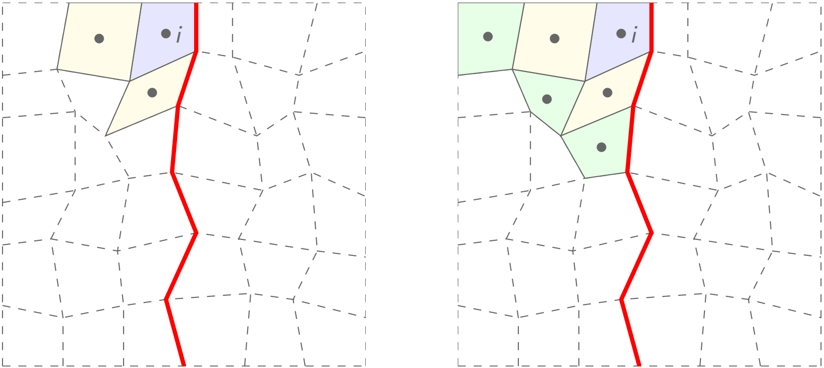


Figure: Construction du stencil pour une maille *i* avec une discontinuité (en rouge)

Soit $\mathrm{u} = (u_i)_{1\leq i\leq n}$ notre solution discrète. Nos flux numériques sont définis par

$$\mathcal{F}_\ell(\mathrm{u}) = |\ell| \sum_{g\in\ell} \omega_g \kappa_g \left(\alpha_{i\ell}\left(u_j - u_i + r_{ij}(\mathrm{u})\right) + \beta_{i\ell}\left(P(\mathrm{x}_s) - P(\mathrm{x}_r) + r_{rs}(\mathrm{u})\right)\right),$$

Autrement dit

$$\mathcal{F}_\ell(\mathrm{u}) = \gamma_\ell(u_j - u_i) + r_\ell(\mathrm{u}),$$

avec

$$\begin{cases} r_\ell(\mathrm{u}) = |\ell| \sum_{g\in\ell} \omega_g \kappa_g \left(\alpha_{i\ell} r_{ij}(\mathrm{u}) + \beta_{i\ell}(P(\mathrm{x}_s) - P(\mathrm{x}_r) + r_{rs}(\mathrm{u}))\right), \\ \gamma_\ell = \alpha_{i\ell}|\ell| \sum_{g\in\ell} \omega_g \kappa_g \geq 0. \end{cases}$$

En s'inspirant de Y. Gao *et al.*[4] pour imposer la positivité discrète

$$\mathcal{F}_\ell(\mathrm{u}) = \gamma_\ell(u_j - u_i) + r_\ell(\mathrm{u}).$$

Tout d'abord, posons

$$r_\ell(\mathrm{u})^+ = \frac{|r_\ell(\mathrm{u})| + r_\ell(\mathrm{u})}{2} \geq 0 \quad \text{et} \quad r_\ell(\mathrm{u})^- = \frac{|r_\ell(\mathrm{u})| - r_\ell(\mathrm{u})}{2} \geq 0.$$

Donc, quelque soit le signe de $r_\ell(\mathrm{u})$, nous aurons toujours

$$r_\ell(\mathrm{u}) = r_\ell(\mathrm{u})^+ - r_\ell(\mathrm{u})^-.$$

Nous pouvons alors réécrire nos flux comme suit

$$\mathcal{F}_\ell(\mathrm{u}) = \left(\gamma_\ell + \frac{r_\ell(\mathrm{u})^+}{u_j}\right) u_j - \left(\gamma_\ell + \frac{r_\ell(\mathrm{u})^-}{u_i}\right) u_i.$$

Nos coefficients sont positifs (M-Matrice) mais dépendent de u (perte de linéarité).

[4] Yanni Gao, Guangwei Yuan, Shuai Wang, Xudeng Hang, *A finite volume element scheme with a monotonicity correction for anisotropic diffusion problems on general quadrilateral meshes*, Journal of Computational Physics, 2020.

Définition (M-matrice)

La matrice $A = (a_{ij})$ *est une M-matrice si elle satisfait les inégalités suivantes*

$$\forall i \neq j, a_{ij} \leq 0,$$

et

$$\forall i, \sum_{j=1}^{n} a_{ij} \geq 0. \tag{1}$$

De plus, si (1) *est stricte pour tout* $i \in [\![1, n]\!]$*, on dit que* A *est une M-matrice stricte.*

Propriétés du schéma

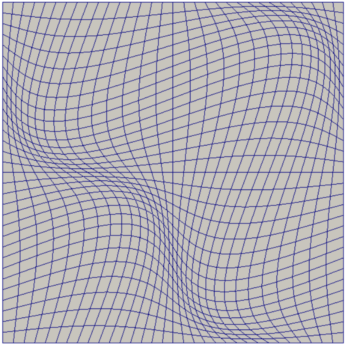
- Conservativité
- Positivité

Dans le cas où $\kappa \in \mathbb{R}^{2\times 2}$, notre méthode s'adapte facilement. On a alors

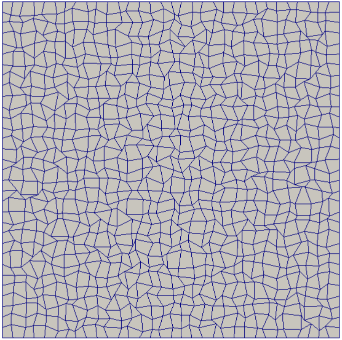
$$-\sum_{\ell \in i} \int_{\ell} \nabla \bar{u} \cdot (\kappa^T \mathrm{n}) = \int_i f.$$

Tous les calculs se font de la même manière en changeant n en κ^Tn.

Sommaire



(a) Exemple d'un maillage déformé



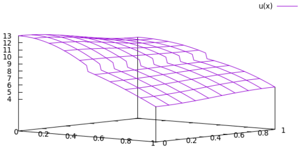
(b) Exemple d'un maillage aléatoire

Figure: Exemples de maillages

Considérons le problème stationnaire suivant :

Trouver $\bar{u}$ telle que

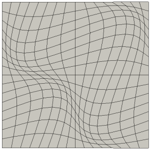
$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\kappa \nabla \bar{u}) = f & \text{sur } \Omega =]0,1[\times]0,1[, \\ \bar{u} = g & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases}$$



Prenons κ discontinu

$$\kappa(x) = \begin{cases} 1 \text{ si } x \leq 0.5, \\ 2 \text{ si } x > 0.5. \end{cases}$$

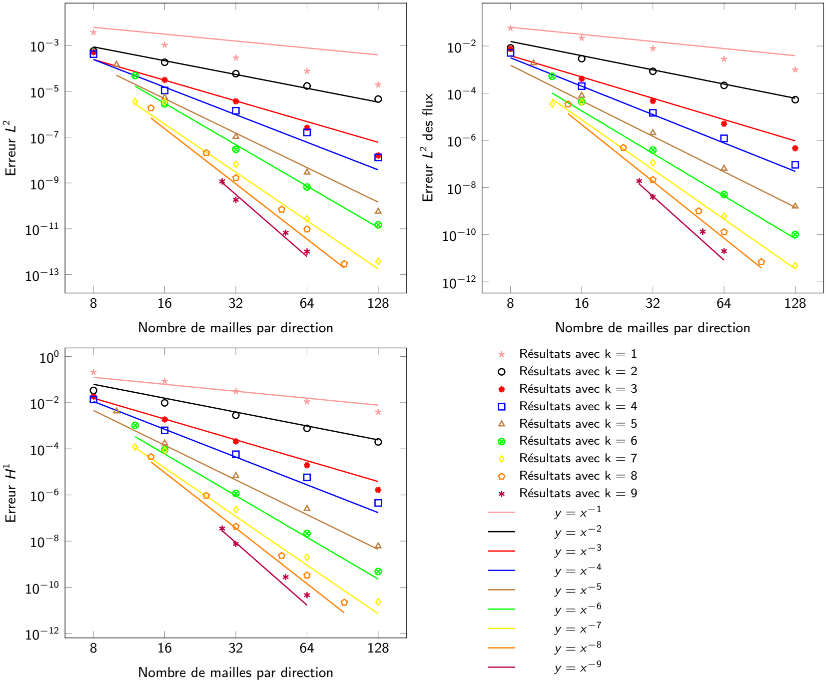
avec la solution analytique suivante



$$\bar{u}(x) = \begin{cases} \cos(\pi x)\cos(\pi y) - 10x^2 + 12 & \text{si } x \leq \frac{1}{2}, \\ \frac{1}{2}\cos(\pi x)\cos(\pi y) - 5x^2 + \frac{43}{4} & \text{si } x > \frac{1}{2}, \end{cases}$$

Nous avons alors

$$f(x) = 2\pi^2 \cos(\pi x)\cos(\pi y) + 20 \geq 0 \text{ sur } \Omega \text{ et } g \geq 0 \text{ sur } \partial\Omega.$$



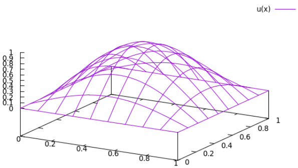
Erreur L^2
Erreur L^2 des flux
Erreur H^1
Nombre de mailles par direction
8
16
32
64
128
10^{-3}
10^{-5}
10^{-7}
10^{-9}
10^{-11}
10^{-13}
10^{-2}
10^{-4}
10^{-6}
10^{-8}
10^{-10}
10^{-12}
10^{0}
Résultats avec k = 1
Résultats avec k = 2
Résultats avec k = 3
Résultats avec k = 4
Résultats avec k = 5
Résultats avec k = 6
Résultats avec k = 7
Résultats avec k = 8
Résultats avec k = 9
$y = x^{-1}$
$y = x^{-2}$
$y = x^{-3}$
$y = x^{-4}$
$y = x^{-5}$
$y = x^{-6}$
$y = x^{-7}$
$y = x^{-8}$
$y = x^{-9}$

Tests numériques pour l'ordre

Considérons le problème stationnaire suivant :

Trouver $\bar{u}$ telle que

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\kappa \nabla \bar{u}) = f & \text{sur } \Omega =]0,1[\times]0,1[, \\ \bar{u} = g & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases}$$

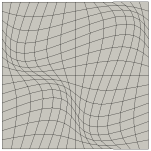


Prenons κ anisotrope

$$\kappa(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

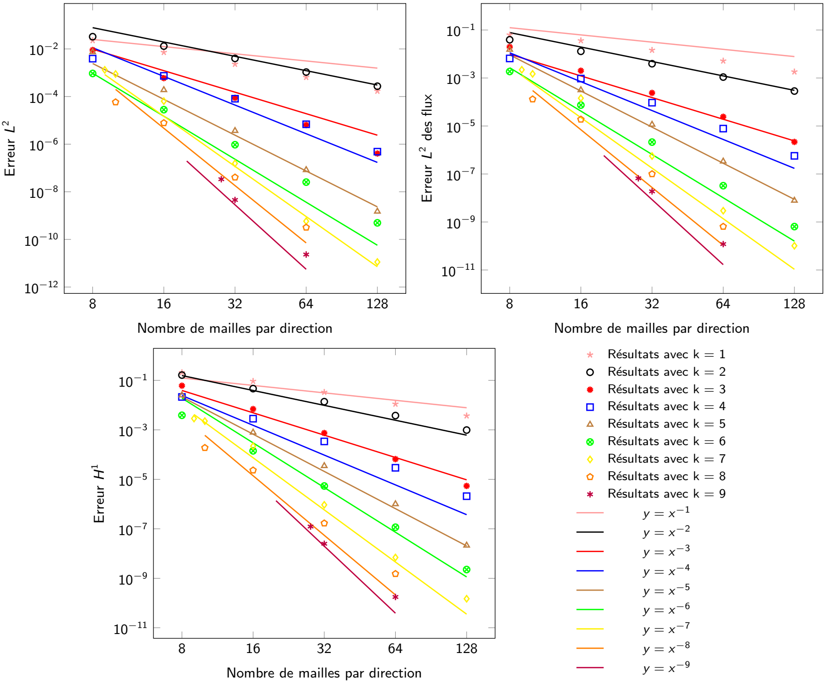
avec la solution analytique suivante

$$\bar{u}(x) = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$$



Nous avons alors

$$f(x) = 3\pi^2 \sin(\pi x)\sin(\pi y) \geq 0 \text{ sur } \Omega \text{ et } g \geq 0 \text{ sur } \partial\Omega.$$



Erreur L^2
Nombre de mailles par direction
Erreur L^2 des flux
Nombre de mailles par direction
Erreur H^1
Nombre de mailles par direction
8
16
32
64
128
Résultats avec k = 1
Résultats avec k = 2
Résultats avec k = 3
Résultats avec k = 4
Résultats avec k = 5
Résultats avec k = 6
Résultats avec k = 7
Résultats avec k = 8
Résultats avec k = 9
$y = x^{-1}$
$y = x^{-2}$
$y = x^{-3}$
$y = x^{-4}$
$y = x^{-5}$
$y = x^{-6}$
$y = x^{-7}$
$y = x^{-8}$
$y = x^{-9}$

Considérons le problème stationnaire suivant :

Trouver $\bar{u}$ telle que

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\kappa \nabla \bar{u}) = f & \text{sur } \Omega = [0,1]^2 \setminus \left]\frac{4}{9}, \frac{5}{9}\right[^2, \\ \bar{u} = g & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases}$$

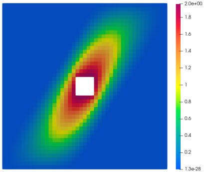
Prenons κ anisotrope

$$\kappa = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix},$$

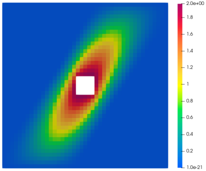
avec $\theta = \frac{\pi}{6}$, $k = 10^4$. Soit $f = 0$, $g = 0$ (resp. $g = 2$) sur les bords ext. (resp. int.)

Méthode	Minimum de la solution
Schéma DDFV non monotone[5]	-0.5
Schéma monotone ordre 2	1e-21
Schéma monotone ordre 3	1.7e-27
Schéma monotone ordre 4	3.9e-30
Schéma monotone ordre 5	1.1e-27
Schéma monotone ordre 6	4.3e-27
Schéma monotone ordre 7	7.9e-25
Schéma monotone ordre 8	5.4e-21

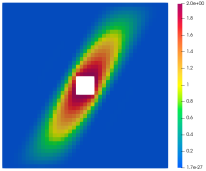
[5] François Hermeline, Journal of Computational Physics, 2000, *A finite volume method for the approximation of diffusion operators on distorted meshes*



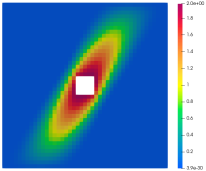
(a) Solution obtenue avec le schéma monotone ordre 1



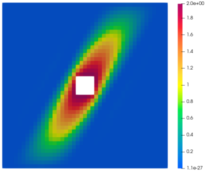
(b) Solution obtenue avec le schéma monotone ordre 2



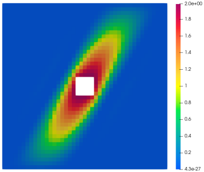
(c) Solution obtenue avec le schéma monotone ordre 3



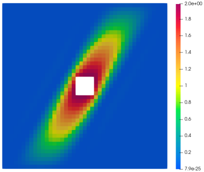
(d) Solution obtenue avec le schéma monotone ordre 4



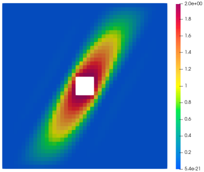
(a) Solution obtenue avec le schéma monotone ordre 5



(b) Solution obtenue avec le schéma monotone ordre 6



(c) Solution obtenue avec le schéma monotone ordre 7



(d) Solution obtenue avec le schéma monotone ordre 8

Conclusion :

- Schéma d'ordre arbitraire,
- Conservatif,
- Positivité.

Perspectives :

- Coder le schéma d'ordre élevé avec la méthode DDFV,
- Discrétisation en temps,
- Coefficient de diffusion non linéaire.