



DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

Schémas aux volumes finis d'ordre très élevé positifs pour la diffusion sur maillage quelconque

Xavier BLANC, François HERMELINE, Emmanuel LABOURASSE, Julie PATELA (julie_patela@hotmail.fr) | 16 Juin 2022

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives – www.cea.fr

- 1 Introduction
- 2 Notations
- 3 Problème
- 4 Notre méthode
- 5 Résultats numériques
- 6 Conclusion et perspectives

1 Introduction

2 Notations

3 Problème

4 Notre méthode

5 Résultats numériques

6 Conclusion et perspectives

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

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

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

Propriétés de ce problème :

- Il existe une unique solution et elle satisfait le principe du maximum (i.e $\min(\frac{1}{\alpha} \min(f), \min(g)) \leq \bar{u} \leq \max(\frac{1}{\alpha} \max(f), \max(g))$),
- Conservativité : $\forall \omega \subset \Omega, \int_{\omega} f = - \int_{\partial\omega} (\kappa \nabla \bar{u}) \cdot n$.

Propriétés souhaitées pour ce schéma :

- Conservativité,
- Préserver le principe du maximum (ou au moins la positivité/monotonie ($f, g \geq 0 \implies \bar{u} \geq 0$)).

Objectif

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

- Conservativité
- Positivité (et si possible le principe du maximum local)
- 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 (maillage cartésien).
- Jean-Sylvain Camier, François Hermeline, *International journal for numerical methods in engineering*, 2016 : Positivité (ordre 2).
- Jérôme Droniou, Christophe Le Potier, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2011 : Principe du maximum (ordre 2).

- 1 Introduction
- 2 Notations**
- 3 Problème
- 4 Notre méthode
- 5 Résultats numériques
- 6 Conclusion et perspectives

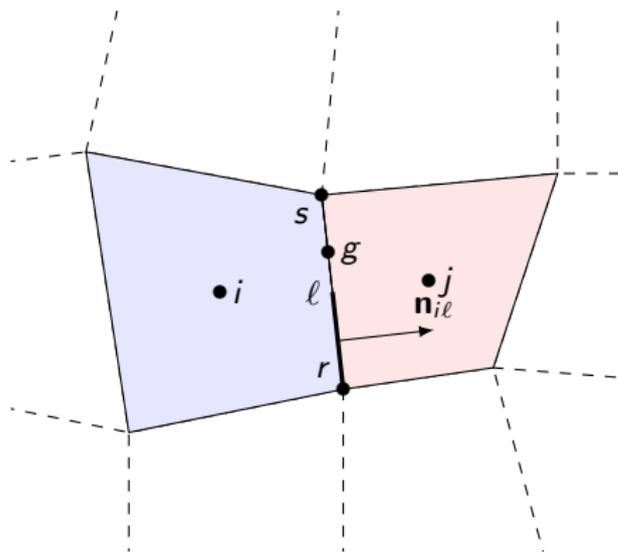
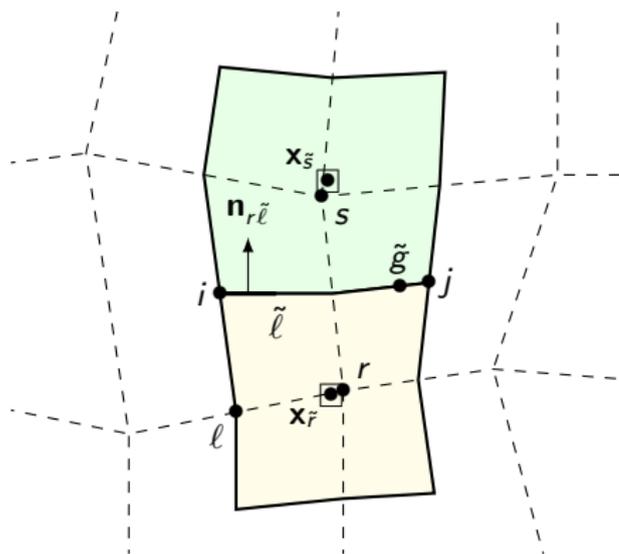


Figure: Maillage primal

- ▶ r et s : des sommets,
- ▶ l : une arête du maillage primal, de mesure $|l|$,
- ▶ 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 .
- ▶ \mathbf{n}_{il} : la normale unitaire à l'arête l , sortante pour la maille i .

Méthode DDFV (Discrete Duality Finite Volume)¹

- ▶ r et s : des mailles
- ▶ i, j et l : des sommets,
- ▶ \tilde{l} : une arête du maillage dual,
- ▶ \tilde{g} : un point de quadrature des Gauss sur l'arête \tilde{l} ,
- ▶ \tilde{x}_r : la position du sommet r ,
- ▶ \tilde{x}_r : la position du centre de gravité de la maille duale r ,
- ▶ $\mathbf{n}_{r\tilde{l}}$: la normale unitaire à l'arête \tilde{l} , sortante pour la maille r .

Figure: Maillage dual aux sommets

¹Jean-Sylvain Camier, François Hermeline, International journal for numerical methods in engineering, 2016, *A monotone nonlinear finite volume method for approximating diffusion operators on general meshes*

- 1 Introduction
- 2 Notations
- 3 Problème**
- 4 Notre méthode
- 5 Résultats numériques
- 6 Conclusion et perspectives

Considérons le problème suivant

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

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

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

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

c'est-à-dire

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

avec ω_g les poids de la quadrature de Gauss.

Nous devons donc déterminer les flux

$$\bar{\mathcal{F}}_{\ell} = \sum_{g \in \ell} \omega_g \kappa_g (\nabla \bar{u})_g \cdot \mathbf{n}_{i\ell}.$$

Schéma idéal

- Convergent à un ordre élevé
- Linéaire
- Conservatif
- Principe du maximum

⇒ 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 le principe du maximum ou la positivité :
 - Schéma non linéaire,
 - Utiliser un limiteur si les conditions souhaitées ne sont localement pas respectées.

- 1 Introduction
- 2 Notations
- 3 Problème
- 4 Notre méthode**
- 5 Résultats numériques
- 6 Conclusion et perspectives

Développements de Taylor intégrés à l'ordre k au voisinage de \mathbf{x}_g

$$\begin{aligned}\bar{u}_j &= \bar{u}(\mathbf{x}_g) + (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_g) \cdot \nabla \bar{u}(\mathbf{x}_g) \\ &+ \sum_{p=2}^k \frac{1}{V_j p!} \sum_{m=0}^p \binom{p}{p-m} \frac{\partial^p \bar{u}}{\partial x^m \partial y^{(p-m)}}(\mathbf{x}_g) \int_j (x - x_g)^m (y - y_g)^{(p-m)} dx + \mathcal{O}(h^{k+1})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{u}_i &= \bar{u}(\mathbf{x}_g) + (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_g) \cdot \nabla \bar{u}(\mathbf{x}_g) \\ &+ \sum_{p=2}^k \frac{1}{V_i p!} \sum_{m=0}^p \binom{p}{p-m} \frac{\partial^p \bar{u}}{\partial x^m \partial y^{(p-m)}}(\mathbf{x}_g) \int_i (x - x_g)^m (y - y_g)^{(p-m)} dx + \mathcal{O}(h^{k+1})\end{aligned}$$

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

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

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

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{x}_s - \mathbf{x}_r) \cdot \nabla \bar{u}(\mathbf{x}_g) &= \bar{u}_s - \bar{u}_r - \underbrace{\sum_{\rho=2}^k \frac{1}{\rho!} \sum_{m=0}^{\rho} \binom{\rho}{\rho-m} \frac{\partial^{\rho} \bar{u}}{\partial x^m \partial y^{(\rho-m)}}(\mathbf{x}_g)} \\
 &\underbrace{\left(\frac{1}{V_s} \int_s (x - x_g)^m (y - y_g)^{(\rho-m)} dx - \frac{1}{V_r} \int_r (x - x_g)^m (y - y_g)^{(\rho-m)} dx \right)}_{\bar{r}_{rs}} + \mathcal{O}(h^{k+1}).
 \end{aligned}$$

Nous avons alors le système

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

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

$$\mathbf{n}_{il} = \alpha_{il}(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) + \beta_{il}(\mathbf{x}_s - \mathbf{x}_r),$$

avec $\alpha_{il} \geq 0$.

Ainsi, nous avons

$$(\nabla \bar{u})_g \cdot \mathbf{n}_{il} = \alpha_{il} (\bar{u}_j - \bar{u}_i + \bar{r}_{ij}) + \beta_{il} (\bar{u}_s - \bar{u}_r + \bar{r}_{rs}).$$

Reconstruction polynomiale

Nous avons besoin de connaître l'évaluation des dérivées de \bar{u} en \mathbf{x}_g . Nous avons décidé d'utiliser les mailles voisines de l'arête ℓ sur laquelle se trouve le point de Gauss afin d'effectuer une reconstruction polynomiale de la solution.

Pour un polynôme de degré k , nous avons $\frac{(k+1)(k+2)}{2}$ coefficients à calculer, nous avons besoin de $\frac{(k+1)(k+2)}{2}$ mailles voisines de ℓ . Notre polynôme sera de la forme

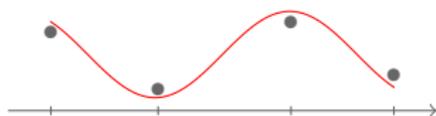
$$P(\mathbf{x}) = \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} a_{ij}(\mathbf{u}) x^i y^j.$$

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

$$\frac{1}{V_i} \int_{V_i} P(\mathbf{x}) = u_i.$$

Nous avons donc

$$\partial_x^\ell \bar{u}(\mathbf{x}_g) \approx P^{(\ell)}(\mathbf{x}_g).$$



Soit $\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}^{\text{primal}} \\ \mathbf{u}^{\text{dual}} \end{pmatrix}$ notre solution discrète. Nos flux numériques sont définis par

$$\mathcal{F}_\ell(\mathbf{u}) = |\ell| \sum_{g \in \ell} \omega_g \kappa_g (\alpha_{i\ell} (u_j - u_i + r_{ij}(\mathbf{u})) + \beta_{i\ell} (u_s - u_r + r_{rs}(\mathbf{u}))),$$

Autrement dit

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

avec

$$\left\{ \begin{array}{l} r_\ell(\mathbf{u}) = |\ell| \sum_{g \in \ell} \omega_g \kappa_g (\alpha_{i\ell} r_{ij}(\mathbf{u}) + \beta_{i\ell} (u_s - u_r + r_{rs}(\mathbf{u}))), \\ \gamma_\ell = \left(\alpha_{i\ell} |\ell| \sum_{g \in \ell} \omega_g \kappa_g \right) \geq 0. \end{array} \right.$$

Une astuce de Y. Gao *et al.*² pour imposer la positivité discrète

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

Tout d'abord, posons

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

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

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

Nous pouvons alors réécrire nos flux comme suit

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

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

²Yanni 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

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

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

Propriétés du schéma (non symétrique)

- Conservativité
- Positivité
- Consistance des flux à l'ordre k (en cours)
- Convergence du schéma à l'ordre $k - 1$ sous hypothèse de stabilité
- Convergence du schéma à l'ordre k sous hypothèse de coercivité

Symétrisation

Afin de rendre ce schéma symétrique, introduisons $s_\ell(\mathbf{u})$

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

Pour que ce schéma soit symétrique, il faut que

$$s_\ell(\mathbf{u}) = \frac{u_i r_\ell(\mathbf{u})^+ - u_j r_\ell(\mathbf{u})^-}{u_j - u_i}.$$

Afin de conserver la positivité, nous devons imposer

$$\frac{\gamma_\ell(u_j - u_i) + r_\ell(\mathbf{u})}{u_j - u_i} \geq 0.$$

Si cette condition n'est pas vérifiée pour certaines mailles, on limite localement à un schéma d'ordre 2 classique.

Propriétés du schéma symétrique

- Conservativité
- Symétrie
- Consistance des flux à l'ordre k (en cours)
- Convergence du schéma à l'ordre $k - 1$ sous hypothèse de stabilité
- Convergence du schéma à l'ordre k sous hypothèse de coercivité
- Principe du maximum (M-Matrice) (donc positivité)

- 1 Introduction
- 2 Notations
- 3 Problème
- 4 Notre méthode
- 5 Résultats numériques**
- 6 Conclusion et perspectives

Considérons le problème stationnaire suivant :

Trouver \bar{u} telle que

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

Considérons la solution analytique suivante

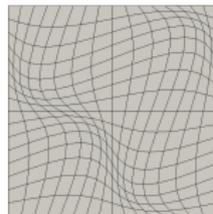
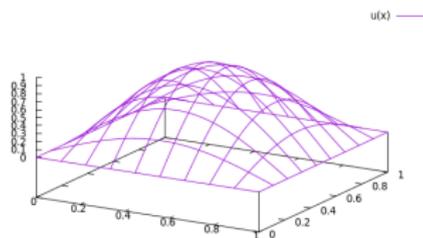
$$\bar{u}(x) = \sin(\pi x) \sin(\pi y),$$

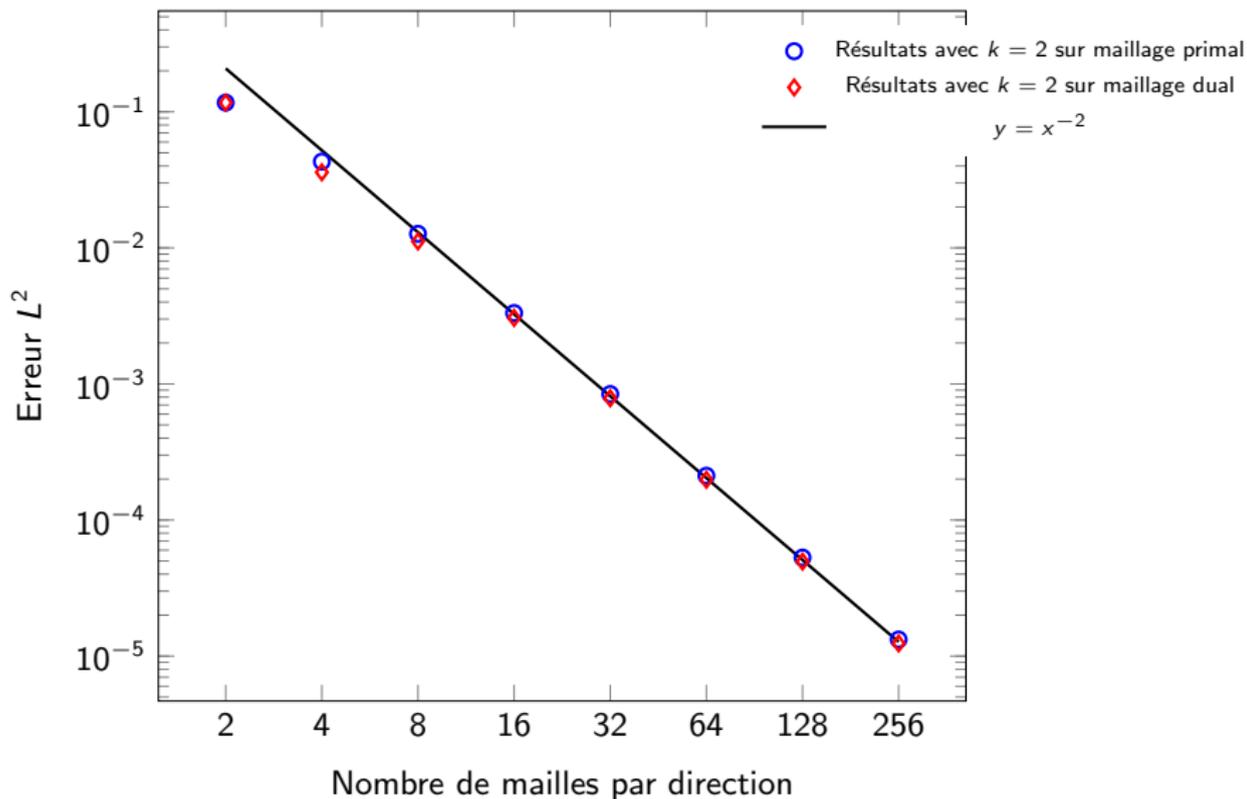
avec

$$\kappa(x) = 1.$$

Nous avons alors

$$\begin{cases} f(x) = 2\pi^2 \sin(\pi x) \sin(\pi y) \geq 0 & \text{sur } \Omega, \\ g = 0 \geq 0 & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases}$$





Considérons le problème stationnaire suivant :

Trouver \bar{u} telle que

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

Considérons la solution analytique suivante

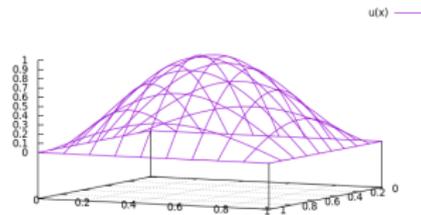
$$\bar{u}(x) = \sin(\pi x) \sin(\pi y),$$

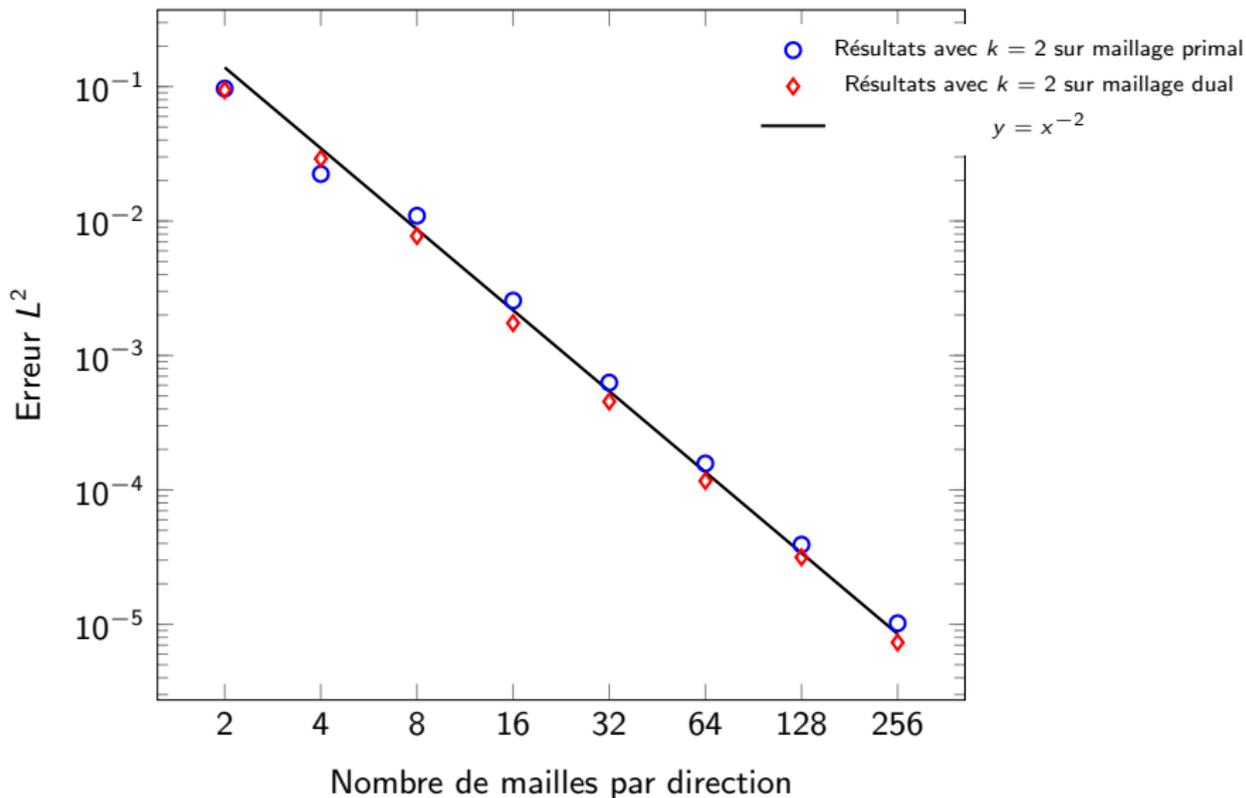
avec

$$\kappa(x) = \exp(x) \exp(y).$$

Nous avons alors

$$\begin{cases} g = 0 \geq 0 & \text{sur } \partial\Omega, \\ f(x) = \pi \exp(x) \exp(y) [2\pi \sin(\pi x) \sin(\pi y) \\ - \cos(\pi x) \sin(\pi y) - \cos(\pi y) \sin(\pi x)]. \end{cases}$$





Considérons le problème stationnaire suivant :

Trouver \bar{u} telle que

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

Considérons κ discontinu

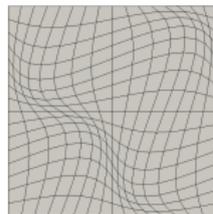
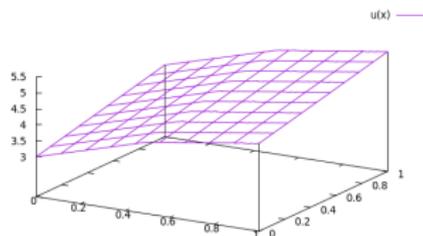
$$\kappa(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \leq 0.5, \\ 2 & \text{si } x > 0.5. \end{cases}$$

avec la solution analytique suivante

$$\bar{u}(x) = \begin{cases} 2x + y + 3 & \text{si } x \leq \frac{1}{2}, \\ x + y + 3.5 & \text{si } x > \frac{1}{2}, \end{cases}$$

Nous avons alors

$$f(x) = 0 \geq 0 \text{ sur } \Omega \text{ et } g \geq 0 \text{ sur } \partial\Omega.$$



\Rightarrow Exact (erreur à 10^{-13}).

Considérons le problème stationnaire suivant :

Trouver \bar{u} telle que

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

Considérons κ discontinu

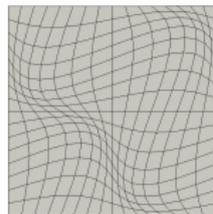
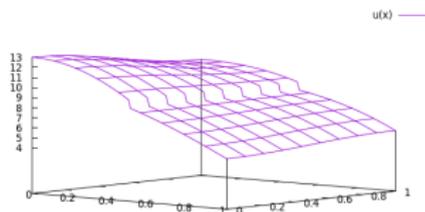
$$\kappa(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \leq 0.5, \\ 2 & \text{si } x > 0.5. \end{cases}$$

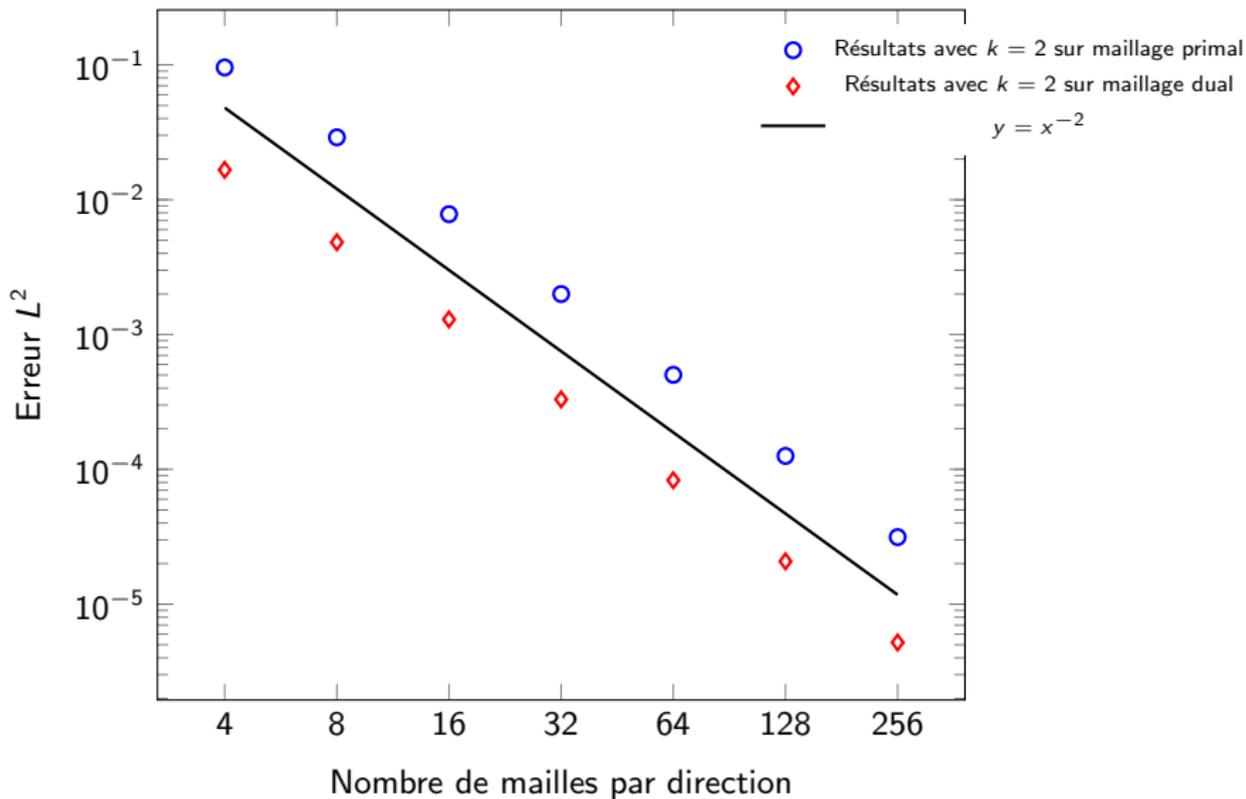
avec la solution analytique suivante

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

Nous avons alors

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





- 1 Introduction
- 2 Notations
- 3 Problème
- 4 Notre méthode
- 5 Résultats numériques
- 6 Conclusion et perspectives

Conclusion :

- Schéma d'ordre très élevé,
- Conservatif,
- Positivité (et principe du maximum si symétrisation),
- Schéma codé à l'ordre 2.

Perspectives :

- Coder le 2D d'ordre très élevé,
- Discrétisation en temps.