

Développement et analyse de méthodes de volumes finis Pascal Omnes

► To cite this version:

Pascal Omnes. Développement et analyse de méthodes de volumes finis. Mathématiques [math]. Université Paris-Nord - Paris XIII, 2010. tel-00613239

HAL Id: tel-00613239 https://theses.hal.science/tel-00613239

Submitted on 3 Aug 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Mémoire d'habilitation à diriger des recherches

Développement et analyse de méthodes de volumes finis

Pascal Omnes

Soutenue le 04 Mai 2010 à l'Université Paris 13

Table des matières

Introduction

	л р.	our des systèmes hyperboliques linéaires	13			
1	Ap	Approximation par volumes finis colocalisés du système de Maxwell				
	ave	c correction hyperbolique	14			
	1.1	Les équations de Maxwell et les problèmes liés à leur discrétisation	14			
	1.2	Les équations de Maxwell généralisées	17			
	1.3	Approximation numérique par volumes finis	18			
	1.4	Conditions aux limites pour le système reformulé	21			
		1.4.1 Conducteur parfait	21			
		1.4.2 Conditions entrantes ou absorbantes sur le champ électromagnétique	e 22			
		1.4.3 Conditions aux limites sur les correcteurs	22			
		1.4.4 Mise en œuvre effective	23			
	1.5	Résultats numériques	23			
2	Influence de la géométrie des cellules sur le comportement à bas Mach					
	$\mathbf{d}\mathbf{u}$					
		schéma de Godunov appliqué à l'équation des ondes	27			
	2.1	schéma de Godunov appliqué à l'équation des ondes Rappels sur l'équation des ondes continue	27 28			
	2.1 2.2	Rappels sur l'équation des ondes continue	27 28 29			
	2.1 2.2 2.3	Schéma de Godunov appliqué à l'équation des ondes Rappels sur l'équation des ondes continue Discrétisation de l'équation des ondes par des schémas colocalisés Construction de champs discrets incompressibles	27 28 29 30			
	2.1 2.2 2.3	Schéma de Godunov appliqué à l'équation des ondes Rappels sur l'équation des ondes continue Discrétisation de l'équation des ondes par des schémas colocalisés Construction de champs discrets incompressibles 2.3.1 Le cas triangulaire	27 28 29 30 30			
	2.1 2.2 2.3	Schéma de Godunov appliqué à l'équation des ondes Rappels sur l'équation des ondes continue Discrétisation de l'équation des ondes par des schémas colocalisés Construction de champs discrets incompressibles 2.3.1 Le cas triangulaire 2.3.2 Le cas rectangulaire	27 28 29 30 30 31			
	2.1 2.2 2.3 2.4	Schéma de Godunov appliqué à l'équation des ondes Rappels sur l'équation des ondes continue Discrétisation de l'équation des ondes par des schémas colocalisés Construction de champs discrets incompressibles 2.3.1 Le cas triangulaire 2.3.2 Le cas rectangulaire Comportement en temps de la solution	27 28 29 30 30 31 33			
	2.1 2.2 2.3 2.4	Schéma de Godunov appliqué à l'équation des ondes Rappels sur l'équation des ondes continue Discrétisation de l'équation des ondes par des schémas colocalisés Construction de champs discrets incompressibles 2.3.1 Le cas triangulaire 2.3.2 Le cas rectangulaire Comportement en temps de la solution 2.4.1 Cas triangulaire	27 28 29 30 30 31 33 33			
	2.1 2.2 2.3 2.4	Schéma de Godunov appliqué à l'équation des ondes Rappels sur l'équation des ondes continue Discrétisation de l'équation des ondes par des schémas colocalisés Construction de champs discrets incompressibles 2.3.1 Le cas triangulaire 2.3.2 Le cas rectangulaire Comportement en temps de la solution 2.4.1 Cas triangulaire 2.4.2 Cas cartésien	27 28 29 30 30 31 33 33 34			
	 2.1 2.2 2.3 2.4 2.5 	Schéma de Godunov appliqué à l'équation des ondes Rappels sur l'équation des ondes continue Discrétisation de l'équation des ondes par des schémas colocalisés Construction de champs discrets incompressibles 2.3.1 Le cas triangulaire 2.3.2 Le cas rectangulaire Comportement en temps de la solution 2.4.1 Cas cartésien Illustration numérique	27 28 29 30 30 31 33 33 34 35			

4

IIConstruction de méthodes de volumes finis en dualité discrète
sur maillages bidimensionnels quelconques38

3	Construction et propriétés d'opérateurs différentiels discrets		
	3.1	Introduction et notations	39
	3.2	Construction des opérateurs différentiels discrets	42
	3.3	Propriétés des opérateurs	44
		3.3.1 Formules de Green discrètes	44

		3.3.2	Composition des opérateurs	44		
		3.3.3	Décomposition de Helmholtz-Hodge	44		
4	Ant	olicatio	on à la discrétisation de l'équation de diffusion linéaire et au			
Т	système de l'électrostatique et de la magnétostatique					
	4.1	Équat	ion de diffusion linéaire	46		
		4.1.1	Discrétisation	46		
		4.1.2	Propriétés du schéma	47		
		4.1.3	Résultats numériques	49		
	4.2	Systèr	ne de l'électrostatique et de la magnétostatique (problème "div-rot")	53		
		4.2.1	Discrétisation	53		
		4.2.2	Schémas équivalents pour les potentiels	54		
		4.2.3	Existence et unicité	55		
		4.2.4	Conditions limites sur la composante tangentielle du champ	55		
		4.2.5	Résultats numériques	56		
5	Apr	olicatio	on à la discrétisation des équations de Maxwell	58		
	5.1	Écritu	re du schéma	58		
	5.2	Propri	étés du schéma	59		
	5.3	Résult	ats numériques	61		
Pe	erspectors	ectives	5	67		
II cr	I A \acute{etis}	analys èe par	e a priori et a posteriori pour l'équation de Laplace dis- la méthode de volumes finis en dualité discrète	69		
6	Ana	alyse a	priori pour l'équation de diffusion et le problème div-rot	70		
	6.1	Åppro	che volumes finis	71		
	6.2	Appro	che éléments finis	73		
	6.3	Erreur	: en norme L^2	75		
	6.4	Super	convergence sur certaines familles de maillages	77		
7	Ana	alyse a	posteriori pour l'équation de diffusion	79		
	7.1	Une fo	ormule de représentation de l'erreur dans la norme de l'énergie	80		
	7.2	Un est	imateur calculable et efficace	82		
	7.3	Simula	ations adaptatives	85		
		7.3.1	Adaptation pour une solution raide mais régulière	85		
		7.3.2	Adaptivité pour une solution singulière	87		
ъ		. •				
Рŧ	rsne	00+17:00		00		
	- sp	ectives	S	89		

8	3 Étude en dimension un			
	8.1	Le schéma volume fini	91	
	8.2	Expression de l'erreur par fonctions de Green	92	

	8.3 Ordre de convergence du schéma	93
9	Étude en dimension deux, sur maillages triangulaires et de Voronoi	
	associés	96
	9.1 Les deux schémas volumes finis	97
	9.2 Estimation de l'erreur	98
Pe	erspectives 1	.02
Tr	ravaux présentés dans ce mémoire 1	.03
\mathbf{A}^{\cdot}	utres travaux de l'auteur 1	.04
Bi	ibliographie générale 1	.05

Introduction

Ce document synthétise une partie des travaux de recherche que j'ai menés au Commissariat à l'Énergie Atomique, sur les centres de Saclay et de Bruyères-le-Châtel, au Forschungszentrum de Karlsruhe (Allemagne), ainsi qu'à l'Université Paris 13. Le thème qui lie entre eux les travaux présentés ici est la discrétisation par des méthodes de volumes finis de certaines équations de la physique auxquelles je me suis intéressé au cours de mon activité. Les méthodes de volumes finis sont des méthodes numériques très populaires dans divers champs de l'ingénierie, en particulier en mécanique des fluides, et ce pour plusieurs raisons : elles font appel à des bilans locaux (de masse, de quantité de mouvement, d'énergie, ...) qui ont un sens physique très concret; elles permettent souvent de reproduire des propriétés physiques de la solution exacte (conservation de certaines quantités, principe du maximum, ...), ce qui leur assure une grande robustesse; enfin, elles peuvent être utilisées sur des maillages très généraux et sont donc applicables dans des géométries tridimensionnelles complexes. Lorsque l'on effectue les bilans locaux mentionnés ci-dessus, toute la difficulté est de définir les flux sur la frontière des volumes de contrôle en fonction des inconnues du schéma. Nous verrons en particulier que la notion de consistance est particulièrement importante et relativement difficile à assurer pour les flux diffusifs issus d'équations elliptiques.

La première partie de ce mémoire est consacrée à des schémas colocalisés de type Godunov pour des systèmes d'équations hyperboliques linéaires modélisant des phénomènes de propagation d'ondes.

Le chapitre 1 résume les publications [A8, P1, A9] et concerne le système des équations de Maxwell, dans le cadre de simulations couplées avec l'équation de Vlasov modélisant les plasmas non collisionnels. Ce travail a été effectué lors de mon séjour de coopérant en Allemagne, en collaboration avec Claus-Dieter Munz, Rudolf Schneider, Eric Sonnendrücker et Ursula Voss. J'ai eu récemment l'occasion de m'y intéresser de nouveau lors de travaux menés avec Siham Layouni, dont j'ai encadré la thèse conjointement avec Komla Domelevo. L'épineux problème à traiter, rencontré par de nombreux numériciens des plasmas, consiste à forcer le champ électrique calculé à satisfaire la loi de Gauss, tout au moins de façon approchée. En effet, la plupart des méthodes numériques utilisées pour résoudre les équations de Maxwell se contentent de résoudre les équations d'Ampère et de Faraday, ce système (hyperbolique) étant bien posé. Dans le modèle continu, le fait que le champ magnétique reste à divergence nulle et que le champ électrique satisfasse la loi de Gauss est une conséquence de ce système Ampère–Faraday et, pour le champ électrique, de la loi de conservation de la charge électrique. Néanmoins, il peut arriver que la discrétisation du système Vlasov-Maxwell soit réalisée de telle sorte que ce lien de cause à conséquence soit brisé, en raison en particulier d'une loi de conservation de la charge électrique défaillante sur le plan discret. Il est alors fréquent que la simulation dérive vers des régimes physiques complètement irréalistes, en particulier lorsque l'intervalle de temps simulé est beaucoup plus important que les échelles de temps caractéristiques associées à la dynamique des particules chargées. Un remède

possible consiste alors à coupler l'ensemble des équations à vérifier entre elles, de façon à limiter la perte de cohérence. La façon la plus connue d'agir, introduite par Boris [15], est d'ajouter au champ électrique calculé par l'équation d'Ampère une "correction" sous la forme d'un gradient de potentiel calculé de telle sorte que le champ électrique total vérifie la loi de Gauss. On peut aussi agir de la même manière pour forcer le champ magnétique à être à divergence nulle. Cette opération revient à résoudre une équation de Poisson pour le potentiel dont dérive la correction, qui est par conséquent qualifiée de "correction elliptique". La résolution répétée d'une équation de Laplace pouvant se révéler coûteuse, une autre approche, basée sur la notion de "pseudo-courant" a été proposée par Marder [74]. Elle consiste à injecter comme terme source supplémentaire dans l'équation d'Ampère un terme proportionnel au gradient de l'erreur commise sur la loi de Gauss. On obtient ainsi une équation parabolique sur cette erreur et le processus a recu le nom de "correction parabolique". En ce qui nous concerne, et selon une idée développée initialement dans [88], nous avons étudié une correction dite "correction hyperbolique" car le système des équations de Maxwell, modifiées par cette correction, reste hyperbolique. L'avantage principal de cette facon de procéder est que l'on peut intégrer très naturellement cette modification dans un solveur numérique dédié aux équations hyperboliques, et profiter ainsi des nombreuses avancées que ce domaine connaît régulièrement. C'est ainsi que j'ai construit un code de calculs pour les équations de Maxwell, fondé sur une méthode de volumes finis colocalisés sur des maillages non-structurés en dimension deux et trois, d'ordre un par décentrage amont des flux et d'ordre deux par reconstruction et limitation éventuelle des pentes, code dans lequel j'ai introduit cette correction qui a montré son efficacité lors du couplage avec une méthode particulaire pour la résolution de l'équation de Vlasov en dimension deux d'espace. Notons que cette correction hyperbolique, que nous avons montré être équivalente à une méthode de pénalisation de la loi de Gauss dans l'équation des ondes du second ordre associée au champ électrique, a connu un certain succès puisqu'elle a été reprise dans le contexte de la magnétohydrodynamique (voir, entre autres, [40, 70, 120]), puis pour le système Maxwell-Vlasov avec une discrétisation Galerkin discontinu d'ordre élevé [67, 68].

Le chapitre 2 résume la publication [A2] dans laquelle, avec Stéphane Dellacherie et Felix Rieper, nous étudions l'influence de la géométrie des cellules sur la précision du schéma de Godunov du premier ordre appliqué à l'équation des ondes à bas nombre de Mach. Il est bien connu que ce schéma présente de sérieux problèmes dans ce régime, en particulier en raison d'une erreur de troncature du schéma qui est d'ordre $\Delta x/M$, où Δx est une longueur caractéristique des éléments du maillage et M le nombre de Mach (rapport de la vitesse du fluide sur la vitesse du son). Mais cela ne permet pas d'expliquer pourquoi ce schéma donne des résultats acceptables en une dimension d'espace ni pourquoi, en deux dimensions d'espace, les simulations sur des maillages de quadrangles donnent des résultats catastrophiques, alors que sur des maillages de triangles, les résultats sont là aussi acceptables [99, 101]. Une partie de l'explication a été donnée par Stéphane Dellacherie dans un travail récent [42], où l'auteur travaille sur la notion d'équation modifiée, qui, rappelons le, consiste à retrancher à l'équation aux dérivées partielles d'origine le terme dominant dans l'erreur de troncature du schéma numérique utilisé (le schéma est ainsi consistant avec l'équation modifiée à un ordre supérieur). L'auteur montre que la perte de précision du schéma est due à une modification de l'espace stationnaire de l'équation modifiée. Pour l'équation des ondes continue. cet espace stationnaire est l'espace des champs de vitesse à divergence nulle et des pressions constantes. En une dimension d'espace, l'espace stationnaire de l'équation modifiée associée au schéma de Godunov est identique. En revanche, en deux dimensions d'espace, sur des maillages de rectangles, cet espace stationnaire est profondément modifié,

puisqu'il consiste, pour la partie vitesse, en l'espace des champs dont la composante horizontale (respectivement verticale) ne dépend que de la coordonnée verticale (resp. horizontale). Si ces champs sont bien à divergence nulle, ils sont loin de décrire l'ensemble des champs à divergence nulle. La diffusion extrêmement rapide de la condition initiale vers un élément de cet espace stationnaire modifié, qui en est éloigné à l'ordre zéro en Δx , crée des ondes acoustiques parasites qui viennent complètement polluer la solution numérique. Stéphane Dellacherie propose alors une modification simple du schéma de Godunov, dont l'équation modifiée possède un espace de champs de vitesse stationnaires qui correspond exactement aux champs à divergence nulle. Ce nouveau schéma est nommé schéma bas Mach par l'auteur. Notre contribution à cette réflexion a été de reprendre la notion d'espace stationnaire des schémas, non plus en travaillant sur l'équation modifiée, notion limitée à la géométrie cartésienne, mais en nous intéressant directement au schéma numérique. Sur des maillages de rectangles, nous pouvons alors prouver que le comportement du schéma de Godunov standard est identique à celui décrit par l'équation modifiée : l'espace stationnaire du schéma est composé de champs de vitesse dont la composante horizontale (respectivement verticale) ne dépend que de la coordonnée verticale (resp. horizontale). Ces champs n'approchent donc pas correctement l'ensemble des champs à divergence nulle. De plus, le schéma diffuse extrêmement rapidement une condition initiale vers sa projection dans cet espace stationnaire discret, et crée ainsi des ondes acoustiques parasites de taille $\mathcal{O}(\Delta x)$. En revanche, il apparaît que, sur des maillages triangulaires, la partie vitesse de l'espace stationnaire associé au schéma de Godunov du premier ordre est constituée des rotationnels des fonctions de l'espace d'éléments finis de Lagrange d'ordre un associé aux nœuds du maillage. Les résultats d'analyse numérique usuels montrent que cet espace est une bonne approximation (à l'ordre Δx si le champ de vitesse est régulier) de l'espace continu des champs de vitesse à divergence nulle. Il existe donc une façon précise de discrétiser un champ de vitesse à divergence nulle par un élément de cet espace stationnaire discret qui assure qu'aucune onde parasite ne sera créée. Nous montrons d'autre part que le schéma bas Mach proposé par Stéphane Dellacherie possède un espace de champs de vitesse stationnaires suffisamment riche pour approcher de façon précise les champs de vitesse continus à divergence nulle. En particulier, dans le cas d'un maillage régulier de rectangles, il existe dans cet espace stationnaire discret une approximation d'ordre Δx^2 d'un champ de vitesse à divergence nulle qui ne crée aucune onde parasite.

La deuxième partie de ce mémoire est consacrée à la construction d'opérateurs différentiels discrets sur des maillages bidimensionnels relativement quelconques, en particulier très déformés ou encore non-conformes, et à leur utilisation pour la discrétisation d'équations aux dérivées partielles modélisant des phénomènes de diffusion (équation de Laplace), d'électrostatique et de magnétostatique (système divergence rotationnel) et d'électromagnétisme (équations de Maxwell) par des schémas de type volumes finis sur maillages décalés.

Ces travaux ont été motivés initialement par des problèmes liés à la mécanique des fluides (équations de type Stokes), et trouvent leur origine dans le désir de mener l'analyse numérique d'une variante d'un schéma connu en mécanique des fluides sous le nom de schéma Marker and Cell (MAC) [57], initialement construit sur des maillages de rectangles. C'est un schéma qui discrétise la pression aux centres des rectangles et la composante normale de la vitesse aux milieux des arêtes. Il apparaît assez rapidement que dans ce schéma, la matrice liée à la discrétisation du gradient de pression et la matrice liée à la discrétisation de la contrainte d'incompressibilité du fluide sont symétriques l'une de l'autre. Autrement dit, ces discrétisations respectives permettent de définir un opérateur gradient discret et un opérateur divergence discrète qui sont adjoints (au signe près) l'un de l'autre. Par ailleurs, la matrice discrétisant le Laplacien vectoriel de la vitesse peut être vue comme le produit de la matrice discrétisant deux autres divergences (sur des maillages décalés par rapport à la divergence de la vitesse du fluide) et de la matrice discrétisant deux autres gradients (là aussi sur des maillages décalés par rapport au gradient de pression) et une interprétation en terme de gradients et divergences discrets adjoints les uns des autres permet de mener l'analyse numérique de ce schéma de facon efficace. La tentation est alors grande de vouloir généraliser ces concepts d'opérateurs discrets sur des maillages plus généraux que les maillages constitués de rectangles. Ce pas a été franchi par Roy Nicolaides et ses collaborateurs qui ont développé la méthode dite des covolumes sur des triangulations de Delaunay [92, 66, 28, 93]. Sur ce type de maillages, les inconnues vectorielles (champ de vitesse, champ électrique, gradient de pression, ...) sont discrétisées par leurs composantes normales aux arêtes des triangles et les inconnues scalaires sont discrétisées aux centres des cercles circonscrits aux triangles¹ du maillage (pression, potentiel, ...) ou aux sommets de ces triangles (tourbillon). Il est alors aisé de définir la divergence discrète d'un vecteur sur chacun des triangles grâce aux composantes normales de ce vecteur situées sur les arêtes. De même, le gradient discret d'un scalaire est défini par sa composante normale sur les arêtes grâce aux valeurs de ce champ dans les triangles et à l'orthogonalité des arêtes et des segments joignant deux centres de triangles adjacents (on parle de maillages "admissibles"). D'autre part, on associe à chaque nœud du maillage une cellule duale obtenue en joignant les centres des triangles dont le nœud considéré est sommet. Par construction les arêtes de ces cellules duales sont orthogonales aux arêtes des triangles, et les composantes tangentielles d'un champ de vecteur sur ces arêtes duales sont donc exactement les composantes normales de ce champ de vecteur sur les arêtes des triangles. Ceci permet donc de définir sans effort supplémentaire le tourbillon discret d'un champ de vecteur sur chacune de ces cellules duales. En revanche, lorsque l'on cherche à étendre ces concepts sur des maillages plus généraux, on se rend vite compte que l'absence d'orthogonalité entre les arêtes du maillage et les segments joignant les centres des mailles voisines nécessite la définition des deux composantes des champs de vecteur sur les arêtes et la définition des champs scalaires à la fois au centre et aux sommets des cellules du maillage. Il en est de même lorsque l'on tente de généraliser le schéma de volumes finis à quatre points pour l'équation de Laplace [58], dont les inconnues sont situées aux centres des triangles, à des maillages plus généraux ou à une équation de diffusion anisotrope, ou encore à une équation de diffusion nonlinéaire de type p-Laplacien, pour laquelle le calcul du coefficient de diffusion nécessite la connaissance de la norme euclidienne (et donc des deux composantes) du gradient sur les interfaces entre deux éléments. C'est cette approche que nous présentons dans cette partie du document.

Le chapitre 3 résume une partie des publications [A6, A7] et concerne la définition et les propriétés d'opérateurs différentiels discrets sur maillages bidimensionnels quelconques. C'est un travail débuté avec Komla Domelevo et poursuivi conjointement avec Sarah Delcourte, dont Komla Domelevo et moi-même avons co-encadré la thèse. Nous définissons de façon simple et naturelle des opérateurs divergences et rotationnels discrets à l'aide de formules de Green - Gauss appliquées sur les cellules du maillages et sur les cellules duales associées aux nœuds du maillage. Ces opérateurs agissent sur l'espace des champs de vecteurs discrets définis sur les arêtes primales et duales associées et fournissent des valeurs de divergence et de rotationnel dans les cellules primales et duales. De façon symétrique, nous définissons, par une formule de Green et une formule de quadrature appliquées aux cellules-diamants (dont les diagonales sont les arêtes primales

¹ci-après dénommés les centres des triangles

et duales associées) des opérateurs gradients et rotationnels discrets. Ces opérateurs agissent sur l'espace des champs scalaires définis sur les cellules primales et duales et fournissent des champs de vecteurs gradients et rotationnels sur les arêtes du maillage (soit, de façon équivalente, sur les cellules-diamants). Ces opérateurs ne sont pas particulièrement originaux, puisque les opérateurs divergences discrètes étaient (tout au moins implicitement) utilisés dans toutes les méthodes de volumes finis centrées sur les cellules pour la divergence primale, ou centrées sur les sommets pour la divergence duale. L'opérateur gradient discret avait été quant à lui déjà utilisé dans la méthode de volumes finis dite diamant, examinée par exemple dans [32]. Le point innovant de notre travail a été dans un premier temps de réaliser que l'on pouvait combiner ces approches pour obtenir une formulation volumes finis de l'équation de Laplace qui mène à une formulation symétrique et uniformément coercive, avec des gradients consistants, et applicable à tout type de maillage. La symétrie provient du fait que les opérateurs gradient et divergence sont les adjoints (au signe près) l'un de l'autre, cette propriété nous ayant inspiré le nom de "méthodes de volumes finis en dualité discrète" (DDFV); la coercivité uniforme découle du fait que le gradient est injectif sur l'espace des champs scalaires de moyennes primales et duales nulles et que l'on peut établir des inégalités de Poincaré discrètes dont la constante ne dépend pas du pas du maillage, mais uniquement de la régularité de celui-ci [5]; enfin la consistance vient de ce que la formule du gradient peut être obtenue de façon équivalente par deux formules de différences finies dans chacune des directions des arêtes primales ou duales. Ces trois points sont les propriétés décisives qui permettent de montrer la convergence de la solution numérique du schéma vers la solution exacte de l'équation de Laplace. Dans un deuxième temps, nous avons pu montrer que les opérateurs discrets vérifient des propriétés analogues à celles de leur homologues continus, et ceci toujours sur tout type de maillage : la divergence discrète des rotationnels discrets est nulle, le rotationnel discret des gradients discrets est nul, tout champ de vecteur défini par ses deux composantes sur les arêtes peut se décomposer comme somme d'un gradient discret et d'un rotationnel discret (décomposition de Helmholtz-Hodge discrète). Ceci nous a permis de généraliser la théorie des covolumes de Roy Nicolaides à des maillages quelconques, ce qui permet d'élargir leur champ d'application.

Le chapitre 4 résume une autre partie des publications [A6, A7]. Nous décrivons l'utilisation de ces opérateurs pour la discrétisation de l'équation de Laplace, et celle du problème "divergence - rotationnel" que l'on rencontre par exemple en électrostatique et en magnétostatique, et qui se découple en fait en deux problèmes de Laplace distincts, via la décomposition de Hodge discrète. Les principales propriétés vérifiées par la discrétisation de l'équation de Laplace ont été rappelées ci-dessus. Nous montrons de plus deux propriétés qui seront utilisées lors de l'analyse numérique de ce schéma dans le chapitre 6. D'une part, le schéma DDFV peut être réécrit sous une formulation variationnelle discrète équivalente faisant intervenir des fonctions P^1 non-conformes. D'autre part, nous montrons que, parmi tous les flux que l'on peut calculer à partir du gradient à quatre points sur les cellules diamants, les flux calculés par la méthode DDFV sont ceux qui minimisent, en un certain sens, l'erreur vis-à-vis des flux exacts. Les résultats numériques présentés dans cette partie montrent que ce schéma volumes finis permet effectivement, entre autres, de travailler sur des maillages non conformes présentant un taux de raffinement local arbitraire, et également sur des maillages triangulaires de plus en plus plats.

Le chapitre 5, qui résume l'article [A5], est le fruit d'une collaboration avec Siham Layouni et François Hermeline. Ce dernier est également à l'origine de ce type de schémas volumes finis, bien que son approche soit au départ très différente de la nôtre [60, 61].

Nous appliquons les opérateurs du chapitre 3 et un schéma saute-mouton en temps à la discrétisation des équations de Maxwell et montrons que le schéma obtenu retient les propriétés agréables du schéma de Yee [119] et du schéma covolume, qu'il généralise à des maillages quelconques. Tout d'abord, le champ électrique calculé par l'équation d'Ampère discrétisée vérifie la loi de Gauss discrète à condition que les densités de courant et de charge électriques vérifient la relation de conservation de la charge discrète ; nous indiquons comment discrétiser densités de courant et de charge pour qu'il en soit ainsi. De plus, en l'absence de termes sources, le schéma ainsi obtenu conserve (ou fait décroître selon le type de conditions aux limites) une énergie électromagnétique discrète. Enfin, on peut montrer que, sous une condition de type CFL, cette énergie est une forme quadratique définie positive du champ électromagnétique calculé, ce qui assure la stabilité L^2 du schéma. Cette condition CFL fait intervenir la géométrie des cellules primales, duales et diamants et dégénère vers la stabilité du schéma de Yee lorsque le maillage initial est un maillage de carrés. Nous présentons des résultats numériques sur des maillages non-conformes, très déformés, déformés aléatoirement et même nonconvexes. Il est intéressant de remarquer que les isovaleurs des champs obtenus sont tout-à-fait semblables quelque soit le maillage, et que le schéma n'est donc pas du tout sensible à la régularité de celui-ci, ce qui constitue un avantage indéniable.

Notons par ailleurs que l'approche en dualité discrète a connu un certain succès, puisqu'elle a été reprise et étendue à d'autres modèles. Citons par exemple la diffusion non-linéaire avec opérateurs de type Leray-Lions [5], la convection-diffusion [34], la dérive diffusion et le transport d'énergie [24], l'électrocardiologie [35].

La troisième partie de ce mémoire est consacrée à l'analyse numérique *a priori* et *a posteriori* du schéma DDFV appliqué à l'équation de Laplace, comme présenté dans le chapitre 4.

Le chapitre 6 résume une autre partie des articles [A6, A7] et concerne l'analyse a priori du schéma DDFV appliqué à l'équation de Laplace avec des conditions aux limites non homogènes de Dirichlet sur une partie de la frontière et de Neumann sur l'autre. Nous distinguons deux techniques permettant d'obtenir des estimations d'erreur entre la solution numérique du schéma et la solution exacte de l'équation lorsque celle-ci est régulière. Dans un premier temps, nous effectuons une analyse "au sens des volumes finis"; pour cela nous utilisons la propriété de meilleure approximation des flux démontrée au chapitre 4 pour prouver la convergence des flux calculés par la méthode DDFV à l'ordre un en norme L^2 sur des maillages généraux, sous l'hypothèse que les angles que forment les diagonales des cellules-diamants soient minorés uniformément par un angle strictement positif et indépendant du maillage. De plus, nous remarquons que lorsqu'une cellule-diamant est un parallélogramme, le gradient utilisé dans la méthode est égal au gradient ponctuel au point de concours des diagonales de la cellule pour tout polynôme d'ordre deux. Cette propriété de consistance à l'ordre deux permet de montrer que sur certains types de maillages dont presque toutes les cellules-diamants sont des parallélogrammes, nous obtenons la convergence des gradients calculés vers les gradients exacts à l'ordre un et demi. Dans un deuxième temps, nous effectuons une analyse "au sens des éléments finis" et utilisons pour cela le fait, démontré au chapitre 4, que la méthode DDFV peut être interprétée, à une légère modification du second membre près, comme une méthode d'éléments finis non-conformes. L'utilisation du second lemme de Strang permet alors de scinder l'erreur en deux parties : une erreur dite d'interpolation, et une erreur dite de consistance. Nous avons pu montrer que ces deux erreurs tendent vers zéro à l'ordre un sous des hypothèses très faibles sur la régularité du maillage; ceci explique en particulier que le schéma se comporte bien sur des maillages dont les éléments sont très aplatis, très déformés, ou sur des maillages non conformes possédant des rapports de raffinement locaux arbitraires. Enfin, une technique de dualité de type Aubin-Nitsche permet de prouver la convergence à l'ordre un en norme L^2 de la fonction éléments finis construite à partir de la solution du schéma, et ce sur des maillages généraux. La raison pour laquelle l'ordre deux n'est pas obtenu par cette technique de dualité est le fait, mentionné ci-dessus, que le membre de droite dans la formulation variationnelle équivalente au schéma n'est pas exactement celui qui aurait été obtenu dans une véritable méthode d'éléments finis. En revanche, cet ordre deux en norme L^2 est obtenu sur des maillages dont presque toutes les cellules-diamants sont des parallélogrammes et si le second membre de l'équation de Laplace est suffisamment régulier. Nous reviendrons sur cette problématique dans la quatrième partie de ce document.

Le chapitre 7 résume l'article [A4] dans lequel, avec Yohan Penel et Yann Rosenbaum, nous nous sommes intéressés à l'analyse a posteriori du schéma DDFV appliqué à l'équation de Laplace. Cette question est en effet légitime : nous avons construit un schéma permettant de travailler sur des maillages non conformes pouvant être raffinés de manière arbitraire et donc de façon adaptée au problème considéré; encore faut il pour cela disposer d'un critère fiable qui permette d'indiquer à l'utilisateur où raffiner en priorité. Grâce à la (presque) équivalence de la méthode DDFV avec une méthode d'éléments finis, nous pouvons utiliser des outils devenus classiques dans les techniques d'estimations a posteriori pour les éléments finis. Deux difficultés principales apparaissent dans le cadre de la méthode DDFV. Tout d'abord, le fait que la méthode soit non-conforme nécessite d'introduire une décomposition de Helmholtz-Hodge de l'erreur comme cela est proposé dans [3, 39, 90]. La partie conforme de cette décomposition donne naissance à des termes classiques dans l'estimateur, liés aux sauts de la composante normale du gradient aux travers des arêtes des cellules-diamants. La partie non-conforme de cette décomposition donne naissance à des termes moins classiques, liés aux sauts de la composante tangentielle du gradient. La seconde difficulté tient au fait que la méthode DDFV utilise deux maillages (le primal et le dual) sur lesquels l'équation de Laplace est intégrée. Ce deuxième point se traduit par le fait que l'estimateur total est une somme d'estimateurs liés au maillage primal et d'estimateurs liés au maillage dual. Or, lors d'un processus de raffinement adaptatif, c'est sur le maillage primal que l'utilisateur possède un certain contrôle. Dans la pratique, les estimateurs duaux sont redistribués sur les cellules primales qui intersectent les cellule duales correspondantes, afin de former un estimateur "agrégé" qui va être effectivement utilisé pour le raffinement. Dans tout le processus d'obtention des estimateurs, nous nous sommes attachés à obtenir une borne supérieure complètement calculable, c'est-à-dire ne faisant pas intervenir de constantes inconnues, comme c'est encore fréquemment le cas dans le cadre des éléments finis (voir cependant [21], [111]) et aussi précise que possible, afin de ne pas trop dégrader l'efficacité de l'estimateur (rapport entre l'estimateur et la véritable erreur). Nous donnons deux types de résultats numériques. Le premier concerne une solution analytique régulière mais présentant de très fortes variations locales. Nous avons utilisé des maillages de carrés non-conformes dont le raffinement local peut atteindre $2^8 \times 2^8$. Dans ce cas, le raffinement uniforme et le raffinement adaptatif fournissent des ordres de convergence asymptotiquement du même ordre, mais le raffinement adaptatif permet d'obtenir des erreurs beaucoup plus faibles pour un même nombre d'inconnues. Le second test concerne une solution présentant une singularité de coin. Dans ce cas, le raffinement uniforme ne permet pas d'obtenir une convergence avec l'ordre optimal en fonction du nombre d'inconnues du schéma; cependant, le raffinement adaptatif permet de retrouver cet ordre optimal.

La quatrième et dernière partie de ce mémoire est consacrée à la question de l'ordre de convergence en norme L^2 de la solution numérique du problème de Laplace, issue

d'une discrétisation volumes finis.

Cette question peut sembler curieuse aux personnes habituées aux éléments finis : alors que le lemme d'Aubin-Nitsche permet de montrer cette convergence à l'ordre deux en norme $L^2(\Omega)$ lorsque la méthode utilisée pour l'approximation est la méthode des éléments finis P^1 de Lagrange ou de Crouzeix-Raviart sur maillages triangulaires, lorsque le second membre de l'équation de Laplace est lui-même dans $L^2(\Omega)$ et que le domaine Ω est convexe, cette question reste assez largement ouverte dans le cadre des volumes finis. Les seuls résultats relativement complets concernent la méthode des volumes éléments finis centrés sur les nœuds d'un maillage triangulaire, lorsque les cellules duales associées aux nœuds sont les cellules duales barycentriques, d'une part, et, d'autre part, le cas des volumes finis centrés sur les cellules, lorsque celles-ci sont des rectangles, et que les points de contrôle choisis à l'intérieur de ceux-ci sont leurs milieux. Dans le premier cas, l'ordre deux en norme L^2 est effectivement obtenu sous la condition suffisante que le second membre de l'équation de Laplace soit dans $H^1(\Omega)$, voir [27, 50]. Dans le second cas, cela a été démontré sous diverses hypothèses de régularité de la solution exacte (C^4 dans [53] et $H^3(\Omega)$ dans [79]). Toutefois, le cas des volumes finis centrés sur les cellules sur des maillages admissibles généraux, ainsi que le cas des volumes finis centrés sur les nœuds, sur le maillage de Voronoi associé, sont encore non résolus. Ma contribution concernant ce thème de recherche a été double.

Le chapitre 8 résume l'article [A3], dans lequel j'ai étudié cette question en une dimension d'espace, pour le schéma centré sur les cellules. Pour cela, j'ai utilisé une représentation des solutions exactes et approchées, à l'aide de fonctions de Green continues et discrètes, respectivement. Grâce à l'expression simple de ces fonctions de Green, il est possible d'obtenir une formule exacte pour l'erreur sur chacune des cellules du maillage. Cette expression permet de déduire des résultats d'approximation en norme L_{∞} , et donc en norme L_2 (discrètes). Sous la condition suffisante que la donnée de l'équation de Laplace soit dans $H^1(\Omega)$, et à condition de choisir les points de contrôle associés aux cellules comme étant les centres de celles-ci, alors cette erreur est effectivement d'ordre deux. En revanche, j'ai donné deux exemples montrant que si au moins l'une de ces deux conditions n'est pas remplie, alors l'ordre deux peut être perdu. La condition que la donnée de l'équation de Laplace soit dans $H^1(\Omega)$ est donc la même que pour le cas des volumes éléments finis évoqués ci-dessus : cela peut être interprété comme étant dû au fait qu'une fonction ayant cette régularité est bien approchée localement par sa moyenne. D'autre part, on peut se demander quel est l'intérêt de considérer un point de contrôle associé à une cellule qui soit différent du milieu de celle-ci. Cela tient à l'étude de la dimension deux (et trois) : quel est donc le "milieu" d'un triangle? Pour la méthode des volumes finis centrés sur les cellules appliquée à des maillages triangulaires, le point de contrôle choisi dans le but obtenir des maillages "admissibles", sur lesquels le flux à deux points est consistant, est le centre du cercle circonscrit au triangle. Le choix de ces points permet il d'obtenir l'ordre deux? Par ailleurs, qu'en est il pour la méthode des volumes finis centrés sur les nœuds, lorsque l'on utilise les maillages de Voronoi associés?

Le chapitre 9 résume l'article soumis [A1], dans lequel ma seconde contribution sur ce thème de recherche a été de combiner les solutions approchées issues d'une part de la méthode des volumes finis centrés sur les triangles d'un maillage donné, lorsque les points de contrôle choisis sont les centres des cercles circonscrits aux triangles, et d'autre part de la méthode des volumes finis centrés sur les nœuds du maillage, lorsque les volumes de contrôle sont les cellules de Voronoi associées à ces nœuds. Cette combinaison est la fonction de type éléments finis évoquées dans le chapitre 6, affine par cellule-diamant. La combinaison des deux schémas évoqués ci-dessus en un seul schéma DDFV permet d'utiliser les résultats du chapitre 6. Il est alors possible de montrer que la fonction reconstruite converge à l'ordre deux en norme L_2 , sous la condition suffisante que le second membre de l'équation de Laplace soit H^1 , et que le domaine de calcul soit polygonal convexe. La démarche est d'utiliser la quasi-équivalence du schéma DDFV obtenu avec une méthode d'éléments finis non-conformes, et de poursuivre ensuite avec la même technique de dualité que dans le lemme d'Aubin-Nitsche. Cependant, comme nous l'avons déjà expliqué, nous sommes confrontés au fait que la méthode DDFV n'est pas exactement une méthode d'éléments finis, et que le second membre y est légèrement différent. Le traitement de ce terme supplémentaire est cependant très difficile, et, dans le cas qui nous intéresse, nous pouvons conclure à l'ordre deux en norme L^2 sous la condition suffisante de régularité du second membre évoquée ci-dessus. Le fait que le point de contrôle dans les triangles soit équidistant des sommets de celui-ci, ainsi que le fait que les cellules diamants soient symétriques par rapport aux médiatrices des arêtes du maillage, sont deux points fondamentaux de la preuve de cette convergence à l'ordre deux.

Première partie

Construction et analyse de schémas volumes finis de type Godunov pour des systèmes hyperboliques linéaires

Chapitre 1

Approximation par volumes finis colocalisés du système de Maxwell avec correction hyperbolique

1.1 Les équations de Maxwell et les problèmes liés à leur discrétisation

La modélisation de phénomènes électromagnétiques a fréquemment recours à la résolution numérique du système instationnaire de Vlasov-Maxwell en trois dimensions d'espace dans des géométries complexes. Les équations de Maxwell dans le vide s'écrivent de la façon suivante

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - c^2 \nabla \times \mathbf{B} = -\frac{\mathbf{j}}{\varepsilon_0} , \qquad (1.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times \mathbf{E} = 0 , \qquad (1.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} , \qquad (1.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 , \qquad (1.4)$$

où $\mathbf{E}, \mathbf{B}, \rho$ et \mathbf{j} , représentent respectivement le champ électrique, l'induction magnétique, la densité de charge et la densité de courant. Par ailleurs, la permittivité électrique ε_0 et la perméabilité magnétique μ_0 sont reliées à la vitesse de la lumière par $\varepsilon_0\mu_0c^2 = 1$. Dans le cadre de l'interaction avec des particules chargées de charge q et de masse men régime non-collisionnel, la densité de charge et la densité de courant sont reliées à la fonction de distribution f des particules dans l'espace des phases par les relations

$$\rho(\mathbf{x},t) := \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x},\mathbf{v},t) d\mathbf{v} \quad \text{et} \quad \mathbf{j}(\mathbf{x},t) := \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x},\mathbf{v},t) \mathbf{v} d\mathbf{v}.$$
(1.5)

La fonction de distribution des particules vérifie quant à elle l'équation de Vlasov que l'on écrit de la façon suivante, en régime non relativiste

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \frac{q}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = 0.$$
(1.6)

Comme on peut le constater en prenant la divergence de l'équation d'Ampère (1.1) et en lui retranchant la dérivée temporelle de l'équation de Gauss (1.3), il est nécessaire

pour avoir une solution au système de Maxwell que ρ et **j** vérifient la relation suivante, dite de continuité, ou de conservation de la charge :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 , \qquad (1.7)$$

équation vérifiée lorsque ρ et **j** sont données par (1.5), comme on peut s'en convaincre en intégrant (1.6) sur l'espace des vitesses. Inversement, lorsque (1.7) est vérifiée, il suffit de prendre la divergence de (1.1) pour constater que (1.3) est vérifiée pour tout t > 0 si elle l'est à t = 0. En ce sens, on peut dire que l'équation de Gauss est une conséquence de l'équation d'Ampère, de l'équation de conservation de la charge, et du fait que la divergence d'un rotationnel est nulle.

Cependant, lorsque l'on s'intéresse à la discrétisation de l'équation de Vlasov par la méthode (PIC) [13, 65], qui reste la méthode de simulation numérique de cette équation la plus populaire encore de nos jours malgré l'émergence des simulations eulériennes (voir les articles [36, 37, 105] et leurs références), il est bien connu que les différentes approximations et interpolations utilisées dans cette méthode ont pour conséquence que l'équation de conservation de la charge n'est en général plus vérifiée de façon exacte au niveau discret. Par ailleurs, toujours au niveau discret, il se peut que la divergence d'un rotationnel ne soit pas non plus exactement nulle. De ce fait, la loi de Gauss n'est plus une conséquence de l'équation d'Ampère, et il est connu depuis longtemps qu'ignorer tout simplement la loi de Gauss et ne résoudre que les équations (1.1), (1.2) (système qui reste bien posé) résulte en des simulations qui perdent tout sens physique, en particulier en temps long, car le champ électrique calculé et la densité de charge ne vérifient plus la loi de Gauss (même de façon approchée).

Plusieurs stratégies ont été élaborées pour faire face à ce problème. La première est de tenter de remédier aux causes du problème : il faut alors savoir construire des discrétisations des opérateurs aux dérivées partielles qui respectent la propriété $\nabla \cdot (\nabla \times) = 0$, et des densités de charge et de courant électriques qui vérifient une conservation discrète de la charge. La première propriété est vérifiée par le schéma de Yee et ses généralisations à des maillages présentant des propriétés d'orthogonalité (voir Remarque 3.2 page 40). Une seconde généralisation sur des maillages bidimensionnels quelconques est proposée dans le chapitre 5. En ce qui concerne la seconde propriété, la plupart des travaux ont porté sur des maillages de rectangles. Nous pouvons citer les travaux [48, 107, 115], dont une comparaison et certaines extensions ont été proposées dans la thèse de Régine Barthelmé [10]. Sur des maillages quelconques comme ceux utilisés dans le chapitre 5, il est également possible de construire des couples de densité de charge et de courant vérifiant une équation de conservation de la charge discrète, mais ceci n'est simple qu'avec des interpolations du plus bas ordre (de type "Nearest Grid Point"), ce qui en restreint l'utilisation en raison du bruit numérique engendré. Pour plus de détails, on pourra consulter la thèse de Siham Layouni [78]

La seconde stratégie consiste à corriger ces erreurs, en faisant en sorte que le champ électromagnétique calculé *in fine* vérifie, de façon exacte ou approchée selon les différentes méthodes, les équations (1.1) et (1.3).

La première de ces méthodes a été formulée par Boris [15] et est basée sur un potentiel correcteur : le champ électrique total \mathbf{E}_{tot} est la somme du champ \mathbf{E}_{ev} calculé à partir des équations d'évolution (1.1) et (1.2), et du gradient d'un potentiel calculé de telle sorte que le champ total vérifie bien la loi de Gauss :

$$\mathbf{E}_{\text{tot}} = \mathbf{E}_{\text{ev}} - \nabla \Phi \quad \text{et} \quad \nabla \cdot \mathbf{E}_{\text{tot}} = \frac{\rho}{\varepsilon_0},$$

ce qui implique la résolution d'une équation de Laplace

$$-\Delta \Phi = \frac{\rho}{\varepsilon_0} - \nabla \cdot \mathbf{E}_{\rm ev} \,,$$

ce qui peut être coûteux en terme de temps de calcul et malaisé à paralléliser. Assous *et al.* [7] ont proposé une implémentation de cette méthode dans un cadre éléments finis en considérant la loi de Gauss comme une contrainte à l'équation d'Ampère et en interprétant le potentiel correcteur comme le multiplicateur de Lagrange associé à cette contrainte. Par ailleurs, les auteurs incorporent la contrainte dans la formulation variationnelle de l'équation du second ordre vérifiée par le champ électrique *via* une méthode de pénalisation, ce qui fournit le système suivant (écrit sous sa forme forte)

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - c^2 \nabla (\nabla \cdot \mathbf{E}) + c^2 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) - \nabla \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{c^2}{\varepsilon_0} \nabla \rho - \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t}, \qquad (1.8)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}.\tag{1.9}$$

Afin d'éviter la résolution de l'équation de Poisson que requiert la méthode de Boris, Marder [74] a proposé d'ajouter un pseudo-courant dans l'équation d'Ampère, ce qui fournit la correction suivante

$$\mathbf{E}_{\text{tot}}^{n+1} = \mathbf{E}_{\text{ev}}^{n+1} + \frac{\Delta t}{\chi} \nabla \left(\nabla \cdot \mathbf{E}_{\text{ev}}^{n} - \frac{\rho^{n}}{\varepsilon_{0}} \right).$$

Par ailleurs, Langdon [77] a proposé une variante de cette approche qui consiste à évaluer l'erreur dans la loi de Gauss au pas de temps n + 1 plutôt qu'au pas de temps n:

$$\mathbf{E}_{\text{tot}}^{n+1} = \mathbf{E}_{\text{ev}}^{n+1} + \frac{\Delta t}{\chi} \nabla \left(\nabla \cdot \mathbf{E}_{\text{ev}}^{n+1} - \frac{\rho^{n+1}}{\varepsilon_0} \right).$$

Langdon a montré que cette méthode revient exactement à effectuer une itération d'un solveur de Jacobi pour la résolution de l'équation de Laplace impliquée dans la méthode de Boris. Il est donc possible d'itérer la correction pour obtenir un champ électrique qui se rapproche de celui obtenu par la méthode de Boris.

Une méthode équivalente a été utilisée dans un contexte volumes finis avec des schémas dont l'ordre peut monter jusqu'à trois sur des maillages structurés [43]. Dans cet article, une étude de stabilité a été menée pour préciser comment choisir le pas de temps et le paramètre χ en fonction du pas d'espace.

Il a été remarqué dans les articles [A9, 87] que les approches de Boris et de Marder peuvent s'exprimer sous la forme d'un système de Maxwell modifié, et que ce système modifié peut être à son tour généralisé pour inclure une troisième méthode de correction, qui est celle que nous avons développée dans les références [A8, P1, A9] et que nous allons détailler à présent : il s'agit d'une méthode qui préserve le caractère hyperbolique du système, et que l'on peut donc implémenter aisément dans un contexte volumes finis à l'aide des solveurs de ce type développés depuis plusieurs décennies de par le monde.

1.2 Les équations de Maxwell généralisées

Nous écrivons ici le système de Maxwell généralisé. Pour des densités de charge et de courant donnés ρ et **j**, nous écrivons les équations suivantes

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - c^2 \nabla \times \mathbf{B} + \chi c^2 \nabla \Phi = -\frac{\mathbf{j}}{\varepsilon_0} , \qquad (1.10)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times \mathbf{E} + \gamma \nabla \Psi = 0, \qquad (1.11)$$

$$\frac{1}{\chi}\mathcal{D}(\Phi) + \nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} , \qquad (1.12)$$

$$\frac{1}{\gamma c^2} \mathcal{D}(\Psi) + \nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \qquad (1.13)$$

Les nouvelles variables $\Phi(\boldsymbol{x},t)$ et $\Psi(\boldsymbol{x},t)$ sont introduites dans le système de départ afin de coupler (1.1) et (1.3) d'une part et (1.2) et (1.4) d'autre part. Les nouvelles variables et les constantes $\chi > 0$ et $\gamma > 0$ vont avoir des significations (et donc des unités) différentes selon le choix de l'opérateur \mathcal{D} . Dans ce qui suit, nous nous contentons de décrire les différentes corrections concernant le champ électrique (Équations (1.1) et (1.3)) car la violation de l'équation de conservation de la charge (1.7) n'influence qu'indirectement le champ magnétique. Toutefois, le même type de discussion peut être mené concernant la correction du champ magnétique.

Prenons la divergence de (1.10) et exprimons la dérivée temporelle de $\nabla \cdot \mathbf{E}$ en utilisant l'équation (1.12). Nous obtenons

$$\frac{\partial \mathcal{D}(\Phi)}{\partial t} - \chi^2 c^2 \Delta \Phi = \frac{\chi}{\varepsilon_0} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} \right) - \chi c^2 \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{B}).$$
(1.14)

Cette équation sur Φ montre bien qu'à condition de choisir correctement les conditions aux limites et/ou initiales sur cette variable, celle-ci reste nulle si la conservation de la charge est assurée et si $\nabla \cdot (\nabla \times) = 0$.

La formulation de l'équation (1.3) sous forme de contrainte introduite par Assous et al. est obtenue en choisissant $\mathcal{D}(\Phi) \equiv 0$. L'équation (1.14) est alors elliptique et Φ est un potentiel correcteur qui assure que le champ électrique calculé vérifie bien la loi de Gauss. Une seconde possibilité est de choisir $\mathcal{D}(\Phi) \equiv \Phi$, ce qui correspond à l'approche proposée par Marder. Dans ce cas, l'équation (1.14) est parabolique et les erreurs contenues dans le membre de droite sont diffusées.

Enfin, un autre possibilité est de choisir $\mathcal{D}(\Phi) \equiv \partial \Phi / \partial t$. Dans ce cas, les erreurs numériques sont transportées en dehors du domaine de calcul à la vitesse χc . En effectuant ce choix, le système de Maxwell reformulé (1.10)-(1.13) est strictement hyperbolique. Nous le nommerons SMPH (Système de Maxwell Purement Hyperbolique). Un ingrédient important dans la pratique pour le SMPH sera le choix des conditions aux limites sur les différentes variables. Nous en reparlerons dans le paragraphe 1.4 Finalement, si nous considérons la dérivée temporelle de l'équation (1.10), que nous lui ajoutons le rotationnel de l'équation (1.11) multipliée par c^2 (en supposant que $\nabla \times (\nabla \Psi) = \mathbf{0}$) et que nous lui retranchons le gradient de l'équation (1.12) multipliée par $\chi^2 c^2$, nous obtenons une équation des ondes du second ordre pour le champ électrique, dans laquelle la loi de Gauss (1.3) est pénalisée avec un facteur $\chi^2 c^2$:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + c^2 \nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - \chi^2 c^2 \nabla \nabla \cdot \mathbf{E} = -\frac{1}{\varepsilon_0} \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} - \frac{\chi^2 c^2}{\varepsilon_0} \nabla \rho \,.$$

C'est exactement ce qui est fait (avec $\chi = 1$), en plus de la correction elliptique dans la formulation du second ordre discrétisée par éléments finis conformes dans l'article

de Assous et al [7] (voir le système (1.8)-(1.9)). On peut donc dire que la formulation développée dans cet article est doublement corrigée, puisqu'elle comporte une correction elliptique comme nous l'avons expliqué plus haut, et qu'elle intègre une correction hyperbolique par le biais de la pénalisation de la loi de Gauss dans l'équation des ondes du second ordre sur le champ électrique (voir aussi la discussion menée dans l'article [69] où une formulation moindres carrés est proposée).

1.3 Approximation numérique par volumes finis

Pour effectuer l'approximation numérique du SMPH par volumes finis sur des maillages arbitraires, il est pratique de l'écrire sous forme conservative. Posons

$$\mathbf{u} = (E_1, E_2, E_3, \Psi, B_1, B_2, B_3, \Phi)^T = (\mathbf{E}^T, \Psi, \mathbf{B}^T, \Phi)^T$$

et, pour k = 1, 2, 3,

$$\mathbf{f}_k(\mathbf{u}) = \mathcal{K}_k \, \mathbf{u}$$

où les matrices $\mathcal{K}_k \in \mathbb{R}^{8 \times 8}$ sont données par

$$\mathcal{K}_k = \begin{pmatrix} 0 & c^2 \mathcal{M}_k \\ \mathcal{M}_k^T & 0 \end{pmatrix} \tag{1.15}$$

avec

$$\mathcal{M}_{1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \chi \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ \gamma & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} , \ \mathcal{M}_{2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \chi \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 & 0 \end{pmatrix} , \ \mathcal{M}_{3} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \chi \\ 0 & 0 & \gamma & 0 \end{pmatrix} .$$
(1.16)

Nous avons alors

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial \mathbf{f}_k(\mathbf{u})}{\partial x_k} = \mathbf{g} .$$
 (1.17)

Le terme source de l'équation de conservation (1.17) est donné par

$$\mathbf{g} = -\frac{1}{\varepsilon_0} (j_1, \ j_2, \ j_3, \ 0, \ 0, \ 0, \ -\chi\rho)^T$$

et tient compte à présent non seulement de la densité de courant, mais également de la densité de charge.

Nous supposons dans la suite que le domaine de calcul Ω est partitionné en un maillage de cellules $(T_i)_{i \in [1,N]}$, dont le volume est noté $|T_i|$. La frontière ∂T_i est constituée de σ_i faces A_j , de surface $|A_j|$, où j parcourt V(i), l'ensemble des indices des faces de T_i . La normale extérieure à T_i sur la face A_j est notée par \mathbf{n}_{ij} . Nous cherchons à calculer une approximation de la valeur moyenne \mathbf{u}_i^n de la solution $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ sur T_i aux instants $t^n = n \,\Delta t$, où Δt est le pas de temps, déterminé par une condition de type CFL pour un schéma explicite.

Pour la solution numérique du système inhomogène (1.17), nous appliquons un splitting du terme source à la Strang [106], et nous considérons donc dans la suite uniquement la résolution des équations de conservation homogènes associées (système (1.17) dans lequel nous posons $\mathbf{g} = 0$). La technique employée est une méthode classique de volumes finis. Elle débute donc par l'intégration du système homogène sur l'élément d'espacetemps $T_i \times [t^n, t^{n+1}]$. En appliquant la formule de Green, nous obtenons une équation d'évolution exacte qui s'écrit

$$\mathbf{u}_{i}^{n+1} = \mathbf{u}_{i}^{n} - \frac{\Delta t}{|T_{i}|} \sum_{j=1}^{\sigma_{i}} \mathbf{G}_{i,j}^{n+1/2} , \qquad (1.18)$$

où le flux $\mathbf{G}_{i,j}^{n+1/2}$ à travers la face A_j est donné par

$$\mathbf{G}_{i,j}^{n+1/2} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{A_j} \mathcal{A}_{ij} \mathbf{u}(\sigma, t) d\sigma dt, \qquad (1.19)$$

la matrice \mathcal{A}_{ij} étant définie par

$$\mathcal{A}_{ij} = \sum_{k=1}^{3} \mathcal{K}_k(\mathbf{n}_{ij})_k.$$

Un schéma numérique fondé sur (1.18) est complètement déterminé dès que l'on se donne une approximation du flux $\mathbf{G}_{i,j}^{n+1/2}$ en fonction des inconnues $(\mathbf{u}_i)_{i \in [1,N]}$ discrétisant les valeurs moyennes de **u**. Pour cela, nous avons utilisé la technique classique qui consiste à résoudre un problème de Riemann unidimensionnel dans la direction normale à A_j , extérieurement à T_i : nous résolvons

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathcal{A}_{ij}\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \xi} = 0, \qquad (1.20)$$

avec comme condition initiale

$$\mathbf{u}(\xi, t=0) = \mathbf{u}_i \text{ si } \xi < 0 \text{ et } \mathbf{u}(\xi, t=0) = \mathbf{u}_r \text{ si } \xi > 0,$$
 (1.21)

où r est l'indice de la cellule T_r voisine à T_i à travers la face A_j . Si A_j est sur $\partial\Omega$, la cellule T_r est une cellule fictive dont nous préciserons le rôle dans le paragraphe consacré aux conditions aux limites.

Pour exprimer simplement les calculs menant à la solution du problème de Riemann (1.20)-(1.21), définissons **p**, un vecteur orthogonal à \mathbf{n}_{ij} (rebaptisé **n** dans ce qui suit pour plus de lisibilité) et définissons $\mathbf{q} = \mathbf{n} \times \mathbf{p}$. Bien sûr, le choix de **p** (et donc de **q**) n'est pas univoque, mais nous verrons que la solution du problème de Riemann n'en dépend pas. La matrice \mathcal{A}_{ij} pouvant être diagonalisée de la façon suivante

$$\mathcal{A}_{ij} = \mathcal{R}\Lambda \mathcal{R}^{-1}$$

avec, en notant $\mathbf{0} = (0, 0, 0)^T$,

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} c\mathbf{p} & c\mathbf{q} & c\mathbf{p} & -c\mathbf{q} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & c\mathbf{n} & c\mathbf{n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c & -c & 0 & 0 \\ \mathbf{q} & -\mathbf{p} & -\mathbf{q} & -\mathbf{p} & \mathbf{n} & \mathbf{n} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix},$$

la matrice des vecteurs propres de \mathcal{A}_{ij} ,

$$\Lambda = \operatorname{diag}(c, c, -c, -c, \gamma c, -\gamma c, \chi c, -\chi c)$$
(1.22)

la matrice diagonale des valeurs propres de \mathcal{A}_{ij} et

$$\mathcal{R}^{-1} = \frac{1}{2c} \begin{pmatrix} \mathbf{p}^T & 0 & c \, \mathbf{q}^T & 0 \\ \mathbf{q}^T & 0 & -c \, \mathbf{p}^T & 0 \\ \mathbf{p}^T & 0 & -c \, \mathbf{q}^T & 0 \\ -\mathbf{q}^T & 0 & -c \, \mathbf{p}^T & 0 \\ \mathbf{0}^T & 1 & c \, \mathbf{n}^T & 0 \\ \mathbf{0}^T & -1 & c \, \mathbf{n}^T & 0 \\ \mathbf{n}^T & 0 & \mathbf{0}^T & -c \\ \mathbf{n}^T & 0 & \mathbf{0}^T & -c \end{pmatrix},$$

la solution du problème de Riemann se ramène à la solution d'un système de huit équations de transport linéaires découplées

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \xi} = 0$$

avec comme conditions initiales

$$\mathbf{v}(\xi, t=0) = \mathbf{v}_i$$
 si $\xi < 0$ et $\mathbf{v}(\xi, t=0) = \mathbf{v}_r$ si $\xi > 0$

lorsque l'on a posé $\mathbf{v} = \mathcal{R}^{-1}\mathbf{u}$.

Compte tenu des signes des éléments de Λ (voir (1.22)), la solution de ce problème est donnée par

$$\mathbf{v}_{ir} := \mathbf{v}(\xi = 0, t) = \frac{1}{2c} \begin{pmatrix} \mathbf{p} \cdot \mathbf{E}_i + c \, \mathbf{q} \cdot \mathbf{B}_i \\ \mathbf{q} \cdot \mathbf{E}_i - c \, \mathbf{p} \cdot \mathbf{B}_i \\ \mathbf{p} \cdot \mathbf{E}_r - c \, \mathbf{q} \cdot \mathbf{B}_r \\ -\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}_r - c \, \mathbf{p} \cdot \mathbf{B}_r \\ \Psi_i + c \, \mathbf{n} \cdot \mathbf{B}_i \\ -\Psi_r + c \, \mathbf{n} \cdot \mathbf{B}_r \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{E}_i + c \, \Phi_i \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{E}_r - c \, \Phi_r \end{pmatrix} \quad \text{pour } t > 0 .$$
(1.23)

En exprimant $\mathbf{u}(\xi = 0, t) = \mathcal{R}\mathbf{v}(\xi = 0, t)$ et en tenant compte des égalités

$$\mathbf{a} \times \mathbf{n} = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{q})\mathbf{p} - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{p})\mathbf{q}$$
 et $(\mathbf{a} \times \mathbf{n}) \times \mathbf{n} = -(\mathbf{a} \cdot \mathbf{p})\mathbf{p} - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{q})\mathbf{q}$, (1.24)

pour tout vecteur $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^3$, nous pouvons exprimer la solution du problème de Riemann initial (1.20)–(1.21) sous la forme

$$\mathbf{u}_{ir} := \mathbf{u}(\xi = 0, t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left[(\mathbf{E}_i + \mathbf{E}_r) + c(\mathbf{B}_i - \mathbf{B}_r) \times \mathbf{n} + c(\Phi_i - \Phi_r) \mathbf{n} \right] \\ \frac{1}{2} \left[(\Psi_i + \Psi_r) + c(\mathbf{B}_i - \mathbf{B}_r) \cdot \mathbf{n} \right] \\ \frac{1}{2c} \left[-(\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_r) \times \mathbf{n} + (\Psi_i - \Psi_r) \mathbf{n} + c(\mathbf{B}_i + \mathbf{B}_r) \right] \\ \frac{1}{2c} \left[(\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_r) \cdot \mathbf{n} + c(\Phi_i + \Phi_r) \right] \end{pmatrix}. \quad (1.25)$$

En approchant $\mathbf{u}(\sigma, t)$ dans (1.19) par la formule (1.25) prise au pas de temps n, on obtient à partir de (1.18) un schéma du premier ordre qui s'exprime sous la forme

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^n - \frac{\Delta t}{|T_i|} \sum_{j=1}^{\sigma_i} |A_j| \mathcal{A}_{ij} \mathbf{u}_{ir(i,j)}^n,$$

où r(i, j) est l'indice de la cellule voisine de T_i au travers de l'arête j. On peut obtenir des schémas d'ordre plus élevé en utilisant des techniques de type MUSCL [108], WENO [118] ou ADER [23, 47].

1.4 Conditions aux limites pour le système reformulé

Un point important à remarquer avant toute étude détaillée des conditions aux limites est que le SMPH possède huit caractéristiques, quatre entrantes et quatre sortantes, comme l'indiquent les signes des valeurs propres de la matrice \mathcal{A}_{ij} (voir Eq. (1.22). Il y a donc quatre conditions aux limites à imposer, contrairement au système de Maxwell initial, dans lequel on peut vérifier que sur les six caractéristiques, deux sont entrantes, deux sortantes, et deux de valeur propre associée nulle, et pour lequel, donc, seules deux conditions aux limites sont à imposer.

Considérons une cellule T_i dont l'une des faces A_j est située sur le bord du domaine de calcul. Nous utilisons une technique classique qui consiste à définir une cellule "fantôme" (d'indice toujours noté r) située de l'autre côté de la face A_j , dans laquelle nous allons prescrire des valeurs \mathbf{u}_r de telle sorte que la solution (1.25) du problème de Riemann, qui est la valeur de \mathbf{u} utilisée pour calculer les flux sur le bord de T_i vérifie les conditions aux limites que l'on souhaite appliquer. Puisque $\mathbf{u}_{ir} = \mathcal{R}\mathbf{v}_{ir}$, et au vu de l'expression (1.23) de cette quantité, il faut et il suffit donc pour cela de prescrire, parmi les huit composantes de \mathbf{u}_r , les quatre combinaisons linéaires

$$\begin{pmatrix} \mathbf{p} \cdot \mathbf{E}_{r} - c \, \mathbf{q} \cdot \mathbf{B}_{r} \\ -\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}_{r} - c \, \mathbf{p} \cdot \mathbf{B}_{r} \\ -\Psi_{r} + c \, \mathbf{n} \cdot \mathbf{B}_{r} \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{E}_{r} - c \, \Phi_{r} \end{pmatrix}, \qquad (1.26)$$

qui sont les variables conservatives associées aux caractéristiques entrantes. On peut remarquer que puisque \mathbf{p} et \mathbf{q} sont des vecteurs indépendants, imposer les deux premières composantes dans (1.26) revient à imposer

$$(\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}_r)\mathbf{q} - c(\mathbf{q} \cdot \mathbf{B}_r)\mathbf{q} - (\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}_r)\mathbf{p} - c(\mathbf{p} \cdot \mathbf{B}_r)\mathbf{p}$$
,

ce qui, compte tenu des relations (1.24), revient à imposer

$$(\mathbf{E}_r - c\mathbf{B}_r \times \mathbf{n}) \times \mathbf{n}.$$

1.4.1 Conducteur parfait

Une telle surface est caractérisée par

$$\mathbf{E} \times \mathbf{n} = 0 \tag{1.27}$$

 et

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{n} = 0 \ . \tag{1.28}$$

Notons que pour le système de Maxwell non corrigé, il est traditionnel de considérer que la relation (1.28) est une conséquence de la relation (1.27) combinée à l'équation (1.2). Nous allons voir que pour le SMPH, la relation (1.28) ne peut pas être considérée comme une conséquence de la relation (1.27).

En écrivant que la solution \mathbf{u}_{ir} du problème de Riemann doit vérifier les conditions (1.27) et (1.28), nous obtenons

$$\mathbf{E}_{ir} \times \mathbf{n} = \frac{1}{2} \left[(\mathbf{E}_i + \mathbf{E}_r) \times \mathbf{n} + c((\mathbf{B}_i - \mathbf{B}_r) \times \mathbf{n}) \times \mathbf{n} \right] = \mathbf{0}$$

soit

$$(\mathbf{E}_r - c\mathbf{B}_r \times \mathbf{n}) \times \mathbf{n} = -(\mathbf{E}_i + c\mathbf{B}_i \times \mathbf{n}) \times \mathbf{n}$$
(1.29)

Mémoire d'habilitation à diriger des recherches

Pascal Omnes

21

d'une part et

$$\mathbf{B}_{ir} \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{2c} \left[(\Psi_i - \Psi_r) + c(\mathbf{B}_i + \mathbf{B}_r) \cdot \mathbf{n} \right] = 0$$
$$\Psi_r - c\mathbf{B}_r \cdot \mathbf{n} = \Psi_i + c\mathbf{B}_i \cdot \mathbf{n}$$
(1.30)

 soit

d'autre part, et nous avons donc imposé les trois premières composantes de (1.26). Il reste donc à imposer la dernière, ce qui sera discuté dans le paragraphe 1.4.3. Il est clair d'autre part que puisque la relation (1.30) fait intervenir la variable Ψ , au contraire de la relation (1.29), celle-là ne peut pas être une conséquence de celle-ci.

1.4.2 Conditions entrantes ou absorbantes sur le champ électromagnétique

Ces conditions s'écrivent

$$(\mathbf{E} - c\mathbf{B} \times \mathbf{n}) \times \mathbf{n} = (\mathbf{E}_d - c\mathbf{B}_d \times \mathbf{n}) \times \mathbf{n},$$

où les champs \mathbf{E}_d et \mathbf{B}_d sont des champs prescrits sur la frontière. Le cas particulier où $\mathbf{E}_d = \mathbf{0}$ et $\mathbf{B}_d = \mathbf{0}$ correspond aux conditions absorbantes dites de "Silver-Müller". En écrivant que la solution \mathbf{u}_{ir} du problème de Riemann vérifie la condition ci-dessus, on trouve

$$(\mathbf{E}_r - c\mathbf{B}_r \times \mathbf{n}) \times \mathbf{n} = (\mathbf{E}_d - c\mathbf{B}_d \times \mathbf{n}) \times \mathbf{n} .$$
(1.31)

Dans ce cas, nous avons donc imposé les deux premières composantes de (1.26). Nous devons imposer les deux dernières.

1.4.3 Conditions aux limites sur les correcteurs

Nous menons ici la discussion sur le champ Φ , une discussion semblable pouvant être menée pour le champ Ψ . Notons toutefois que dans le cas du conducteur parfait (paragraphe 1.4.1) seule reste une condition sur Φ à imposer.

Nous allons envisager trois possibilités. La première possibilité est dictée par la solution continue du système de Maxwell initial : pour cette solution, nous avons évidemment $\Phi = 0$ dans tout le domaine de calcul et sur sa frontière. Imposer $\Phi_{ir} = 0$ revient à

$$\Phi_{ir} = \frac{1}{2c} \left[(\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_r) \cdot \mathbf{n} + c(\Phi_i + \Phi_r) \right] = 0$$

soit

$$\mathbf{E}_r \cdot \mathbf{n} - c\Phi_r = \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{n} + c\Phi_i. \tag{1.32}$$

Une seconde possibilité est de prescrire une condition aux limites absorbantes en imposant que "ce qui entre est nul", soit

$$\mathbf{E}_r \cdot \mathbf{n} - c\Phi_r = 0 \ . \tag{1.33}$$

Cette possibilité est toutefois à manier avec précaution, car on s'éloigne alors de la solution continue du problème de Maxwell, pour laquelle $\Phi = 0$. La relation (1.33) ne fournira une bonne approximation de cette solution continue que si celle-ci est telle que $\mathbf{E} \cdot \mathbf{n}$ est nul (ou petit) sur la frontière. Notons que cela sera le cas si cette frontière est une frontière fictive servant à délimiter une partie finie de \mathbb{R}^3 , le champ tendant vers **0** à l'infini.

Une dernière possibilité est d'écrire une condition absorbante pour Φ , sous la forme

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \chi c \,\nabla \Phi \cdot \mathbf{n} = 0. \tag{1.34}$$

Mémoire d'habilitation à diriger des recherches

22

Cette condition assure (voir [87]) sur le plan continu que l'énergie

$$\mathbf{E}(\Phi,t) = \left[\int_{\Omega} \left(\frac{1}{\chi} \left| \frac{\partial \Phi}{\partial t} \right|^2 + \chi c^2 \left| \nabla \Phi \right|^2 \right) d\boldsymbol{x} \right]^{\frac{1}{2}}$$
(1.35)

est bornée uniformément en temps par

$$C\sup_{t>0} ||\frac{1}{\varepsilon_0} \left(\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}\right) - c^2 \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{B})||_{L^2(\Omega)}.$$
(1.36)

Le fait que la constante C ci-dessus ne dépende pas du temps assure que le SMPH est une bonne approximation, même en temps long, des équations de Maxwell traditionnelles, dans le sens où les deux termes $\frac{1}{\chi} \frac{\partial \Phi}{\partial t}$ d'une part et $\nabla \Phi$ d'autre part, qui sont les deux termes qui viennent modifier les équations de Maxwell initiales ont leur norme qui est bornée par un terme qui reste petit si la conservation de la charge est à peu près satisfaite d'une part et si $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{B})$ reste faible d'autre part. Une façon de discrétiser (1.34) est de considérer cette équation comme une équation de transport sur Φ vers l'extérieur du domaine de calcul, ce qui se traduit, par conservation, par $\Phi_{ir} = \Phi_i$, soit, en tenant compte de (1.25) :

$$c\Phi_r - \mathbf{E}_r \cdot \mathbf{n} = c\Phi_i - \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{n}. \tag{1.37}$$

1.4.4 Mise en œuvre effective

Les relations exprimées jusqu'à présent concernent les variables conservées pénétrant dans le domaine de calcul. Comme nous l'avons précisé en début de paragraphe 1.4, nous imposons des valeurs $\mathbf{E}_r, \Psi_r, \mathbf{B}_r, \Phi_r$ dans "les cellules fantômes" situées de façon fictive de l'autre côté de la frontière. Nous avons donc huit valeurs à imposer, pour seulement quatre conditions aux limites. Nous avons donc une infinité de choix, mais il convient dans la pratique d'effectuer un choix simple. Considérons l'exemple du conducteur parfait pour lequel nous imposons de plus la condition $\Phi = 0$. Il est aisé de vérifier que le choix

$$\Phi_r = -\Phi_i \quad , \quad \Psi_r = \Psi_i \ \mathbf{E}_r imes \mathbf{n} = -\mathbf{E}_i imes \mathbf{n} \quad , \quad \mathbf{E}_r \cdot \mathbf{n} = \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{n} \ \mathbf{B}_r imes \mathbf{n} = \mathbf{B}_i imes \mathbf{n} \quad , \quad \mathbf{B}_r \cdot \mathbf{n} = -\mathbf{B}_i \cdot \mathbf{n}$$

permet de remplir les conditions (1.29), (1.30) et (1.32). Notons que l'on peut écrire de façon équivalente les deux dernières lignes ci-dessus sous la forme

$$\mathbf{E}_r = -\mathbf{E}_i + 2(\mathbf{E}_i \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$$
 et $\mathbf{B}_r = \mathbf{B}_i - 2(\mathbf{B}_i \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$.

On vérifie qu'il est possible de trouver des choix simples pour les autres quadruplets de conditions aux limites.

1.5 Résultats numériques

Nous présentons ici trois tests. Tout d'abord, nous considérons un guide d'onde rectangulaire sans charge, dans lequel le champ électrique est à divergence nulle. A la frontière du domaine $\Omega = [0; 1] \times [0; 1]$, nous imposons des conditions de conducteur parfait en y = 0 and y = 1, alors qu'en x = 0 nous imposons une condition d'onde entrante et en x = 1, des conditions de Silver-Müller. Nous utilisons trois maillages triangulaires composés respectivement de 100 ("coarse grid"), 400 ("intermediate grid") et 1600 ("fine grid") triangles. La Figure 1.1 représente la norme L² de la divergence

discrète du champ électrique en fonction du temps, lorsque nous utilisons ou non une correction et avec un schéma d'ordre un ou deux. Nous observons que lorsqu'aucune correction n'est effectuée, la divergence discrète de \mathbf{E} ne tend pas vers zéro (en fonction du pas du maillage) avec le schéma du premier ordre et tend vers zéro à l'ordre un avec un schéma d'ordre deux. Au contraire, lorsque la correction hyperbolique est utilisée, la divergence discrète de \mathbf{E} tend vers zéro avec le même taux de convergence que le schéma.



FIG. 1.1 – norme L² de $\nabla \cdot \mathbf{E}$ pour des simulations sans correction (ligne du haut) et avec correction (ligne du bas, $\chi = 1$) avec le schéma d'ordre un (colonne de gauche) et le schéma d'ordre deux (colonne de droite).

Dans le deuxième test, nous considérons une situation dans laquelle la conservation de la charge n'est intentionnellement pas vérifiée et nous comparons les différentes conditions aux limites sur Φ quant à leur capacité à absorber les erreurs portées par cette variable. Ce mécanisme est essentiel pour maintenir l'énergie (1.35) aussi faible que possible et donc pour que le SMPH reste une bonne approximation des équations de Maxwell. En prenant une condition initiale nulle pour toutes les variables, nous imposons $\mathbf{j} = \mathbf{0}$ durant tout le calcul et nous introduisons une densité de charge croissant linéairement avec le temps au centre du domaine $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$. Cette densité de charge est définie par

$$\rho(x, y, t) = \rho_0 \ \omega \ t \ F(x, y) \ , \quad \boldsymbol{x} \in \Omega \ , \quad t \ge 0 \ , \tag{1.38}$$

avec $\rho_0 = 10^{-5} \frac{C}{m^3}$ et $\omega = 9.42 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$. En notant *H* la fonction de Heaviside, la fonction *F* est donnée par $F(x, y) = [H(x - x_1) - H(x - x_2)] \cdot [H(y - y_1) - H(y - y_2)]$, où $x_1 = y_1 = 0.449$ m et $x_2 = y_2 = 0.551$ m sont les coordonnées des coins du carré dans lequel la distribution de charge est concentrée.

Un schéma traditionnel basé uniquement sur les équations d'Ampère et de Faraday calculera un champ électromagnétique nul car le seul terme source dans ces équations

est **j**. Ainsi, dans ce cas, l'erreur dans la loi de Gauss va croître avec le temps dans les mêmes proportions que $\rho(t)$. En revanche, la solution numérique du SMPH va percevoir l'inconsistance des densités de charge et de courant et va restaurer la loi de Gauss approximativement. Ceci est démontré sur la figure 1.2, où la dépendance en temps de la norme L^2 de $\nabla \cdot \mathbf{E} - \frac{\rho}{\varepsilon_0}$ est tracée en fonction du temps pour différents conditions aux limites appliquées au correcteur. Alors que nous observons la croissance linéaire attendue



FIG. 1.2 – norme L^2 de $\nabla \cdot \mathbf{E} - \frac{\rho}{\varepsilon_0}$ pour le cas non corrigé (figure en haut à gauche), pour la condition absorbante (1.34) (figure en haut à droite), pour la condition $\Phi = 0$ (figure en bas à gauche) et pour la condition $c\Phi - \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} = 0$ (figure en bas à droite).

de l'erreur dans le cas sans correction, la correction se comporte différemment selon le type de conditions aux limites imposées sur la variable Φ . La condition absorbante sur Φ , donnée par (1.34) permet initialement une bonne absorption de l'erreur, puis, au contraire, l'erreur augmente de nouveau de façon linéaire avec un niveau toutefois nettement inférieur au cas non corrigé (l'erreur est environ trois cents fois plus petite à la fin de la simulation) et décroissant lorsque χ augmente. Deux hypothèses peuvent être envisagées pour expliquer cette croissance linéaire. Tout d'abord, il se peut que la discrétisation proposée (Équation (1.37)) pour cette condition absorbante ne soit pas optimale et soit la cause d'une instabilité numérique. Mais il se peut aussi que la borne uniforme (1.36) de l'énergie portée par Φ soit insuffisante pour garantir que celle-ci soit bornée en temps : en effet, si nous avons choisi ρ et **j** de telle sorte que la norme de $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}\right)$ soit bornée (en fait constante) en temps, rien n'indique que, numériquement, $c^2 \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{B})$ soit une quantité dont la norme soit elle aussi bornée. En particulier, puisque ρ croit linéairement avec le temps, il en est de même pour **E**, ce qui peut induire, *via* le couplage entre **E** et **B**, une croissance de **B**.

Nous observons d'autre part que lorsque l'on applique la condition aux limites $\Phi = 0$, la norme de l'erreur est bornée en temps, mais l'erreur semble être réfléchie sur la

frontière. Finalement, en utilisant la condition absorbante $c\Phi - \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} = 0$, l'erreur reste bornée et se stabilise en norme vers une valeur indépendante du temps. Par ailleurs, dans ces deux derniers cas, augmenter les valeurs de χ permet de mieux respecter la loi de Gauss.

Le dernier test numérique est un test simple mais typique de ce que l'on peut rencontrer dans le contexte des simulations PIC. Le domaine de calcul est le même que précédemment et nous considérons qu'il représente une diode plane dont l'anode et la cathode sont respectivement situées sur les frontières gauche et droite. Des électrons sont injectés sur la frontière gauche du dispositif et accélérés tout au long de leur parcours dans la diode par un champ électrique statique extérieur. Une simulation sans correction et une simulation avec la correction hyperbolique et $\chi = 1$ ont été effectuées. La figure 1.3 représente la composante E_x du champ électrique après un certain temps de simulation, ainsi que la norme L^2 de $\nabla \cdot \mathbf{E} - \frac{\rho}{\varepsilon_0}$ en fonction du temps. Alors que la simulation sans correction a produit un régime irréaliste physiquement, la simulation corrigée présente un certaine vraisemblance physique. En effet, si l'on néglige les variations transverses de E_y , on obtient de la loi de Gauss que

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} \approx \frac{\rho}{\varepsilon_0}.$$

Puisqu'il n'y a que des électrons dans le dispositif, cette quantité est négative et la composante E_x du champ électrique devrait décroître lorsque x croît, ce qui est le cas dans la simulation corrigée, au contraire de la simulation non corrigée.



FIG. 1.3 – Composante E_x du champ électrique (en haut) et norme L^2 de $\nabla \cdot \mathbf{E} - \frac{\rho}{\varepsilon_0}$ (en bas) lors de simulations sans correction (à gauche) ou avec correction (à droite).

Chapitre 2

Influence de la géométrie des cellules sur le comportement à bas Mach du schéma de Godunov appliqué à l'équation des ondes

Nous résumons ici un travail effectué en collaboration avec Stéphane Dellacherie et Felix Rieper [A2]. Ce travail est le fruit de réflexions entamées en Juin 2008 à Aussois, à l'occasion du congrès Finite Volume for Complex Applications V. Felix Rieper y a présenté un exposé montrant que le comportement des schémas de type Godunov appliqués aux équations d'Euler à bas nombre de Mach est très différent selon que le maillage est constitué de quadrangles (la solution numérique n'est physiquement pas réaliste) ou de triangles (la solution numérique est réaliste) [99]. Ces réflexions sont présentées de façon plus détaillée dans un article que Felix Rieper a écrit avec G. Bader [101]. Dans ces références, les auteurs proposent une explication à ce phénomène sur un maillage triangulaire bien particulier, fondée sur un développement asymptotique formel de la solution numérique du schéma utilisé, en puissances du nombre de Mach M. Sur ce maillage particulier, les auteurs montrent que : 1) la pression discrète est la somme d'une constante dans le domaine et d'une perturbation d'ordre deux; 2) la vitesse discrète est la somme d'une vitesse d'ordre zéro à divergence discrète nulle, et d'une perturbation d'ordre un. Les éléments 1) et 2) ci-dessus sont des propriétés partagées par la solution continue, mais il n'est pas possible de les retrouver sur des maillages de quadrangles. Par ailleurs, Stéphane Dellacherie a montré dans un travail récent [42] que l'on pouvait déjà expliquer au moins une partie des problèmes des schémas de Godunov à bas nombre de Mach par l'étude de ces schémas appliqués à l'équation des ondes linéaire, sans tenir compte, donc, des termes non-linéaires des équations d'Euler. Cette analyse a été menée par l'étude de l'équation modifiée associée au schéma de Godunov lorsqu'on l'applique à l'équation des ondes sur maillages cartésiens, c'est-à-dire lorsque toutes les cellules du maillage sont des carrés. Rappelons que la notion d'équation modifiée revient à retrancher à l'équation aux dérivées partielles de départ le premier terme de l'erreur de troncature du schéma numérique utilisé; ce dernier devient donc consistant avec l'équation modifiée à un ordre plus élevé qu'avec l'équation de départ. Cette équation modifiée permet donc d'en savoir plus sur le comportement du schéma numérique. Il est par exemple bien connu que le schéma décentré vers l'amont, semi-discret en espace, associé à l'équation de transport $\partial_t u + a \partial_x u = 0$ (avec a > 0 constante) est consistant à l'ordre un avec cette équation, mais est consistant à l'ordre deux avec l'équation modifiée $\partial_t u + a \partial_x u - \frac{a}{2} \Delta x \partial_{xx}^2 u = 0$, ce qui permet de prévoir le caractère dissipatif de ce

schéma. A l'aide de cette notion, S. Dellacherie a montré que les problèmes rencontrés par le schéma de Godunov à bas nombre de Mach pouvaient être expliqués par la perte de stationnarité du noyau de l'équation des ondes linéaire : ce dernier, qui est, rappelons le, constitué des champs incompressibles (champs de vitesse à divergence nulle et champs de pression constants en espace), n'est pas le noyau de l'équation des ondes modifiée. Il s'en suit, dans cette équation modifiée, un transfert d'énergie de l'espace incompressible vers l'espace acoustique qui crée des perturbations de pression d'ordre Msur une échelle de temps elle aussi d'ordre M, c'est-à-dire très courte lorsque le nombre de Mach est faible. Bien sûr, la diffusion numérique étant d'ordre $\frac{\Delta x}{M}$, il est toujours possible de raffiner le maillage pour améliorer les résultats, mais à un coût, en terme de ressources informatiques nécessaires, qui devient vite prohibitif lorsque M est très petit devant un. A l'aide de cette notion d'équation modifiée, S. Dellacherie a pu alors proposer une modification simple du schéma de Godunov qui permet de garder la stationnarité de l'espace incompressible. Cette modification, baptisée "schéma de Godunov bas Mach" revient à centrer le gradient de pression et à n'utiliser un décentrement que dans l'équation d'évolution de la pression.

Toutefois, cette analyse proposée par S. Dellacherie n'est valable que sur des maillages cartésiens, et ne permet donc pas de traiter le cas des maillages triangulaires, sur lesquels la notion d'équation modifiée est difficilement généralisable. Notre contribution sur cette question est la suivante : nous avons étudié la structure du noyau des schémas de Godunov et de Godunov bas Mach, sur des maillages triangulaires et quadrangulaires et nous avons montré que seul le schéma de Godunov sur maillage quadrangulaire possédait un espace stationnaire trop pauvre pour approcher correctement les champs de vitesses incompressibles. Il s'en suit que, dans cette configuration, toute condition initiale discrétisant un champ de vitesse à divergence nulle est diffusée rapidement (le coefficient de diffusion étant proportionnel à $\frac{\Delta x}{M}$) vers un champ de vitesse dont la différence avec cette condition initiale est en O(1), ce qui crée une perturbation parasite d'ordre Δx en un temps d'ordre M. En revanche, dans les trois autres configurations, les espaces stationnaires des schémas permettent d'approcher de façon satisfaisante cet espace incompressible, au sens où, pour un champ de vitesse à divergence nulle régulier, il existe un élément du noyau de l'opérateur discret qui approche ce champ de vitesse (ou sa projection cellule par cellule) au moins à l'ordre Δx dans le cas triangulaire pour les schémas de Godunov et de Godunov bas Mach, et au moins à l'ordre Δx^2 pour le schéma de Godunov bas Mach sur maillage cartésien. Ces conditions initiales discrètes "bien préparées" ne créent ainsi pas d'onde parasite. Entrons à présent dans les détails. Nous limitons la discussion à la géométrie bidimensionnelle (voir [A2] pour une discussion des cas mono- et tri-dimensionnels).

2.1 Rappels sur l'équation des ondes continue

Afin d'éliminer l'influence éventuelle des conditions aux limites, considérons le tore (périodique) dans \mathbb{R}^2 : \mathbb{T}^2 := $[a_1, b_1] \times [a_2, b_2]$ et l'espace de Hilbert $(L^2(\mathbb{T}^2))^3$:= $\left\{q := \begin{pmatrix} r \\ \mathbf{u} \end{pmatrix}$ tel que $\int_{\mathbb{T}^2} r^2 dx + \int_{\mathbb{T}^2} |\mathbf{u}|^2 dx < +\infty\right\}$ équipé du produit scalaire classique $\langle q_1, q_2 \rangle = \int_{\mathbb{T}^2} q_1 \cdot q_2 dx$ et de l'énergie associée $||q|| := \langle q, q \rangle^{1/2}$. Considérons l'équation des ondes linéaire

$$\begin{cases} \partial_t q + \frac{L}{M}q = 0, \\ q(t=0,x) = q^0(x) \end{cases}$$
(2.1)

où $Lq = a_* (\nabla \cdot \mathbf{u}, \nabla r)^T$ et $\mathbf{u} = (u, v)^T$. La quantité a_* est une constante strictement positive d'ordre 1 et $M \ll 1$ (M est le nombre de Mach et a_*/M est la vitesse du son). L'équation des ondes (2.1) correspond au système d'Euler linéarisé, sans l'opérateur de convection. La quantité r(t, x) est une pression renormalisée reliée à la pression p(t, x)au travers de la relation $p = p_* + \frac{M}{a_*}r(t, x)$ (p_* est une constante d'ordre 1). Définissons à présent les sous-espaces suivants de $(L^2(\mathbb{T}^2))^3$

$$\begin{cases} \mathcal{E} = \left\{ q := \begin{pmatrix} r \\ \mathbf{u} \end{pmatrix} \in (L^2(\mathbb{T}^2))^3 \text{ tel que } \nabla r = 0 \text{ et } \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \right\} (a) \\\\ \mathcal{E}^\perp = \left\{ q := \begin{pmatrix} r \\ \mathbf{u} \end{pmatrix} \in (L^2(\mathbb{T}^2))^3 \text{ tel que } \int_{\mathbb{T}^2} r dx = 0 \text{ et } \exists \phi \in H^1(\mathbb{T}^2), \mathbf{u} = \nabla \phi \right\} (b) \\ (2.2) \end{cases}$$

En d'autres termes, \mathcal{E} est l'espace des pressions renormalisées constantes en espace et des champs de vitesse incompressibles. Il est bien connu que $(L^2(\mathbb{T}^2))^3$ peut être décomposé de la façon suivante :

Lemme 2.1

$$\mathcal{E} \oplus \mathcal{E}^{\perp} = (L^2(\mathbb{T}^2))^3 \qquad et \qquad \mathcal{E} \perp \mathcal{E}^{\perp}.$$

Autrement dit, tout $q \in (L^2(\mathbb{T}^2))^3$ peut être décomposé en

$$q = \hat{q} + q^{\perp}$$
 où $(\hat{q}, q^{\perp}) \in \mathcal{E} \times \mathcal{E}^{\perp}$ (2.3)

et cette décomposition de Hodge est unique.

Dans la suite, nous définissons cette projection de Hodge \mathbb{P} par $\mathbb{P}q := \hat{q}$. Un point essentiel dans cette étude est que

$$\mathcal{E} = KerL$$

et que, suite à la linéarité de L, la solution $q(t, \cdot)$ de (2.1) peut être décomposée de la façon suivante

$$q = \mathbb{P}q^0 + \widetilde{q} \,, \tag{2.4}$$

où $\mathbb{P}q^0$ est la projection de Hodge de q^0 et \widetilde{q} est la solution de

$$\begin{cases} \partial_t \widetilde{q} + \frac{L}{M} \widetilde{q} = 0, \\ \widetilde{q}(t=0,x) = \left(q^0 - \mathbb{P}q^0\right)(x). \end{cases}$$
(2.5)

De plus, $\tilde{q}(t, \cdot)$ appartient à \mathcal{E}^{\perp} pour tout $t \geq 0$, et, par conservation de l'énergie, on a $||\tilde{q}||(t) = ||q^0 - \mathbb{P}q^0||$. Donc, si dans l'équation des ondes (2.1), la condition initiale est la somme d'un mode incompressible et d'une perturbation acoustique en $\mathcal{O}(M)$, alors c'est aussi le cas de la solution de l'équation des ondes pour tout t > 0. Les résultats qui suivent déterminent les cas où cette propriété est correctement approchée ou non par la solution du schéma numérique.

2.2 Discrétisation de l'équation des ondes par des schémas colocalisés

Considérons à présent un maillage du tore que nous décrirons de la façon suivante. Nommons T_i les cellules du maillage. Soit A_{ij} l'arête commune de deux cellules voisines T_i et T_j , et \mathbf{n}_{ij} le vecteur normal unitaire dirigé de T_i vers T_j (notons que $\mathbf{n}_{ij} = -\mathbf{n}_{ji}$). Nous noterons par $|T_i|$ la surface de T_i et $|A_{ij}|$ la longueur de A_{ij} . Nous considérons la semi-discrétisation en espace de l'équation des ondes (2.1) par le schéma de Godunov d'ordre un collocalisé centré sur les cellules et sa variante bas Mach introduite par S. Dellacherie : la pression renormalisée r et la vitesse $\mathbf{u} = (u, v)$ sont discrétisées par $r_i(t)$ et $\mathbf{u}_i(t)$ qui représentent des approximations de leurs valeurs moyennes sur les cellules T_i à l'instant t. Ces schémas s'écrivent sous la forme suivante

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\mathbb{L}_{\kappa,h}}{M} q = 0 \quad \text{avec} \quad q := \begin{pmatrix} r \\ \mathbf{u} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3N}$$
(2.6)

où nous avons posé

$$\begin{pmatrix}
\mathbb{L}_{\kappa,h} := \begin{pmatrix}
\mathbb{L}_{\kappa,h}^{1} \\
\vdots \\
\mathbb{L}_{\kappa,h}^{i} \\
\vdots \\
\mathbb{L}_{\kappa,h}^{N}
\end{pmatrix},$$

$$\mathbb{L}_{\kappa,h}^{i}q := \frac{a_{*}}{2|T_{i}|} \begin{pmatrix}
\sum_{A_{ij} \subset \partial T_{i}} |A_{ij}| \left[(r_{i} - r_{j}) + (\mathbf{u}_{i} + \mathbf{u}_{j}) \cdot \mathbf{n}_{ij}\right] \\
\sum_{A_{ij} \subset \partial T_{i}} |A_{ij}| \left[(r_{i} + r_{j}) + \kappa(\mathbf{u}_{i} - \mathbf{u}_{j}) \cdot \mathbf{n}_{ij}\right] \mathbf{n}_{ij}
\end{pmatrix}$$
(2.7)

(N est le nombre de cellules dans le maillage). Le schéma de Godunov est donné par (2.6)(2.7) avec $\kappa = 1$; le schéma de Godunov bas Mach est donné quant à lui par (2.6)(2.7) et $\kappa = 0$. L'ensemble $Ker\mathbb{L}_{\kappa,h}$ est défini par l'ensemble $\left\{q := \begin{pmatrix} r \\ \mathbf{u} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3N}\right\}$ tel que

$$\forall i \in \{1, \dots, N\}: \begin{cases} \sum_{A_{ij} \subset \partial T_i} |A_{ij}| \left[(r_i - r_j) + (\mathbf{u}_i + \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{n}_{ij} \right] = 0, \quad (a) \\ \sum_{A_{ij} \subset \partial T_i} |A_{ij}| \left[(r_i + r_j) + \kappa (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \cdot \mathbf{n}_{ij} \right] \mathbf{n}_{ij} = 0. \quad (b) \end{cases}$$
(2.8)

2.3 Construction de champs discrets incompressibles

Nous construisons des versions discrètes de l'espace incompressible \mathcal{E} (défini par (2.2)(a) dans le cas continu). Nous nommerons dans la suite les champs de ces sous espaces *champs discrets incompressibles*. Cette construction est basée sur des versions discrètes de la décomposition de Hodge donnée par le lemme 2.1 dans le cas continu.

2.3.1 Le cas triangulaire

Nous supposons que tous les T_i sont des triangles disposés de telle sorte que le domaine est périodique.

Nous noterons V_h l'espace standard d'éléments finis P^1 de Lagrange associé à ce maillage triangulaire

$$V_h := \left\{ \psi_h \in C_0(\overline{\mathbb{T}^2}), \, \psi_h \text{ périodique sur } \overline{\mathbb{T}^2} \text{ tel que } \forall T_i : \ (\psi_h)_{|T_i} \in P^1(T_i) \right\}.$$
(2.9)

Notons aussi par W_h l'espace d'éléments finis P^1 non conformes de Crouzeix-Raviart associé à ce maillage

$$\begin{split} W_h &:= & \Big\{ \phi_h \in L^2(\mathbb{T}^2), \, \phi_h \text{ périodique sur } \overline{\mathbb{T}^2} \text{ tel que } \forall T_i : \, (\phi_h)_{|T_i} \in P^1(T_i) \\ & \text{ et } \phi_h \text{ continu aux milieux des arêtes } \Big\}. \end{split}$$

Les fonctions de V_h (resp. W_h) étant P^1 sur chaque cellule, leurs rotationnels (resp. leurs gradients "brisés") sont des vecteurs constants sur chaque cellule. Définissons le sous espace suivant

$$\mathcal{E}_{h}^{\Delta} := \left\{ q := \begin{pmatrix} r \\ \mathbf{u} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3N} \text{ tel que } \exists (a, b, c, \psi_{h}) \in \mathbb{R}^{3} \times V_{h} \\
\text{tel que } \forall T_{i} : r_{i} = c \text{ et } \mathbf{u}_{i} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + (\nabla \times \psi_{h})_{|T_{i}} \right\}.$$
(2.10)

En adaptant au cas périodique le Théorème 4.1 de [6], nous pouvons prouver le lemme suivant, dans lequel l'orthogonalité est entendue par rapport au produit scalaire discret de \mathbb{R}^{3N} , pondéré par les surfaces $|T_i|$:

Lemme 2.2

$$\begin{pmatrix} \mathcal{E}_h^{\Delta} \end{pmatrix}^{\perp} = \left\{ q := \begin{pmatrix} r \\ \mathbf{u} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3N} \text{ tel que } \sum_i |T_i| r_i = 0 \quad et \\ \exists \phi_h \in W_h \text{ tel que } \forall T_i : \mathbf{u}_i = (\nabla \phi_h)_{|T_i} \right\}.$$

Autrement dit, tout $\begin{pmatrix} r \\ \mathbf{u} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3N}$ admet la décomposition orthogonale suivante

$$\begin{pmatrix} r \\ \mathbf{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{r} \\ \bar{\mathbf{u}} + \nabla \times \psi_h \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} r - \bar{r} \\ \nabla \phi_h \end{pmatrix}$$
(2.11)

avec $\bar{r} = \frac{\sum_i |T_i| r_i}{\sum_i |T_i|}, \ \bar{\mathbf{u}} = \frac{\sum_i |T_i| \mathbf{u}_i}{\sum_i |T_i|}, \ et \ (\psi_h, \phi_h) \in V_h \times W_h.$

Le sous espace \mathcal{E}_h^{Δ} est une bonne approximation de \mathcal{E} sur un maillage triangulaire : pour $q := (r := c, \mathbf{u} := (a, b)^T + \nabla \times \psi)^T \in \mathcal{E}$ donné, définissons $\psi_h^L \in V_h$, l'interpolé de Lagrange de ψ aux nœuds du maillage. Alors, la discrétisation q_h de $q \in \mathcal{E}$ donnée par

$$q_h := \begin{pmatrix} r_i \\ \mathbf{u}_i \end{pmatrix} \quad \text{où} \quad \begin{cases} r_i = c, \\ \mathbf{u}_i = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + (\nabla \times \psi_h^L)_{|T_i|} \end{cases}$$
(2.12)

définit un champ discret de \mathcal{E}_h^{Δ} qui approche $q(B_i)$ à l'ordre un en h si ψ est suffisamment régulier, B_i étant le barycentre de la cellule T_i .

2.3.2 Le cas rectangulaire

Supposons à présent que le domaine de calcul est rectangulaire et que le maillage est constitué de $N_x \times N_y$ rectangles de taille constante $\Delta x \times \Delta y$, où N_x et N_y sont les nombres de cellules dans les directions x et y. Dans ce qui suit, nous supposons que N_x et N_y sont impairs. En effet, si ce n'est pas le cas, la situation est un peu plus compliquée

en raison du découplage des mailles paires et impaires et des modes en échiquier associés. Définissons à présent le sous-espace

$$\mathcal{E}_{h}^{\Box} := \left\{ q := \begin{pmatrix} r \\ \mathbf{u} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3N_{x}N_{y}} \text{ tel que } \exists (a, b, c, (\psi_{i,j})) \in \mathbb{R}^{3} \times \mathbb{R}^{N_{x}N_{y}} \\ \text{tel que } \forall (i, j) : r_{i,j} = c \text{ et } \mathbf{u}_{i,j} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j-1}}{2\Delta y} \\ -\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i-1,j}}{2\Delta x} \end{pmatrix} \right\}.$$

$$(2.13)$$

Dans (2.13), il est entendu que $(\psi_{i,j})$ est périodique :

$$\psi_{i,0} = \psi_{i,N_y} , \ \psi_{i,N_y+1} = \psi_{i,1} \ \forall i \in [1,N_x]$$

 et

$$\psi_{0,j} = \psi_{N_x,j} , \ \psi_{N_x+1,j} = \psi_{1,j} \ \ \forall j \in [1, N_y].$$

Nous avons le lemme suivant :

Lemme 2.3

$$\mathcal{E}_{h}^{\Box} \stackrel{\perp}{=} \left\{ q := \begin{pmatrix} r \\ \mathbf{u} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3N_{x}N_{y}} \text{ tel } que \quad \sum_{(i,j)} r_{i,j} = 0 \right.$$

$$et \exists (\phi_{i,j}) \in \mathbb{R}^{N_{x}N_{y}} \text{ tel } que \mathbf{u}_{i,j} = \left(\begin{array}{c} \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta x} \\ \frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1}}{2\Delta y} \end{array} \right) \right\}.$$

$$(2.14)$$

En d'autres termes, tout $\begin{pmatrix} r \\ \mathbf{u} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3N_xN_y}$ admet la décomposition orthogonale suivante

$$\begin{pmatrix} r \\ \mathbf{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{r} \\ \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{C}\psi \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} r - \bar{r} \\ \mathbf{G}\phi \end{pmatrix}$$
(2.15)

où $\bar{r} = \frac{\sum_{(i,j)} r_{i,j}}{N_x N_y}$, $\bar{\mathbf{u}} = \frac{\sum_{(i,j)} \mathbf{u}_{i,j}}{N_x N_y}$, et où le rotationnel discret \mathbf{C} et le gradient discret \mathbf{G} sont définis par

$$(\mathbf{C}\psi)_{i,j} = \begin{pmatrix} \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j-1}}{2\Delta y} \\ -\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i-1,j}}{2\Delta x} \end{pmatrix} \quad et \quad (\mathbf{G}\phi)_{i,j} = \begin{pmatrix} \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta x} \\ \frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1}}{2\Delta y} \end{pmatrix}$$

Le sous-espace \mathcal{E}_h^{\Box} est une bonne approximation de \mathcal{E} sur un maillage rectangulaire : pour tout $q := (r := c, \mathbf{u} := (a, b)^T + \nabla \times \psi)^T \in \mathcal{E}$, définissons $\psi_{i,j} = \psi(B_{i,j})$ où $B_{i,j}$ est le barycentre de la cellule (i, j). Alors, la discrétisation q_h de $q \in \mathcal{E}$ définie par

$$q_{h} := \begin{pmatrix} r_{i,j} \\ \mathbf{u}_{i,j} \end{pmatrix} \quad \text{où} \quad \begin{cases} r_{i,j} = c, \\ \mathbf{u}_{i,j} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j-1}}{2\Delta y} \\ -\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i-1,j}}{2\Delta x} \end{pmatrix}$$
(2.16)

Mémoire d'habilitation à diriger des recherches

Pascal Omnes

32

est un champ discret appartenant à \mathcal{E}_h^{\square} qui approche $q(B_{i,j})$ à l'ordre deux en Δx et Δy .

2.4 Comportement en temps de la solution

Il est instructif de s'intéresser à une version discrète de (2.4)-(2.5).

Nous définissons la décomposition suivante de la solution discrète $q_h(t)$ du schéma semi-discret (2.6)

$$q_h(t) = q^a_{\kappa,h}(t) + q^b_{\kappa,h}(t).$$
 (2.17)

Dans (2.17), $q^a_{\kappa,h}(t)$ est solution de (2.6) avec la condition initiale

$$q^{a}_{\kappa,h}(t=0) = (\mathbb{P}q^{0})_{h}, \qquad (2.18)$$

où la discrétisation $(\mathbb{P}q^0)_h$ de $\mathbb{P}q^0 \in \mathcal{E}$ est obtenue par (2.12).

Par ailleurs, $q^b_{\kappa,h}(t)$ est solution de (2.6) avec la condition initiale

$$q^{b}_{\kappa,h}(t=0) = (q^{0} - \mathbb{P}q^{0})_{h}$$
(2.19)

où $(q^0 - \mathbb{P}q^0)_h$ est une discrétisation de la partie acoustique de q^0 .

Dans ce qui suit, nous supposons que la condition initiale continue q^0 est la somme d'un champ incompressible $\mathbb{P}q^0$ d'ordre un et d'un champ acoustique d'ordre M, ce qui implique que $||q^b_{\kappa,h}(t=0)|| = \mathcal{O}(M)$. Par stabilité du schéma de Godunov et du schéma Godunov bas Mach, nous avons $||q^b_{\kappa,h}(t\geq 0)|| = \mathcal{O}(M)$. Ceci implique que le comportement des schémas considérés sera identique (ou non) au cas continu selon le comportement de $q^a_{\kappa,h}(t)$, qui dépend quant à lui de la structure de $Ker\mathbb{L}_{\kappa,h}$.

2.4.1 Cas triangulaire

Nous avons le résultat suivant :

Lemme 2.4 Lorsque le maillage est triangulaire, nous avons

$$Ker\mathbb{L}_{\kappa=1,h} = \mathcal{E}_h^{\Delta} \tag{2.20}$$

et

$$Ker\mathbb{L}_{\kappa=0,h}\supset \mathcal{E}_{h}^{\Delta}.$$
 (2.21)

De plus, tout $q := (r, \mathbf{u})^T \in Ker \mathbb{L}_{\kappa=0,h}$ est tel que $\exists c \in \mathbb{R}$ tel que $\forall T_i : r_i = c$.

L'égalité (2.20) signifie que $Ker \mathbb{L}_{\kappa=1,h}$ est une bonne approximation de \mathcal{E} . L'inclusion stricte de (2.21) implique que $Ker \mathbb{L}_{\kappa=0,h}$ est un espace suffisamment riche pour bien approcher \mathcal{E} : nous pouvons donc également dire que $Ker \mathbb{L}_{\kappa=0,h}$ est une bonne approximation de \mathcal{E} . Finalement, soulignons que le fait que les éléments T_i sont tous des triangles est essentiel dans la preuve du lemme 2.4 qui n'est plus valide lorsque le maillage est quadrangulaire.

Le lemme ci-dessus implique que $q_{\kappa \in \{0,1\},h}^a(t \ge 0) = q_{\kappa \in \{0,1\},h}^a(t = 0) \in \mathcal{E}_h^{\Delta}$. La solution des schémas de Godunov et Godunov bas Mach sur maillage triangulaire est donc la somme d'un champ incompressible discret stationnaire et d'un champ tel que $||q_{\kappa \in \{0,1\},h}^b(t \ge 0)|| = \mathcal{O}(M)$. Ce comportement est donc exactement identique au comportement de la solution continue. Ceci signifie qu'il n'y a donc pas de mode acoustique parasite généré par ces schémas, et ceci sans condition sur h.

2.4.2 Cas cartésien

Nous avons le résultat suivant :

Lemme 2.5 Quand le maillage est cartésien, de taille $N_x \times N_y$ nous avons

$$Ker\mathbb{L}_{\kappa=1,h} = \left\{ q := \begin{pmatrix} r \\ \mathbf{u} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3N_xN_y} \text{ tels } que \ \exists (c,(u_j),(v_i)) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^{N_y} \times \mathbb{R}^{N_x} \\ \text{tels } que \ \forall (i,j) : r_{i,j} = c \ et \ \mathbf{u}_{i,j} = \begin{pmatrix} u_j \\ v_i \end{pmatrix} \right\}$$
(2.22)

ce qui implique que

$$Ker\mathbb{L}_{\kappa=1} \subsetneq \mathcal{E}_h^{\square}.$$
 (2.23)

De plus, lorsque N_x et N_y sont impairs

$$Ker\mathbb{L}_{\kappa=0,h} = \mathcal{E}_h^{\square}.$$
(2.24)

Les relations (2.22) et (2.23) montrent que le sous espaces $Ker \mathbb{L}_{\kappa=1,h}$ est un sous espace très pauvre de \mathcal{E} . En effet, le sous-espace défini par (2.22) n'approche pas correctement l'ensemble des fonctions à divergence nulle. D'autre part, (2.24) montre que $Ker \mathbb{L}_{\kappa=0,h}$ est suffisamment riche pour approcher toutes les fonctions à divergence nulle. En d'autres termes, $Ker \mathbb{L}_{\kappa=0,h}$ est une bonne approximation de \mathcal{E} .

Lorsque N_x et/ou N_y est (sont) pair(s), nous avons seulement $Ker \mathbb{L}_{\kappa=0,h} \supset \mathcal{E}_h^{\square}$. Cette différence entre $Ker \mathbb{L}_{\kappa=0,h}$ et \mathcal{E}_h^{\square} est reliée à l'existence de modes en échiquier. Bien sûr, comme ces modes appartiennent au noyau du schéma de Godunov bas Mach, ils ne sont pas amplifiés avec le temps.

A présent, nous étudions le comportement en temps de q_h dans le cas du schéma de Godunov ($\kappa = 1$) et dans le cas du schéma de Godunov bas Mach ($\kappa = 0$).

• Le cas du schéma de Godunov ($\kappa = 1$) :

Nous pouvons prouver que le mode incompressible discret $q_{\kappa=1,h}^a(t=0) \in \mathcal{E}_h^\square$ est diffusé très rapidement vers sa projection sur $Ker \mathbb{L}_{\kappa=1,h}$. D'autre part, la différence entre $q_{\kappa=1,h}^a(t=0)$ et sa projection sur $Ker \mathbb{L}_{\kappa=1,h}$ est, en général, d'ordre $\mathcal{O}(1)$ (en raison de la stricte inclusion (2.23)). Ces deux faits permettent d'expliquer que la différence $q_{\kappa=1,h}^a(t\geq 0) - q_{\kappa=1,h}^a(t=0)$ est d'ordre $\mathcal{O}(\frac{\Delta x}{L_\Omega})$ au bout d'un temps d'ordre $\mathcal{O}(\frac{ML_\Omega}{a_*})$, où L_Ω est une longueur ne dépendant que du domaine Ω et du rapport $\Delta x/\Delta y$. Au cours de ce processus de diffusion, il y a création d'une composante acoustique parasite, également de taille $\mathcal{O}(\frac{\Delta x}{L_\Omega})$ (voir l'illustration numérique de la section 2.5). Par conséquent, la contrainte sur le maillage pour maintenir l'amplitude des ondes acoustiques parasites r(t, x) d'ordre $\mathcal{O}(M)$ (et, donc, d'ordre $\mathcal{O}(M^2)$ pour la pression p(t, x)) au bout d'un temps $\mathcal{O}(M)$ doit être

$$\Delta x = \mathcal{O}(M) \tag{2.25}$$

pour le schéma de Godunov dans le cas cartésien, ce qui est trop restrictif pour des applications pratiques.

Ces résultats sont basés sur le lemme et la proposition suivants :
Lemme 2.6 Lorsque le maillage est cartésien, la projection sur l'espace $Ker \mathbb{L}_{\kappa=1,h}$, notée $\mathbb{P}_{\kappa=1,h}$, est définie par

$$(\mathbb{P}_{\kappa=1,h}q_h)_{i,j} = \begin{pmatrix} \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k,\ell} (r_h)_{k,\ell} \\ \frac{1}{N_x} \sum_k (u_h)_{k,j} \\ \frac{1}{N_y} \sum_\ell (v_h)_{i,\ell} \end{pmatrix}.$$

Proposition 2.1 Lorsque $\kappa = 1$, il existe une constante L_{Ω} , ne dépendant que de Ω et du rapport d'aspect $\Delta y/\Delta x$, telle que

$$||q_{\kappa=1,h}^{a}(t \ge 0) - \mathbb{P}_{\kappa=1,h}q_{\kappa=1,h}^{a}(t=0)|| \le ||(1 - \mathbb{P}_{\kappa=1,h})q_{\kappa=1,h}^{a}(t=0)|| \exp\left(-\frac{a_{*}\Delta x}{2ML_{\Omega}^{2}}t\right).$$
(2.26)

• Le cas du schéma de Godunov bas Mach ($\kappa = 0$) :

L'égalité (2.24) du lemme 2.5 implique que $q_{\kappa=0,h}^a(t \ge 0) = q_{\kappa=0,h}^a(t=0) \in \mathcal{E}_h^{\Box}$. La solution du schéma Godunov bas Mach sur maillage rectangulaire cartésien est donc la somme d'un champ incompressible discret stationnaire et d'un champ $q_{\kappa=0,h}^b(t\ge 0)$ tel que $||q_{\kappa=0,h}^b(t\ge 0)|| = \mathcal{O}(M)$. Ce comportement est donc exactement identique au comportement de la solution continue. Ceci signifie qu'il n'y a donc pas de mode acoustique parasite généré par ce schéma, et ceci sans condition sur le pas du maillage.

2.5 Illustration numérique

Nous considérons le domaine périodique $\mathbb{T}^2 = [0, 1] \times [0, 1]$, nous choisissons $a_* = 1$ dans (2.1) et $M = 10^{-4}$. La condition initiale $q^0 := (r^0, \mathbf{u}^0)^T$ est la suivante :

$$\begin{cases} r^{0}(t = 0, x, y) = 1, \\ u^{0}(t = 0, x, y) = 2\sin^{2}(\pi x)\sin(4\pi y), \\ v^{0}(t = 0, x, y) = -\sin(2\pi x)\sin^{2}(2\pi y). \end{cases}$$
(2.27)

Si l'on pose

$$\psi(x,y) = \frac{1}{\pi} \left[\sin^2(\pi x) \sin^2(2\pi y) - \frac{1}{4} \right],$$

on a alors

$$\mathbf{u}^0 = \nabla \times \psi.$$

Au niveau continu, on a donc $q^0 \in \mathcal{E}$ et la solution de l'équation des ondes (2.1) satisfait $q(t \ge 0, \cdot) = q^0(\cdot)$ pour la condition initiale (2.27).

Nous discrétisons cette condition initiale q^0 sur un maillage triangulaire par le champ donné par (2.12), qui appartient par construction à \mathcal{E}_h^{Δ} , et sur un maillage de rectangles



FIG. 2.1 – Composante parasite issue du schéma de Godunov sur maillage de carrés de taille $\Delta x = 1/50$ et $\Delta x = 1/100$. Figure de gauche : pression parasite $||r^{\perp}||(t/M)$. Figure de droite : vitesse parasite $||\mathbf{G}\phi||(t/M)$.

par la relation (2.16), qui appartient par construction à \mathcal{E}_h^{\Box} . Ces conditions initiales sont donc des champs discrets incompressibles.

Lorsque l'on applique le schéma de Godunov et le schéma de Godunov bas Mach à cette condition initiale sur maillage triangulaire, et le schéma de Godunov bas Mach sur maillage de rectangles, nous observons que la solution numérique se comporte comme dans le cas continu : elle demeure inchangée. Au contraire, la figure 2.1 montre que la solution numérique issue du schéma de Godunov sur maillage de rectangles dévie de sa valeur initiale et contient une composante qui se trouve dans l'espace acoustique discret $(\mathcal{E}_h^{\Box})^{\perp}$ défini par (2.14). Si nous nommons $(r^{\perp}, \mathbf{G}\phi)^T$ cette composante acoustique parasite, la figure 2.1 représente les quantités $||r^{\perp}||(t/M)$ et $||\mathbf{G}\phi||(t/M)$ $(t/M \in [0, 0.5])$. Ces deux figures montrent que

$$||q_h - \mathbb{P}_h q_h||(\tau_{ac}) = \mathcal{O}(\Delta x) \gg M$$
(2.28)

où τ_{ac} est de l'ordre de $\mathcal{O}(M)$.

Perspectives

Concernant la correction hyperbolique pour le système de Maxwell, il serait intéressant de comparer les résultats numériques obtenus par cette méthode, couplée avec une méthode particulaire pour la discrétisation de l'équation de Vlasov, avec ceux obtenus par la méthode DDFV décrite dans le chapitre 5 couplée à une discrétisation de la densité de charge et de la densité de courant qui vérifie la loi de conservation de la charge discrète, comme décrit dans [78]. En effet, cette deuxième méthode est exempte des erreurs que la première doit corriger, et ce serait donc une façon pratique de mesurer la qualité de cette correction, en particulier vis-à-vis du choix des conditions aux limites concernant les correcteurs, ainsi que vis-à-vis du choix des valeurs des paramètres χ et γ , ces valeurs étant choisies de façon empirique dans la littérature [68].

Une question pertinente qui ressort de l'étude du schéma de Godunov à bas nombre de Mach est la suivante : vers quelle solution et à quelle vitesse une condition initiale de l'équation des ondes diffuse-t-elle? Si l'on se pose cette question pour l'approximation du système de Maxwell par un schéma de Godunov du premier ordre, la réponse sera différente selon que le système considéré n'est pas corrigé (équations (1.1) et (1.2)) ou l'est (équations (1.10) à (1.13) avec $\mathcal{D} = \frac{\partial}{\partial t}$). Il est en effet à peu près évident au vu de la solution du problème de Riemann (1.25) que la solution limite du schéma de Godunov pour le système reformulé sera constituée de champs électriques et magnétiques dont toutes les composantes seront continues aux interfaces du maillage, et qui seront donc constants dans tout le domaine, au contraire des champs de la solution limite du schéma de Godunov pour le système initial, dont seules les composantes tangentielles seront continues. Il faudrait étudier si et en quoi cela constitue un problème, à la fois sur le plan théorique comme sur le plan numérique. Un remède possible serait alors d'appliquer le même type de modification de schéma que celle proposée par Stéphane Dellacherie avec le schéma Bas Mach pour l'équation des ondes : au lieu d'utiliser la solution du problème de Riemann pour calculer les flux aux interfaces, on pourrait se contenter de laisser les mêmes décentrements que dans la solution du problème de Riemann associé au schéma initial (c'est-à-dire que l'on supprimerait les sauts normaux de **B** et de **E** dans les deuxièmes et quatrièmes lignes de (1.25)). A propos de ces schémas dans lesquels on ne conserve qu'une partie des décentrements et dans lesquels on centre certains flux. une question capitale est de prouver leur stabilité sur des maillages quelconques. S'il est facile de prouver la stabilité du schéma semi-discret en espace, la stabilité du schéma complètement discrétisé (espace et temps) est plus délicate à obtenir. Enfin, une autre piste actuellement à l'étude est l'extension de l'analyse menée ici à d'autres schémas, à commencer par le schéma HLL, dont Felix Rieper a montré dans un article récent [100] qu'il se comportait encore moins bien que le schéma de Roe à bas nombre de Mach.

Deuxième partie

Construction de méthodes de volumes finis en dualité discrète sur maillages bidimensionnels quelconques

Chapitre 3

Construction et propriétés d'opérateurs différentiels discrets

3.1 Introduction et notations

Nous considérons Ω , un domaine bidimensionnel polygonal de frontière Γ , avec $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$, les frontières Γ_D et Γ_N étant disjointes. Dans le cas où Ω n'est pas simplement connexe, nous notons Q le nombre de trous et Γ_q les frontières correspondantes, ainsi que Γ_0 la frontière extérieure de Ω .

Les notations suivantes sont résumées sur les figures 3.1 et 3.2. Nous supposons que le domaine Ω est recouvert par un maillage (primal) dont les cellules sont des polygones convexes, notés dans la suite T_i , avec $i \in [1, I]$. On associe à chaque T_i un point G_i situé à l'intérieur de T_i . Ce point n'est pas nécessairement le centre de masse de T_i , mais c'est le choix que nous effectuons dans la pratique. A chaque sommet S_k du maillage, avec $k \in [1, K]$, nous associons une cellule duale P_k en joignant les points G_i associées aux cellules primales dont S_k est un sommet, et ceci en passant par les milieux des arêtes dont S_k est un sommet.

Remarque 3.1 Cette construction des cellules duales diffère légèrement de celle donnée dans [A6, A7]. Elle assure, notamment, que la cellule duale P_k est étoilée par rapport au sommet S_k , et également que lorsque $T_i \cap P_k \neq \emptyset$, le segment $[G_i S_k]$ appartient à $T_i \cap P_k$. Cela assure également que les cellules duales forment une partition de Ω , ce que nous étions obligés de supposer dans [A6, A7]. Ces points sont essentiels dans la dérivation des estimations a posteriori pour la discrétisation de l'équation de Laplace par le schéma DDFV, lorsque nous appliquons des inégalités de type Poincaré et des inégalités de trace dans la section 7.2, et d'autre part lorsque nous sommons les contributions des cellules duales pour obtenir un estimateur a posteriori global.

A chaque arête A_j du maillage primal, avec $j \in [1, J]$, nous associons une cellule diamant D_j obtenue en joignant les sommets $S_{k_1(j)}$ et $S_{k_2(j)}$ de A_j avec les points $G_{i_1(j)}$ et $G_{i_2(j)}$ associés aux cellules primales qui partagent A_j comme segment de leur frontière. Lorsque A_j est une arête située sur la frontière (nous noterons J^{Γ} le nombre de ces arêtes), la cellule diamant associée est un quadrilatère dégénéré (i.e. un triangle) et nous noterons $G_{i_2(j)}$ le milieu de A_j (ainsi, il y a J^{Γ} points G_i additionnels). Le vecteur unitaire normal à A_j est noté \mathbf{n}_j et est dirigé de $G_{i_1(j)}$ vers $G_{i_2(j)}$. Nous notons A'_{j_1} (resp. A'_{j_2}) le segment joignant $G_{i_1(j)}$ (resp. $G_{i_2(j)}$) au point milieu de A_j . Le vecteur unitaire normal associé, dirigé de $S_{k_1(j)}$ vers $S_{k_2(j)}$, est noté \mathbf{n}'_{j_1} (resp. \mathbf{n}'_{j_2}). Dans le cas d'une cellule diamant située sur la frontière, A'_{j_2} est réduit à $\{G_{i_2(j)}\}$ et ne joue aucun rôle. Finalement, pour toute cellule diamant D_j , nous noterons $M_{i_{\alpha}k_{\beta}}$ le point



FIG. 3.1 - Un maillage primal non-conforme et son maillage dual associé (à gauche) et le maillage diamant (à droite).



FIG. 3.2 – Notations pour une cellule diamant interne (à gauche) et une cellule diamant frontière (à droite).

milieu du segment $[G_{i_{\alpha}(j)}S_{k_{\beta}(j)}]$, avec $(\alpha,\beta) \in \{1;2\}^2$. Aux vecteurs $\mathbf{n}_j, \mathbf{n}'_{j1}$ et \mathbf{n}'_{j2} , nous associons des vecteurs unitaires qui leur sont orthogonaux, et que nous notons $\boldsymbol{\tau}_j, \boldsymbol{\tau}'_{j1}$ et $\boldsymbol{\tau}'_{j2}$, de telle sorte que les bases orthonormales associées soient orientées positivement. Pour toute cellule primale T_i telle que $A_j \subset \partial T_i$, nous définissons $\mathbf{n}_{ji} := \mathbf{n}_j$ si $i = i_1(j)$ et $\mathbf{n}_{ji} := -\mathbf{n}_j$ si $i = i_2(j)$, de telle sorte que \mathbf{n}_{ji} est toujours dirigé vers l'extérieur de T_i . Au vecteur \mathbf{n}_{ji} , nous associons le vecteur $\boldsymbol{\tau}_{ji}$ de telle sorte que $(\mathbf{n}_{ji}, \boldsymbol{\tau}_{ji})$ soit orientée positivement. De façon similaire, lorsque A'_{j1} et A'_{j2} appartiennent à ∂P_k , nous définissons $(\mathbf{n}'_{jk1}, \boldsymbol{\tau}'_{jk1})$ et $(\mathbf{n}'_{jk2}, \boldsymbol{\tau}'_{jk2})$ de telle sorte que \mathbf{n}'_{jk1} et \mathbf{n}'_{jk2} soient orthogonaux respectivement à A'_{j1} et A'_{j2} et dirigés vers l'extérieur de P_k . Par un léger abus de notations, nous identifierons l'indice i au point G_i ou à la cellule primale T_i , l'indice kau point S_k ou à la cellule duale P_k et l'indice j au segment A_j ou à la cellule-diamant D_j . Nous écrirons par exemple $k \in \overset{\circ}{\Gamma}_D$ (resp. $\overline{\Gamma}_D, \overset{\circ}{\Gamma}_N$ et $\overline{\Gamma}_N$) si le sommet S_k appartient à l'intérieur de Γ_N). De la même façon, nous écrirons $i \in \Gamma_D$ (resp. $i \in \Gamma_N, j \in \Gamma_D$ et $j \in \Gamma_N$) si $G_i \in \Gamma_D$ (resp. $G_i \in \Gamma_N, A_j \subset \Gamma_D$ et $A_j \subset \Gamma_N$).

Remarque 3.2 Un cas particulier de maillages que nous serons amenés à considérer est le cas des maillages primaux et duaux "mutuellement orthogonaux" (voir Figure 3.3). Cette dénomination signifie que pour tout arête j, les segments A'_{j1} et A'_{j2} (pour les cellules diamants internes) sont colinéaires et orthogonaux à A_j . Dans ce cas, on note A'_{j} la réunion de A'_{j1} et A'_{j2} et on note \mathbf{n}'_{j} le vecteur $\mathbf{n}'_{j1} = \mathbf{n}'_{j2}$. Sur ce type de maillages,



FIG. 3.3 – Cas particulier de maillage primal et dual mutuellement orthogonaux.

il découle du fait que A'_j passe par le milieu de A_j en lui étant orthogonal, que, pour toute cellule T_i , le point G_i est équidistant des sommets de la cellule T_i qui ne peut donc pas être quelconque ! La distance commune entre G_i et les sommets de T_i est notée dans la suite R_i . Le cas particulier fréquemment étudié est celui d'un maillage primal de triangles dans lesquels on choisit le centre du cercle circonscrit comme point G_i , ceci à condition que tous les angles de tous les triangles soient strictement inférieurs à $\pi/2$.

Dans les schémas que nous présentons, nous associons des inconnues scalaires aux points G_i et S_k et des champs de vecteurs bidimensionnels aux cellules diamants. Nous définissons donc des produits scalaires associés

Définition 3.1 Soit $\phi = (\phi_i^T, \phi_k^P)$ et $\psi = (\psi_i^T, \psi_k^P)$ dans $\mathbb{R}^I \times \mathbb{R}^K$. Soit $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_j)$ et $\mathbf{v} = (\mathbf{v}_j)$ dans $(\mathbb{R}^2)^J$. Nous définissons les produits scalaires suivants

$$(\phi, \psi)_{T,P} := \frac{1}{2} \left(\sum_{i \in [1,I]} |T_i| \, \phi_i^T \, \psi_i^T + \sum_{k \in [1,K]} |P_k| \, \phi_k^P \, \psi_k^P \right), \tag{3.1}$$

$$(\mathbf{u}, \mathbf{v})_D := \sum_{j \in [1, J]} |D_j| \, \mathbf{u}_j \cdot \mathbf{v}_j. \tag{3.2}$$

Nous aurons également besoin d'un produit scalaire sur la frontière

Définition 3.2 Soit $w^1 = (w_j^1)$ et $w^2 = (w_j^2)$, définis (au moins) sur la frontière Γ_D , ou sur Γ_N ou sur Γ . Nous définissons les produits scalaires frontière suivants

$$(w^{1}, w^{2})_{\Gamma_{D},h} = \sum_{j \in \Gamma_{D}} |A_{j}| w_{j}^{1} w_{j}^{2} , \qquad (w^{1}, w^{2})_{\Gamma_{N},h} = \sum_{j \in \Gamma_{N}} |A_{j}| w_{j}^{1} w_{j}^{2}, \qquad (3.3)$$
$$(w^{1}, w^{2})_{\Gamma,h} := (w^{1}, w^{2})_{\Gamma_{D},h} + (w^{1}, w^{2})_{\Gamma_{N},h}.$$

Ces produits scalaires frontière seront en particulier considérés pour les traces d'éléments $\phi = (\phi_i^T, \phi_k^P)$ que nous définissons de la façon suivante :

Mémoire d'habilitation à diriger des recherches

41

Définition 3.3 Soit $\phi = (\phi_i^T, \phi_k^P)$ dans $\mathbb{R}^{I+J^{\Gamma}} \times \mathbb{R}^K$. Pour toute arête frontière $A_j = [S_{k_1(j)}S_{k_2(j)}]$, ayant comme point milieu $G_{i_2(j)}$ (voir la Figure 3.2), nous définissons $\tilde{\phi}_j$ comme étant la trace de ϕ sur A_j par la formule

$$\tilde{\phi}_j = \frac{1}{4} \left(\phi_{k_1(j)}^P + 2\phi_{i_2(j)}^T + \phi_{k_2(j)}^P \right).$$
(3.4)

3.2 Construction des opérateurs différentiels discrets

Définition 3.4 Soit $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_j)$ dans $(\mathbb{R}^2)^J$, défini par ses valeurs sur les cellules diamants. Nous définissons sa divergence et son rotationnel (scalaire) sur les maillages primaux et duaux par

$$+\sum_{j\in\partial P_k\cap\Gamma}\frac{|A_j|}{2}\mathbf{u}_j\cdot\mathbf{n}_j\bigg),\tag{3.6}$$

$$\left(\nabla_{h}^{T} \times \mathbf{u}\right)_{i} := \frac{1}{|T_{i}|} \sum_{j \in \partial T_{i}} |A_{j}| \mathbf{u}_{j} \cdot \boldsymbol{\tau}_{ji}, \qquad (3.7)$$

$$\left(\nabla_{h}^{P} \times \mathbf{u} \right)_{k} := \frac{1}{|P_{k}|} \left(\sum_{j \in \partial P_{k}} \left(|A'_{j1}| \mathbf{u}_{j} \cdot \boldsymbol{\tau}'_{j1k} + |A'_{j2}| \mathbf{u}_{j} \cdot \boldsymbol{\tau}'_{j2k} \right) \right.$$

$$+ \sum_{j \in \partial P_{k} \cap \Gamma} \frac{|A_{j}|}{2} \mathbf{u}_{j} \cdot \boldsymbol{\tau}_{j} \right).$$

$$(3.8)$$

Notons que par application de la formule de Green continue, les quantités $(\nabla_h^T \cdot \mathbf{u})_i$ (resp. $(\nabla_h^P \cdot \mathbf{u})_k$) sont les valeurs moyennes exactes sur les cellules primales (resp. les cellules duales intérieures) de la divergence d'un champ continu $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ sous la condition suffisante que

$$|A_j|\mathbf{u}_j \cdot \mathbf{n}_j = \int_{A_j} \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n}_j(\sigma) d\sigma \quad \text{et}$$
$$\mathbf{u}_j \cdot (|A'_{j1}|\mathbf{n}'_{j1} + |A'_{j2}|\mathbf{n}'_{j2}) = \int_{A'_{j1}} \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n}'_{j1}(\sigma) d\sigma + \int_{A'_{j2}} \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n}'_{j2}(\sigma) d\sigma.$$

De même, les quantités $(\nabla_h^T \times \mathbf{u})_i$ (resp. $(\nabla_h^P \times \mathbf{u})_k$) sont les valeurs moyennes exactes sur les cellules primales (resp. les cellules duales intérieures) du rotationnel d'un champ continu $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ sous la condition suffisante que

$$|A_j|\mathbf{u}_j \cdot \boldsymbol{\tau}_j = \int_{A_j} \hat{\mathbf{u}} \cdot \boldsymbol{\tau}_j(\sigma) d\sigma \quad \text{et}$$
$$\mathbf{u}_j \cdot (|A'_{j1}|\boldsymbol{\tau}'_{j1} + |A'_{j2}|\boldsymbol{\tau}'_{j2}) = \int_{A'_{j1}} \hat{\mathbf{u}} \cdot \boldsymbol{\tau}'_{j1}(\sigma) d\sigma + \int_{A'_{j2}} \hat{\mathbf{u}} \cdot \boldsymbol{\tau}'_{j2}(\sigma) d\sigma$$

Soulignons par ailleurs que dans les formules (3.6) (resp. (3.8)), l'ensemble $\partial P_k \cap \Gamma$ est non vide si et seulement si $S_k \in \Gamma$. Dans ce cas, le terme $\sum_{j \in \partial P_k \cap \Gamma} \frac{|A_j|}{2} \mathbf{u}_j \cdot \mathbf{n}_j$ (resp. $\sum_{j \in \partial P_k \cap \Gamma} \frac{|A_j|}{2} \mathbf{u}_j \cdot \boldsymbol{\tau}_j$) est une approximation de $\int_{\tilde{A}_k} \mathbf{u} \cdot \tilde{n}_k$ (resp. $\int_{\tilde{A}_k} \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau}_k$), avec les notations de la Figure 3.4.



FIG. 3.4 – Définition de \tilde{A}_k et $\tilde{\mathbf{n}}_k$ pour les nœuds de la frontière.

Définition 3.5 Soit $\phi = (\phi_i^T, \phi_k^P)$ dans $\mathbb{R}^{I+J^{\Gamma}} \times \mathbb{R}^K$ défini par ses valeurs sur les cellules primales et duales, et aux milieux des segments de la frontière. Son gradient discret $\nabla_h^D \phi$ et son rotationnel (vecteur) $\nabla_h^D \times \phi$ sont définis par leurs valeurs sur les cellules D_j par

$$(\nabla_h^D \phi)_j := \frac{1}{2|D_j|} \left\{ \left[\phi_{k_2}^P - \phi_{k_1}^P \right] \left(|A'_{j1}| \mathbf{n}'_{j1} + |A'_{j2}| \mathbf{n}'_{j2} \right) + \left[\phi_{i_2}^T - \phi_{i_1}^T \right] |A_j| \mathbf{n}_j \right\},$$
(3.9)

$$(\nabla_h^D \times \phi)_j := -\frac{1}{2|D_j|} \left\{ \left[\phi_{k_2}^P - \phi_{k_1}^P \right] \left(|A'_{j1}| \boldsymbol{\tau}'_{j1} + |A'_{j2}| \boldsymbol{\tau}'_{j2} \right) + \left[\phi_{i_2}^T - \phi_{i_1}^T \right] |A_j| \boldsymbol{\tau}_j \right\}.$$
(3.10)

Nous rappelons que les définitions 3.5 sont exactes pour les fonctions affines : si $\hat{\phi} \in P^1(D_j)$ et si nous prenons $\phi_{i_{\alpha}(j)}^T = \hat{\phi}(G_{i_{\alpha}(j)})$ et $\phi_{k_{\beta}(j)}^P = \hat{\phi}(S_{k_{\beta}(j)})$, alors $(\nabla_h^D \phi)_j$ et $(\nabla_h^D \times \phi)_j$ sont les valeurs exactes respectivement de $\nabla \hat{\phi}$ et $\nabla \times \hat{\phi}$ sur D_j .

Définition 3.6 Soit $\phi = (\phi_i^T, \phi_k^P) \in \mathbb{R}^{I+J^{\Gamma}} \times \mathbb{R}^K$, défini par ses valeurs sur les cellules primales et duales, et aux milieux des segments de la frontière. Nous lui associons la fonction ϕ_h définie par

$$\begin{aligned} (\phi_h)_{|D_j} \in P^1(D_j) \quad , \quad \forall j \in [1, J], \\ \phi_h(M_{i_\alpha(j)\,k_\beta(j)}) &= \frac{1}{2}(\phi_{i_\alpha(j)}^T + \phi_{k_\beta(j)}^P) \quad , \quad \forall j \in [1, J], \ \forall (\alpha, \beta) \in \{1; 2\}^2. \end{aligned}$$

Remarque 3.3 Bien que la définition d'une fonction P^1 par ses valeurs en quatre points différents n'est en général pas possible, l'existence et l'unicité de la fonction ϕ_h sont assurées ici car $\phi_h(M_{i_1k_1}) + \phi_h(M_{i_2k_2}) = \phi_h(M_{i_1k_2}) + \phi_h(M_{i_2k_1})$ et, d'autre part, le quadrilatère $(M_{i_1k_1}M_{i_1k_2}M_{i_2k_2}M_{i_2k_1})$ est un parallélogramme. De plus, la fonction ϕ_h est continue uniquement aux points milieux des arêtes des cellules diamants.

Proposition 3.1 Des calculs élémentaires montrent que

$$\nabla(\phi_h)|_{D_j} = (\nabla_h^D \phi)_j, \tag{3.11}$$

$$\nabla \times (\phi_h)_{|D_i} = (\nabla_h^D \times \phi)_j. \tag{3.12}$$

Définition 3.7 Nous noterons $\nabla_h \phi_h$ la fonction de $(L^2(\Omega))^2$ dont la restriction à chaque cellule diamant D_j est égale à $\nabla(\phi_h)_{|D_j} = (\nabla_h^D \phi)_j$.



FIG. 3.5 – Notations pour une cellule duale frontière pour la formule (3.17)

3.3 Propriétés des opérateurs

3.3.1 Formules de Green discrètes

Proposition 3.2 Pour $\mathbf{u} \in (\mathbb{R}^2)^J$ et $\phi = (\phi^T, \phi^P) \in \mathbb{R}^{I+J^{\Gamma}} \times \mathbb{R}^K$, nous avons les formules de Green discrètes suivantes :

$$(\mathbf{u}, \nabla_h^D \phi)_D = -(\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{u}, \phi)_{T,P} + (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, \tilde{\phi})_{\Gamma,h}$$
(3.13)

$$(\mathbf{u}, \nabla_h^D \times \phi)_D = (\nabla_h^{T,P} \times \mathbf{u}, \phi)_{T,P} - (\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau}, \tilde{\phi})_{\Gamma,h}.$$
(3.14)

3.3.2 Composition des opérateurs

Proposition 3.3 Pour tout $\phi = (\phi_i^T, \phi_k^P) \in \mathbb{R}^{I+J^{\Gamma}} \times \mathbb{R}^K$, on a

$$\left(\nabla_h^T \cdot (\nabla_h^D \times \phi) \right)_i = 0 \quad \forall i \in [1, I] \qquad et \qquad \left(\nabla_h^P \cdot (\nabla_h^D \times \phi) \right)_k = 0 \quad \forall k \notin \Gamma, \quad (3.15)$$

$$\left(\nabla_{h}^{I} \times (\nabla_{h}^{D} \phi)\right)_{i} = 0 \quad \forall i \in [1, I] \qquad et \qquad \left(\nabla_{h}^{I} \times (\nabla_{h}^{D} \phi)\right)_{k} = 0 \quad \forall k \notin \Gamma.$$
(3.16)

De plus, pour $k \in \Gamma$, nous avons (voir la figure 3.5 pour les notations)

$$\left(\nabla_h^P \times (\nabla_h^D \phi)\right)_k = \left(\nabla_h^P \cdot (\nabla_h^D \times \phi)\right)_k = \frac{1}{|P_k|} \left[\left(\phi_{I_2}^T - \phi_{I_1}^T\right) + \frac{1}{2} \left(\phi_{K_1}^P - \phi_{K_2}^P\right) \right]. \quad (3.17)$$

Remarque 3.4 En particulier, lorsque $\phi_i^T = c_q^T$ est constant pour $i \in \Gamma_q$ et que $\phi_k^P = c_q^P$ est constant pour $k \in \Gamma_q$ (les constantes c_q^T et c_q^P pouvant être toutes différentes les unes des autres), ou lorsque $\phi_{I_1}^T = \frac{1}{2}(\phi_k^P + \phi_{K_1}^P)$ et $\phi_{I_2}^T = \frac{1}{2}(\phi_k^P + \phi_{K_2}^P)$, alors

$$\left(\nabla_h^P \times (\nabla_h^D \phi)\right)_k = \left(\nabla_h^P \cdot (\nabla_h^D \times \phi)\right)_k = 0 \text{ pour } k \in \Gamma.$$

Proposition 3.4

$$(\nabla_h^T \times \nabla_h^D \times \phi)_i = -(\nabla_h^T \cdot \nabla_h^D \phi)_i, \forall i \ et \ (\nabla_h^P \times \nabla_h^D \times \phi)_k = -(\nabla_h^P \cdot \nabla_h^D \phi)_k, \forall k.$$
(3.18)

3.3.3 Décomposition de Helmholtz-Hodge

Il est bien connu que, dans le cas continu, la décomposition de Helmholtz-Hodge des vecteurs pour des domaines non simplement connexes s'écrit (rappelons que Q est le nombre de trous du domaine Ω , Γ_q les frontières correspondantes et Γ_0 la frontière extérieure) :

$$(L^2)^2 = \nabla V \stackrel{\scriptscriptstyle \perp}{\oplus} \nabla \times W , \qquad (3.19)$$

avec $V = \{\phi \in H^1 : \int_{\Omega} \phi = 0\}$ et $W = \{\psi \in H^1 : \psi_{|_{\Gamma_0}} = 0, \quad \psi_{|_{\Gamma_q}} = c_q, \forall q \in [1, Q]\}.$ Nous pouvons prouver une propriété analogue dans le cas discret :

Théorème 3.1 Soit $(\mathbf{u}_j)_{j\in[1,J]}$ un champ de vecteurs discrets défini par ses valeurs sur les cellules diamants D_j . Il existe d'uniques valeurs $\phi = (\phi_i^T, \phi_k^P)_{i\in[1,I+J^\Gamma],k\in[1,K]}, \psi = (\psi_i^T, \psi_k^P)_{i\in[1,I+J^\Gamma],k\in[1,K]}$ et $(c_q^T, c_q^P)_{q\in[1,Q]}$ telles que :

$$\mathbf{u}_j = (\nabla_h^D \phi)_j + (\nabla_h^D \times \psi)_j, \quad \forall j \in [1, J] , \qquad (3.20)$$

$$\sum_{i \in [1,I]} |T_i| \phi_i^T = \sum_{k \in [1,K]} |P_k| \phi_k^P = 0 , \qquad (3.21)$$

$$\psi_i^T = 0 , \ \forall i \in \Gamma_0 \quad , \quad \psi_k^P = 0 , \ \forall k \in \Gamma_0 , \qquad (3.22)$$

et

$$\forall q \in [1, Q] , \quad \psi_i^T = c_q^T , \ \forall i \in \Gamma_q \quad , \quad \psi_k^P = c_q^P , \ \forall k \in \Gamma_q .$$
(3.23)

De plus, cette décomposition est orthogonale.

Le premier point dans la preuve de ce théorème est de remarquer qu'il y a autant d'équations que d'inconnues. Ceci est montré par la formule d'Euler :

Lemme 3.1 Pour un domaine non-simplement connexe recouvert par un maillage possédant I éléments, K sommets, J arêtes et Q trous, nous avons :

$$I + K = J + 1 - Q . (3.24)$$

Le second point est de montrer l'orthogonalité du gradient et du rotationnel dans (3.20) lorsque l'on effectue leur produit scalaire (3.2). Ceci est obtenu par l'application de la formule de Green discrète (3.13) et les propriétés de composition des opérateurs (3.15) et (3.17). En particulier, le fait que ψ vérifie (3.22) et (3.23) joue un rôle déterminant dans la nullité de $\nabla_h^P \cdot \nabla_h^D \times \psi$ sur les nœuds du bord (voir Remarque 3.4), et dans la nullité du terme de bord venant de la formule de Green discrète. Le dernier point est de montrer l'injectivité. En supposant \mathbf{u}_j nul sur toute cellule diamant et en prenant le produit scalaire de (3.20) avec $\nabla_h^D \phi$, on obtient par orthogonalité la nullité de ce gradient sur chaque cellule diamant. Par la formule (3.9) et par connexité du maillage, nous obtenons que toutes les valeurs ϕ_k^P aux sommets S_k du maillage sont égales entre elles d'une part, et que toutes les valeurs ϕ_i^T aux points G_i du maillage sont égales entre elles d'autre part. Mais ces deux valeurs sont nulles grâce à (3.21). Ayant obtenu la nullité de ϕ , l'égalité (3.20) permet de conclure à celle de $\nabla_h^D \times \psi$, puis à celle de ψ grâce aux conditions aux limites (3.22).

Remarque 3.5 Il est possible de prouver une autre décomposition de ce type, en imposant que ϕ vérifie les conditions aux limites (3.22) et (3.23), et que ψ vérifie la condition de moyenne nulle (3.21).

Chapitre 4

Application à la discrétisation de l'équation de diffusion linéaire et au système de l'électrostatique et de la magnétostatique

4.1 Équation de diffusion linéaire

Étant données des fonctions f, ϕ_d et g, nous nous intéressons à l'approximation du problème suivant

$$-\Delta \hat{\phi} = f \operatorname{dans} \Omega , \qquad (4.1)$$

$$\phi = \phi_d \operatorname{sur} \Gamma_D , \qquad (4.2)$$

$$\nabla \hat{\phi} \cdot \mathbf{n} = g \operatorname{sur} \Gamma_N . \tag{4.3}$$

Dans le cas où $\Gamma_D = \emptyset$, nous ajoutons l'équation suivante

$$\int_{\Omega} \hat{\phi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0 , \qquad (4.4)$$

ainsi que la relation de compatibilité

$$\int_{\Omega} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} g(\sigma) d\sigma = 0.$$
(4.5)

4.1.1 Discrétisation

Le schéma volumes finis que nous avons proposé pour cette équation est fondé sur la combinaison des opérateurs divergence et gradient que nous avons construits précédemment dans le paragraphe 3.2.

$$-(\nabla_h^T \cdot (\nabla_h^D \phi))_i = (\bar{f})_i^T \quad \forall i \in [1, I],$$

$$(4.6)$$

$$-(\nabla_h^P \cdot (\nabla_h^D \phi))_k = (\bar{f})_k^P \quad \forall k \notin \bar{\Gamma}_D,$$

$$(4.7)$$

où $(\bar{f})_i^T$ et $(\bar{f})_k^P$ sont les valeurs moyennes de f sur T_i et P_k , respectivement :

$$(\bar{f})_i^T = \frac{1}{|T_i|} \int_{T_i} f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad \text{et} \quad (\bar{f})_k^P = \frac{1}{|P_k|} \int_{P_k} f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}. \tag{4.8}$$

Les conditions aux limites de Dirichlet sont discrétisées de la façon suivante

$$\phi_k^P = \phi_d(S_k), \, \forall k \in \bar{\Gamma}_D \quad \text{et} \quad \phi_i^T = \frac{1}{2} \left(\phi_{k_1}^P + \phi_{k_2}^P \right), \, \forall i \in \Gamma_D, \tag{4.9}$$

où, dans la seconde égalité, le point $G_i \in \Gamma_D$ est le milieu du segment $[S_{k_1}S_{k_2}] \subset \Gamma_D$. Notons qu'il y a une légère modification dans la façon de discrétiser les conditions aux limites dans (4.9) par rapport à ce qui avait été proposé dans [A7]. Ceci est dû aux estimations a posteriori que nous allons présenter dans le chapitre 7, pour lesquelles nous utilisons la remarque 3.4. Les conditions aux limites de Neumann sont discrétisées par

$$(\nabla_h^D \phi)_j \cdot \mathbf{n}_j = \bar{g}_j , \ \forall j \in \Gamma_N,$$
(4.10)

où \bar{g}_j est la valeur moyenne de g sur le segment A_j correspondant

$$\bar{g}_j = \frac{1}{|A_j|} \int_{A_j} g(\sigma) \, d\sigma. \tag{4.11}$$

Dans le cas où $\Gamma_D = \emptyset$, nous ajoutons les deux équations suivantes, analogues discrètes de (4.4) :

$$\sum_{i} |T_{i}|\phi_{i}^{T} = \sum_{k} |P_{k}|\phi_{k}^{P} = 0, \qquad (4.12)$$

et nous remarquons que grâce aux définitions (4.8) et (4.11) et à la relation (4.5), nous avons les relations de compatibilité discrètes :

$$\sum_{i} |T_{i}|(\bar{f})_{i}^{T} + \sum_{j \in \Gamma} |A_{j}|\bar{g}_{j}| = \sum_{k} |P_{k}|(\bar{f})_{k}^{P} + \sum_{j \in \Gamma} |A_{j}|\bar{g}_{j}| = 0.$$
(4.13)

Remarque 4.1 Dans la pratique, il se peut que les valeurs $((\bar{f})_i^T, (\bar{f})_k^P)$ et \bar{g}_j ne vérifient pas (4.13), par exemple par ce qu'elles ont été approchées par des formules de quadrature. Les relations (4.13) sont pourtant indispensables à l'existence d'une solution lorsque $\Gamma_D = \emptyset$. En effet, il découle de la définition de la divergence discrète (formules (3.5) et (3.6)) que

$$\sum_{i} |T_{i}| (\nabla_{h} \cdot \mathbf{u})_{i}^{T} = \sum_{k} |P_{k}| (\nabla_{h} \cdot \mathbf{u})_{k}^{P} = \sum_{j \in \Gamma} |A_{j}| \mathbf{u}_{j} \cdot \mathbf{n}_{j}.$$
(4.14)

Les équations (4.6), (4.7) et (4.10) du schéma impliquent donc (4.13). Si ces relations ne sont pas vérifiées, il convient donc de modifier les valeurs de \bar{f} , par exemple en remplaçant \bar{f} par \tilde{f} défini par

$$(\tilde{f})_i^T = (\bar{f})_i^T - \frac{\sum_{i} |T_i| (\bar{f})_i^T + \sum_{j \in \Gamma} |A_j| \bar{g}_j}{|\Omega|} \quad \text{et} \quad (\tilde{f})_k^P = (\bar{f})_k^P - \frac{\sum_{k} |P_k| (\bar{f})_k^P + \sum_{j \in \Gamma} |A_j| \bar{g}_j}{|\Omega|}.$$

4.1.2 Propriétés du schéma

Le lemme suivant s'obtient en constatant que le système linéaire associé au schéma possède autant d'équations que d'inconnues, puis en prouvant l'unicité grâce à la formule (4.17) ci-dessous dans laquelle on remplace f et g par 0, et ψ_h par ϕ_h , ce qui est licite lorsque $\phi_d = 0$, puisqu'alors $\phi_k^P = 0$, $\forall k \in \overline{\Gamma}_D$ et $\phi_i^T = 0$, $\forall i \in \Gamma_D$ grâce à (4.9). Ceci permet de prouver que le gradient $\nabla \phi_h$ est nul sur chacune des cellules diamants, puis, par (3.11) et la formule du gradient (3.9), que toutes les valeurs primales sont égales entre elles, et que toutes les valeurs duales sont égales entre elles. Ces valeurs sont nulles grâce aux conditions aux limites de Dirichlet. Par ailleurs, si $\Gamma_D = \emptyset$, les relations (4.12)

viennent compenser le fait que les équations (4.6), (4.7) et (4.10) sont liées entre elles par les deux relations (4.14). Dans la preuve de l'injectivité, les relations (4.12) assurent que les constantes primales et duales auxquelles sont égales toutes les valeurs primales et duales, respectivement, sont bien nulles.

Lemme 4.1 Le schéma (4.6), (4.7), (4.9), (4.10) possède une unique solution.

La proposition qui suit montre que le schéma DDFV peut s'interpréter sous la forme d'un schéma de type éléments finis, dont les fonctions de base sont non-conformes. Ceci va jouer un rôle important dans l'obtention d'estimations d'erreur a priori et a posteriori, voir les paragraphes 6.2 et 7.1.

Proposition 4.1 Soit $\phi = (\phi_i^T, \phi_k^P)$ la solution du schéma (4.6)-(4.11). Soit $\psi = (\psi_i^T, \psi_k^P)$ tel que $\psi_k^P = 0, \forall k \in \overline{\Gamma}_D$ et $\psi_i^T = 0, \forall i \in \Gamma_D$. Soient ϕ_h et ψ_h les fonctions associées à ϕ et ψ par la définition 3.6 page 43. Soit de plus

$$\psi_h^*(\mathbf{x}) := \frac{1}{2} \left(\sum_{i \in [1,I]} \psi_i^T \theta_i^T(\mathbf{x}) + \sum_{k \in [1,K]} \psi_k^P \theta_k^P(\mathbf{x}) \right)$$
(4.15)

$$\tilde{\psi}_h(\sigma) := \sum_{j \in \Gamma} \tilde{\psi}_j \theta_j(\sigma),$$
(4.16)

où θ_i^T , θ_k^P et θ_j sont respectivement les fonctions caractéristiques des cellules T_i et P_k et de l'arête $A_j \subset \Gamma$. Alors, on a

$$\sum_{j} \int_{D_{j}} \nabla \phi_{h} \cdot \nabla \psi_{h}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} f \, \psi_{h}^{*}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma_{N}} g \, \tilde{\psi}_{h}(\sigma) \, d\sigma \,. \tag{4.17}$$

Les schémas volumes finis sont fondés sur la notion de flux aux interfaces entre les cellules. Pour le schéma DDFV appliqué à l'équation de Laplace, ces flux sont les flux diffusifs sur les interfaces entre les cellules primales d'une part et entre les cellules duales d'autre part. Ceci nous amène à définir un vecteur par cellule-diamant, associé aux flux exacts, de la façon suivante :

Définition 4.1 Soit $\hat{\phi}$ la solution exacte de (4.1)-(4.3). Sur chaque cellule-diamant D_j , nous définissons le vecteur constant $(\delta \hat{\phi})_j$ par les deux produits scalaires suivants :

$$(\delta\hat{\phi})_j \cdot \mathbf{n}_j = \frac{1}{|A_j|} \int_{A_j} \nabla\hat{\phi} \cdot \mathbf{n}_j \, d\xi \ et \tag{4.18}$$

$$(\delta\hat{\phi})_{j} \cdot (|A'_{j1}|\mathbf{n}'_{j1} + |A'_{j2}|\mathbf{n}'_{j2}) = \int_{A'_{j1}} \nabla\hat{\phi} \cdot \mathbf{n}'_{j1} + \int_{A'_{j2}} \nabla\hat{\phi} \cdot \mathbf{n}'_{j2} \, d\xi \,.$$
(4.19)

La proposition suivante est obtenue en effectuant le produit scalaire $(\cdot, \cdot)_{T,P}$ des équations du schéma (4.6) et (4.7) par un $\psi = (\psi_i^T, \psi_k^P)$ nul sur Γ_D , en remplaçant \bar{f} par sa définition (4.8), par application de la formule de Green (continue) à $f = -\Delta \hat{\phi}$ sur chaque cellule primale et duale et enfin par application de la formule de Green discrète (3.13) :

Proposition 4.2 La solution ϕ du système (4.6)-(4.11) vérifie pour tout $\psi = (\psi_i^T, \psi_k^P)$ tel que $\psi_k^P = 0$, $\forall k \in \overline{\Gamma}_D$ et $\psi_i^T = 0$, $\forall i \in \Gamma_D$,

$$(\nabla_h^D \phi, \nabla_h^D \psi)_D = (\delta \hat{\phi}, \nabla_h^D \psi)_D + \frac{1}{4} \sum_{j \in \Gamma_N} |A_j| (\nabla_h^D \psi)_j \cdot \boldsymbol{\tau}_j(dg)_j, \qquad (4.20)$$

où, pour tout segment frontière $A_j = [S_{k_1(j)}S_{k_2(j)}]$, de milieu $G_{i_2(j)}$, nous avons posé

$$(dg)_j := \int_{S_{k_1(j)}G_{i_2(j)}} g(\sigma)d\sigma - \int_{G_{i_2(j)}S_{k_2(j)}} g(\sigma)d\sigma.$$

Remarquons que dans le cas particulier de conditions aux limites homogènes, cela signifie que le gradient calculé est le gradient qui approche le mieux $\delta \hat{\phi}$ (et donc le mieux les flux numériques correspondants) dans la classe des gradients à quatre points qu'il est possible de définir à partir de valeurs quelconques de (ϕ_i^T, ϕ_k^P) .

4.1.3 Résultats numériques

Nous donnons ici des résultats numériques obtenus pour l'équation de diffusion isotrope homogène (4.1). Ces résultats illustrent le bon comportement de la méthode sur des familles de maillages particulièrement difficiles à traiter par d'autres méthodes numériques. Des résultats numériques pour l'équation de diffusion inhomogène et/ou anisotrope sont présentés dans [P4]. Nous effectuons, lorsque ces méthodes sont applicables, des comparaisons avec la méthode des éléments finis P^1 de Lagrange et avec la méthode de volumes finis "VF4" sur maillages admissibles avec flux à deux points (voir [52]). Nous ne montrons ici que des résultats qui illustrent certaines propriétés de convergence du schéma. De plus amples résultats sont donnés dans [A7]. Nous définissons deux erreurs en norme H_0^1 discrète, correspondant respectivement à l'analyse numérique "de type volumes finis", basée sur (4.20) et présentée dans le paragraphe 6.1, et d'autre part à l'analyse numérique "de type éléments finis", basée sur (4.17) et présentée dans le paragraphe 6.2 :

$$e1_{DDFV-V}^{2}(h) := \frac{\sum_{j} |D_{j}| \left| \nabla_{h}(\phi - \Pi \hat{\phi}) \right|_{j}^{2}}{\sum_{j} |D_{j}| \left| \nabla_{h}(\Pi \hat{\phi}) \right|_{j}^{2}} \quad \text{et}$$
$$e1_{DDFV-E}^{2}(h) := \frac{\sum_{j} |D_{j}| \left| (\nabla \phi_{h})_{j} - \nabla \hat{\phi}(B_{j}) \right|^{2}}{\sum_{j} |D_{j}| \left| \nabla \hat{\phi}(B_{j}) \right|^{2}}$$

où $\Pi \hat{\phi}$ est défini par

$$\forall i \in [1, I+J^{\Gamma}], \quad (\Pi \hat{\phi})_i^T = \hat{\phi}(G_i) \tag{4.21}$$

$$\forall k \in [1, K], \quad (\Pi \hat{\phi})_k^P = \hat{\phi}(S_k) \tag{4.22}$$

et où $\nabla \hat{\phi}(B_j)$ est la valeur du gradient de la solution exacte au barycentre de D_j (noté B_j). De plus, nous définissons une erreur en norme L^2 discrète par

$$e0^{2}(h) := \frac{\frac{1}{2} \left(\sum_{i} |T_{i}| (\phi_{i}^{T} - (\Pi \hat{\phi})_{i}^{T})^{2} + \sum_{k} |P_{k}| (\phi_{k}^{P} - (\Pi \hat{\phi})_{k}^{P})^{2} \right)}{\frac{1}{2} \left(\sum_{i} |T_{i}| ((\Pi \hat{\phi})_{i}^{T})^{2} + \sum_{k} |P_{k}| ((\Pi \hat{\phi})_{k}^{P})^{2} \right)}.$$

Le premier résultat concerne la convergence sur des maillages fortement non-conformes construits de la façon suivante : soit n un entier non-nul. Nous divisons Ω (le carré unité) en $(2^n + 1) \times (2^n + 1)$ sous-carrés identiques. Puis, nous raffinons ce maillage de façon non-conforme en damier : une cellule sur deux est raffinée en $2^n \times 2^n$ sous-carrés identiques. Nous choisissons $n \in [1; 5]_{\mathbb{N}}$. La Figure 4.1 représente les deux premiers de ces maillages. Bien sûr, cette famille de maillages n'est pas d'un usage pratique (ni même recommandé !), mais cela représente selon nous un bon choix pour tester la robustesse pratique de cette méthode sur des maillages fortement non conformes.



FIG. 4.1 – Maillages non conformes raffinés localement



FIG. 4.2 – Convergence dans la semi-norme H_0^1 discrète sur la famille de maillages non-conformes



FIG. 4.3 – Convergence dans la semi-norme L^2 discrète sur la famille de maillages non-conformes

La semi-norme H^1 de l'erreur, e1(h), est représentée en échelle log sur la Figure 4.2, tout comme une droite de référence de pente un. La norme L^2 discrète de l'erreur, e0(h), est représentée sur la Figure 4.3, tout comme une droite de référence de pente deux. Nous observons, sur cette famille de maillages non-conformes, une convergence d'ordre un dans la norme H_0^1 discrète et une convergence à l'ordre deux dans la norme



FIG. 4.4 – Maillages de triangles aplatis

 L^2 discrète. Ce qu'il est important de noter dans ce test, c'est que cette famille de maillage respecte le critère d'angle de l'hypothèse 6.1 page 70 (avec $\theta = \pi^*/4$), et ceci quelque soit le niveau de raffinement n. Ceci assure la convergence du schéma à l'ordre h, voir Théorème 6.1, ce qui est parfaitement illustré dans les cas-tests numériques par le fait que l'ordre de convergence ne se dégrade pas avec le raffinement.

Le second test est effectué sur des maillages de triangles de plus en plus plats, construits de la façon suivante : soit n un entier non nul. Nous divisons Ω en 4^n bandes horizontales de la même hauteur, et nous divisons chacune de ces bandes en triangles semblables (exceptés ceux situés aux extrémités) de telle sorte qu'il y ait 2^n bases de ces triangles dans la largeur d'une bande, et nous choisissons $n \in [1;6]_{\mathbb{N}}$. La figure 4.4 représente les deux premiers maillages de cette famille. Le pas du maillage est h = $1/2^n$ et le plus grand angle θ_m aux sommets des triangles est tel que tan $(\theta_m/2)$ = 2^{n-1} . Les erreurs numérique en norme H_0^1 et L^2 discrètes sont présentées en échelle logarithmique respectivement sur les Figures 4.5 et 4.6. Sur la Figure 4.5, nous avons aussi tracé la courbe $h/\sin\theta_m$ (nommée "P1 theor") qui correspond à la borne supérieure (à une constante multiplicative près) des estimations d'erreur obtenues dans [75] pour la méthode des éléments finis de Lagrange P^1 . Cette courbe reproduit le comportement de l'erreur observée lorsque l'on résout ce problème par cette méthode (courbe "P1") : ces deux courbes sont quasiment parallèles. Nous avons aussi tracé une droite de pente 0.5, à laquelle $e1_{DDFV-V}$ est parallèle, et une droite de pente 1.5 à laquelle $e1_{DDFV-E}$ est parallèle. Enfin, nous avons aussi tracé la courbe "VF4" qui correspond aux erreurs observées lorsque l'on applique l'extension à des maillages triangulaires ne satisfaisant pas la condition de Delaunay du schéma proposé dans [52] (extension proposée dans [14]). Pour ce type de maillages, les cellules diamants sont de plusieurs sortes, selon qu'elles sont associées à des arêtes internes (voir Figure 4.7), ou qu'elles ont un sommet sur la frontière (Figure 4.8). Sur la Figure 4.7, la cellule associée à l'arête horizontale possède des diagonales orthogonales entre elles, $(\mathbf{n}_j \cdot \mathbf{n}'_j = 0)$; elle vérifie donc les hypothèses géométriques énoncées plus bas pour la convergence, hypothèses 6.1 et 6.2 page 70. En ce qui concerne la cellule-diamant associée au côté oblique, le découpage en $(D_{j,1}, D_{j,2})$ donne un angle maximum $\tau_1 = \tau_2$ qui tend vers $\frac{\pi}{2}$, ce qui implique que cette cellule vérifie l'hypothèse 6.2 bien que l'angle entre ses diagonales tende vers 0. Sur la Figure 4.8, les cellules associées aux arêtes horizontales et verticales vérifient également l'hypothèse 6.2. En revanche, la cellule-diamant associée au côté oblique est telle que sin $\tau_1 \sim 3/2^n$ et $\sin \tau_2 \sim 5/2^n$. Ces deux angles tendent donc vers π lorsque n croît, et cette cellulediamant ne vérifie donc pas l'hypothèse 6.2, mais nous avons tout de même $h/\sin \tau_2 \leq C$, avec une constante C qui ne dépend pas du maillage. Comme l'union de ces cellules est

Chapitre 4. Application à la discrétisation de l'équation de diffusion linéaire et au système de l'électrostatique et de la magnétostatique



FIG. 4.5 – Convergence en norme H_0^1 discrète sur la famille de maillages triangulaires dégénérés



FIG. 4.6 – Convergence en norme L^2 discrète sur la famille de maillages triangulaires dégénérés

de taille Ch, il est possible de montrer que l'erreur en norme H_0^1 discrète $e1_{DDFV-V}$ est d'ordre 0.5, ce qui correspond à l'observation de la Figure 4.5. En revanche, l'ordre 1.5 pour $e1_{DDFV-E}$, obtenu en raison des cellules diamants qui sont presque toutes des parallélogrammes (voir les résultats de superconvergence dans la section 6.4) montrent que l'hypothèse 6.2 n'est pas une condition nécessaire de convergence de cette norme discrète. En ce qui concerne le schéma VF4, nous remarquons sa non-convergence. Ceci peut être expliqué par le fait que, lorsque l'on passe d'un niveau de raffinement n au niveau n + 1, la distance $|A'_j|$ entre les centres des cercles circonscrits de deux triangles voisins reste approximativement constante, en raison de la dégénérescence des mailles. De la sorte, la différence finie $\frac{\phi_{i_1(j)}-\phi_{i_2(j)}}{|A'_j|}$ ne converge jamais vers $\nabla \hat{\phi} \cdot \mathbf{n}$. Nous observons sur la Figure 4.6 une convergence à l'ordre deux de la méthode proposée en norme L^2 discrète.

Chapitre 4. Application à la discrétisation de l'équation de diffusion linéaire et au système de l'électrostatique et de la magnétostatique



FIG. 4.7 – Cellules-diamants intérieures associées aux maillages dégénérés



FIG. 4.8 – Cellules-diamants proches du bord, associées aux maillages dégénérés

4.2 Système de l'électrostatique et de la magnétostatique (problème "div-rot")

Nous nous intéressons à l'approximation du problème continu suivant : étant donnés f, r, g, et $(k_q)_{q \in [1,Q]} \in \mathbb{R}^Q$, trouver $\hat{\mathbf{u}}$ tel que

$$\begin{cases} \nabla \cdot \hat{\mathbf{u}} = f \text{ dans } \Omega, \\ \nabla \times \hat{\mathbf{u}} = r \text{ dans } \Omega, \\ \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n} = g \text{ sur } \Gamma, \\ \int_{\Gamma_q} \hat{\mathbf{u}} \cdot \boldsymbol{\tau} = k_q, \quad \forall q \in [1, Q]. \end{cases}$$
(4.23)

Une condition nécessaire pour l'existence d'une solution à (4.23) est donnée par la formule :

$$\int_{\Omega} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\Gamma} g(\xi) \ d\xi \ . \tag{4.24}$$

4.2.1 Discrétisation

Nous choisissons de discrétiser la solution de ce problème par un champ de vecteur discret $(\mathbf{u}_j)_{j \in [1,J]}$ défini par ses valeurs sur les cellules-diamants du maillage. En utilisant les opérateurs différentiels définis dans la section 3.2, et en suivant [66], nous écrivons

les équations discrètes suivantes :

$$\left(\nabla_h^T \cdot \mathbf{u} \right)_i = (\bar{f})_i^T, \quad \forall i \in [1, I] ,$$

$$(4.25)$$

$$\left[\nabla_{h}^{r} \cdot \mathbf{u} \right]_{k} = (f)_{k}^{r}, \quad \forall k \in [1, K],$$

$$(4.26)$$

$$(\nabla_{\bar{h}}^{P} \cdot \mathbf{u})_{i} = (\bar{f})_{i}^{P}, \quad \forall i \in [1, I],$$

$$(\overline{\nabla}_{h}^{P} \cdot \mathbf{u})_{k} = (\bar{f})_{k}^{P}, \quad \forall k \in [1, K],$$

$$(\overline{\nabla}_{h}^{T} \times \mathbf{u})_{i} = (\bar{r})_{i}^{T}, \quad \forall i \in [1, I],$$

$$(\overline{\nabla}_{h}^{P} \times \mathbf{u})_{i} = (\bar{r})_{i}^{P}, \quad \forall k \notin \Gamma,$$

$$(4.25)$$

$$(4.26)$$

$$(4.27)$$

$$\left(\nabla_{h}^{P} \times \mathbf{u}\right)_{k} = (\bar{r})_{k}^{P}, \quad \forall k \notin \Gamma , \qquad (4.28)$$

$$\mathbf{u}_j \cdot \mathbf{n}_j = \bar{g}_j, \quad \forall j \in \Gamma , \qquad (4.29)$$

$$(\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau}, 1)_{\Gamma_q, h} = k_q, \quad \forall q \in [1, Q] , \qquad (4.30)$$

$$\sum_{k\in\Gamma_q} |P_k| \ (\nabla_h^P \times \mathbf{u})_k = \sum_{k\in\Gamma_q} |P_k| \ (\bar{r})_k^P, \quad \forall q \in [1, Q] , \qquad (4.31)$$

où nous avons utilisé les définitions (4.8), (4.11) et

$$(\bar{r})_i^T = \frac{1}{|T_i|} \int_{T_i} r(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad \forall i \in [1, I] \quad , \quad (\bar{r})_k^P = \frac{1}{|P_k|} \int_{P_k} r(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad \forall k \in [1, K] 4.32)$$

4.2.2Schémas équivalents pour les potentiels

Nous utilisons la décomposition de Hodge discrète de $(\mathbf{u}_i)_{i \in [1,J]}$ (Théorème 3.1 page 45), les propriétés des opérateurs (3.15), (3.16) et (3.18) et la remarque 3.4 page 44, pour montrer que le problème (4.25)-(4.31) peut être décomposé en deux sous problèmes indépendants pour les potentiels

Proposition 4.3 Le problème (4.25)-(4.31) se scinde en deux sous-problèmes : Trouver $(\phi_i^T, \phi_k^P)_{i \in [1, I+J^{\Gamma}], k \in [1, K]}$ tel que

$$(\nabla_h^T \cdot \nabla_h^D \phi)_i = (\bar{f})_i^T, \quad \forall i \in [1, I] , \qquad (4.33)$$

$$(\nabla_h^P \cdot \nabla_h^D \phi)_k = (\bar{f})_k^P, \quad \forall k \in [1, K],$$

$$(4.34)$$

$$(\nabla_h^D \phi)_j \cdot \mathbf{n}_j = \bar{g}_j, \quad \forall j \in \Gamma , \qquad (4.35)$$

$$\sum_{i \in [1,I]} |T_i| \phi_i^T = \sum_{k \in [1,K]} |P_k| \phi_k^P = 0, \qquad (4.36)$$

et trouver $(\psi_i^T, \psi_k^P)_{i \in [1, I+J^{\Gamma}], k \in [1, K]}$ et $(c_q^T, c_q^P)_{q \in [1, Q]}$ tels que

$$-(\nabla_h^T \cdot \nabla_h^D \psi)_i = (\bar{r})_i^T, \quad \forall i \in [1, I] , \qquad (4.37)$$

$$-(\nabla_h^F \cdot \nabla_h^D \psi)_k = (\bar{r})_k^F, \quad \forall k \notin \Gamma , \qquad (4.38)$$

$$(\nabla_h^D \psi \cdot \mathbf{n}, 1)_{\Gamma_q, h} = -k_q, \quad \forall q \in [1, Q] , \qquad (4.39)$$

$$-\sum_{k\in\Gamma_q} |P_k| \ (\nabla_h^P \cdot \nabla_h^D \psi)_k = \sum_{k\in\Gamma_q} |P_k| \ (\bar{r})_k^P, \quad \forall q \in [1,Q],$$
(4.40)

$$\psi_i^T = \psi_k^P = 0, \quad \forall i \in \Gamma_0 , \ \forall k \in \Gamma_0 , \qquad (4.41)$$

$$\forall q \in [1, Q] , \quad \psi_i^T = c_q^T , \quad \forall i \in \Gamma_q , \qquad (4.42)$$

$$\forall q \in [1,Q] , \quad \psi_k^P = c_q^P , \quad \forall k \in \Gamma_q .$$

$$(4.43)$$

Le vecteur **u** est alors reconstruit par

$$\mathbf{u}_j = (\nabla_h^D \phi)_j + (\nabla_h^D \times \psi)_j , \ \forall j \in [1, J] .$$
(4.44)

4.2.3 Existence et unicité

Lemme 4.2 Les problèmes (4.33)-(4.36) d'une part et (4.37)-(4.43) d'autre part ont chacun une solution unique.

Pour ce qui est de (4.33)-(4.36), la preuve en est donnée par le lemme 4.1 sous la condition (voir la remarque 4.1 à ce sujet) :

$$\sum_{i} |T_{i}|(\bar{f})_{i}^{T} = \sum_{k} |P_{k}|(\bar{f})_{k}^{P} = \sum_{j \in \Gamma} |A_{j}|\bar{g}_{j}.$$

Pour ce qui est de (4.37)–(4.43), nous constatons tout d'abord que ce système compte $I + K + J^{\Gamma} + 2Q$ équations et autant d'inconnues. Nous définissons ensuite l'espace suivant, dans lequel la solution ψ est cherchée :

Définition 4.2

$$V_D := \left\{ (\psi_i^T, \psi_k^P) \in \mathbb{R}^{I+J^{\Gamma}} \times \mathbb{R}^K / \psi_i^T = \psi_k^P = 0 \ \forall \, i \in \Gamma_0 \ \forall \, k \in \Gamma_0 \ \text{et} \right.$$

$$\exists \, (c_{q,\psi}^T, c_{q,\psi}^P) \in (\mathbb{R}^2)^Q \ \text{t.q.} \ \psi_i^T = c_{q,\psi}^T \ \forall \, i \in \Gamma_q, \ \text{et} \ \psi_k^P = c_{q,\psi}^P \ \forall \, k \in \Gamma_q \ \forall \, q \in [1,Q] \right\} \,.$$

Nous avons la proposition suivante :

Proposition 4.4 La fonction ψ_h associée à la solution $(\psi_i^T, \psi_k^P) \in V_D$ des équations (4.37)-(4.43) vérifie la formulation variationnelle équivalente : trouver ψ_h associée à un élément (ψ_i^T, ψ_k^P) de V_D , telle que pour toute fonction Ψ_h associée à un élément quelconque (Ψ_i^T, Ψ_k^P) de V_D , on ait

$$\sum_{j} \int_{D_{j}} \nabla \psi_{h} \cdot \nabla \Psi_{h} d\mathbf{x} = \int_{\Omega} r \Psi_{h}^{*}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \sum_{q \in [1,Q]} k_{q} \left(\frac{c_{q,\Psi}^{T} + c_{q,\Psi}^{P}}{2} \right) .$$
(4.45)

Lorsque les données r et $(k_q)_{q \in [1,Q]}$ sont nulles, prendre $\Psi = \psi$ dans cette formulation assure la nullité de $\nabla \psi_h$, puis de ψ lui-même grâce aux conditions aux limites (4.41) sur Γ_0 , et enfin celle des c_q par les conditions aux limites sur Γ_q , données par (4.42) et (4.43).

4.2.4 Conditions limites sur la composante tangentielle du champ

Nous nous intéressons au problème : soient f, r, g et $(k_q)_{q \in [1,Q]} \in \mathbb{R}^Q$ donnés, trouver **û** tel que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \hat{\mathbf{u}} = f \;\; \mathrm{dans} \;\; \Omega \;, \\ \nabla \times \hat{\mathbf{u}} = r \;\; \mathrm{dans} \;\; \Omega \;, \\ \hat{\mathbf{u}} \cdot \boldsymbol{\tau} = g \;\; \mathrm{sur} \;\; \Gamma \;, \\ \int_{\Gamma_q} \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n} = k_q, \;\; \forall q \in [1, Q] \end{array} \right.$$

avec la condition : $\int_{\Omega} r(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\Gamma} g(\xi) d\xi$. Nous écrivons les équations discrètes :

$$\begin{pmatrix}
\left(\nabla_{h}^{T} \cdot \mathbf{u}\right)_{i} = (\bar{f})_{i}^{T}, & \forall i \in [1, I], \\
\left(\nabla_{h}^{T} \cdot \mathbf{u}\right)_{k} = (\bar{f})_{k}^{P}, & \forall k \notin \Gamma, \\
\left(\nabla_{h}^{T} \times \mathbf{u}\right)_{i} = (\bar{r})_{k}^{T}, & \forall i \in [1, I], \\
\left(\nabla_{h}^{P} \times \mathbf{u}\right)_{k} = (\bar{r})_{k}^{P}, & \forall k \in [1, K], \\
\mathbf{u}_{j} \cdot \boldsymbol{\tau}_{j} = g_{j}, & \forall j \in \Gamma, \\
\left(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, 1\right)_{\Gamma_{q}, h} = k_{q}, & \forall q \in [1, Q], \\
\sum_{k \in \Gamma_{q}} |P_{k}| & \left(\nabla_{h}^{P} \cdot \mathbf{u}\right)_{k} = \sum_{k \in \Gamma_{q}} |P_{k}| f_{k}^{P}, & \forall q \in [1, Q].
\end{cases}$$

$$(4.46)$$

Chapitre 4. Application à la discrétisation de l'équation de diffusion linéaire et au système de l'électrostatique et de la magnétostatique



FIG. 4.9 – Maillages uniformes d'un domaine non-convexe et erreurs associées

L'existence et l'unicité pour (4.46) sont prouvées de la même façon que pour (4.25)–(4.31), la principale différence étant que l'on utilise la décomposition de Hodge mentionnée dans la remarque 3.5, qui nous permet en outre de prouver que ce problème se découple en deux sous-problèmes

Proposition 4.5 Le Problème (4.46) est équivalent aux deux sous-problèmes : Trouver $(\phi_i^T, \phi_k^P)_{i \in [1, I+J^{\Gamma}], k \in [1, K]}$ tel que

$$\begin{array}{rcl} -(\nabla_h^T \cdot \nabla_h^D \phi)_i &=& (\bar{r})_i^T, \quad \forall i \in [1, I] \;, \\ -(\nabla_h^P \cdot \nabla_h^D \phi)_k &=& (\bar{r})_k^P, \quad \forall k \in [1, K] \;, \\ -(\nabla_h^D \phi)_j \cdot \mathbf{n}_j &=& \bar{g}_j, \quad \forall j \in [J - J^{\Gamma} + 1, J] \;, \\ \sum_{i \in [1, I]} |T_i| \phi_i^T &=& \sum_{k \in [1, K]} |P_k| \phi_k^P = 0 \end{array}$$

et trouver $(\psi_i^T, \psi_k^P)_{i \in [1, I+J^{\Gamma}], k \in [1, K]}$ et $(c_q^T, c_q^P)_{q \in [1, Q]} \in \mathbb{R}^Q$ tels que

$$\left\{ \begin{array}{rcl} (\nabla_h^T \cdot \nabla_h^D \psi)_i &=& (\bar{f})_i^T, \quad \forall i \in [1, I] \;, \\ (\nabla_h^P \cdot \nabla_h^D \psi)_k &=& (\bar{f})_k^P, \quad \forall k \in [1, K - J^\Gamma] \;, \\ (\nabla_h^D \psi \cdot \mathbf{n}, 1)_{\Gamma_q} &=& k_q, \quad \forall q \in [1, Q] \;, \\ \sum_{k \in \Gamma_q} |P_k| \; (\nabla_h^P \cdot \nabla_h^D \psi)_k &=& \sum_{k \in \Gamma_q} |P_k| \; (\bar{f})_k^P, \quad \forall q \in [1, Q] \;, \\ \psi_i^T = \psi_k^P &=& 0, \quad \forall i \in \Gamma_0 \;, \; \forall k \in \Gamma_0 \;, \\ \forall q \in [1, Q] \;, \; \psi_i^T &=& c_q^T \;, \; \forall i \in \Gamma_q \;, \\ \forall q \in [1, Q] \;, \; \psi_k^P &=& c_q^P \;, \; \forall k \in \Gamma_q \;. \end{array} \right.$$

Le vecteur \mathbf{u} est alors reconstruit par

$$\mathbf{u}_j = (\nabla_h^D \psi)_j + (\nabla_h^D \times \phi)_j \forall j \in [1, J] .$$

4.2.5 Résultats numériques

Puisque le problème "div-rot" se découple en deux résolutions de Laplacien, les résultats numériques obtenus sont tout à fait comparables à ceux obtenus dans le paragraphe 4.1.3. Le seul test complémentaire que nous souhaitons présenter est un cas pour lequel l'un des potentiels exacts ϕ ou ψ associé à la solution exacte n'est pas dans $H^2(\Omega)$, afin d'étudier l'influence de la perte de régularité sur la convergence de la méthode DDFV lorsque le maillage est raffiné. En effet, sous l'hypothèse que les potentiels exacts sont dans $H^2(\Omega)$, nous verrons dans le chapitre 6 que nous pouvons prouver la convergence de **u** à l'ordre un vers $\hat{\mathbf{u}}$. Toutefois, lorsque le domaine de calcul présente des coins rentrants, il est bien connu que la solution exacte $\hat{\mathbf{u}}$ n'est plus dans $H^1(\Omega)$, mais dans $H^s(\Omega)$, avec un exposant s < 1 dépendant des angles des coins rentrants. Nous considérons donc le domaine $\Omega =]-1/2; 1/2[^2 \setminus]0; 1/2[^2$ et les données et conditions aux limites sont choisies

de telle sorte que la solution analytique $\hat{\mathbf{u}}$, exprimée en coordonnées polaires centrées sur (0,0), est donnée par

$$\hat{\mathbf{u}}(r,\theta) = \nabla(r^{2/3}\cos(\frac{2}{3}\theta)) \;,$$

c'est-à-dire que $\hat{\phi}(r,\theta) = r^{2/3} \cos(\frac{2}{3}\theta)$ et $\hat{\psi} = 0$. Nous avons alors $\hat{\phi}$ qui n'est donc plus dans $H^2(\Omega)$ mais dans $H^{1+s}(\Omega)$ avec s < 2/3. Nous résolvons numériquement le problème "div-rot" sur une famille de cinq maillages raffinés de façon régulière; les deux premiers de ces maillages sont représentés à gauche et au centre de la Figure 4.9, alors que la courbe d'erreur (entre $\hat{\mathbf{u}}$ et $(\mathbf{u}_j)_j$) en norme L^2 discrète correspondante est représentée sur la droite de cette même Figure, avec une droite de référence de pente 2/3. L'ordre de convergence semble donc être de 2/3 dans ce cas, comme celui obtenu dans [18]. Nous verrons dans le chapitre 7 une technique d'analyse *a posteriori* permettant de raffiner de façon efficace autour de la singularité géométrique et de retrouver ainsi l'ordre de convergence optimal du schéma vis-à-vis du nombre d'inconnues.

Chapitre 5

Application à la discrétisation des équations de Maxwell

Nous résumons ici l'article [A5]. Les équations de Maxwell ont déjà été présentées dans le chapitre 1. Elles décrivent les variations spatio-temporelles d'un champ électrique (E_x, E_y, E_z) , d'un courant de déplacement (D_x, D_y, D_z) , d'un champ magnétique (H_x, H_y, H_z) et d'une induction magnétique (B_x, B_y, B_z) sous l'action d'une densité de courant électrique (j_x, j_y, j_z) , de lois constitutives $\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}$ et $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$, et des conditions aux limites lorsque le domaine considéré possède une frontière. Il est bien connu qu'en deux dimensions d'espace, c'est-à-dire lorsque l'on suppose l'invariance par rapport à l'une des coordonnées, par exemple ici la coordonnée z, le système de Maxwell se découple en deux sous-systèmes indépendants, dits "Transverse Électrique" (mode TE) liant $\mathbf{E} := (E_x, E_y)$, $\mathbf{D} := (D_x, D_y)$, $H := H_z$, $B := B_z$ et $\mathbf{j} := (j_x, j_y)$, d'une part, et "Transverse Magnétique" (mode TM), liant E_z , D_z , $\mathbf{H} := (H_x, H_y)$, $\mathbf{B} := (B_x, B_y)$ et j_z d'autre part. Nous considérons les équations suivantes, correspondant au mode TE (le mode TM peut être traité numériquement de façon analogue) :

$$\frac{\partial B}{\partial t} + \nabla \times \mathbf{E} = 0 , \qquad (5.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} - \nabla \times H = -\mathbf{j} , \qquad (5.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \,. \tag{5.3}$$

Pour simplifier la présentation, nous nous plaçons dans le cas où les coefficients ε et μ sont constants en espace et en temps et nous posons $c^2 = (\varepsilon \mu)^{-1}$. Le cas de coefficients variables (en particulier, le cas de coefficients discontinus) a été traité dans [A5] et nous présenterons ici un test numérique avec coefficients discontinus. Les conditions aux limites que nous considérons sont de deux types :

$$B = b_d \text{ sur } \Gamma_D \text{ et}$$
(5.4)

$$\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\tau} - \alpha B = u_d \quad \text{sur } \Gamma_N, \tag{5.5}$$

avec $\alpha \geq 0$. Notons que dans le cas $\alpha = 0$ et $u_d = 0$, nous retrouvons les conditions de conducteur parfait, et dans le cas $\alpha = c$ et $u_d = 0$, nous retrouvons les conditions de Silver-Müller. Si $b_d = 0$ sur Γ_D , nous avons une condition dite de mur magnétique.

5.1 Écriture du schéma

Les équations (5.1)–(5.2) sont approchées en utilisant les opérateurs différentiels discrets de la partie 3.2, et un schéma saute-mouton en temps : à partir des valeurs de

 $B^n = ((B_i^T)^n, (B_k^P)^n)$, des valeurs de $\mathbf{E}^{n-1/2} = (\mathbf{E}_j^{n-1/2})$ et de valeurs \mathbf{j}_j^n approchant \mathbf{j} sur les cellules diamants au pas de temps n, nous calculons les valeurs des champs au pas de temps suivant par les formules

$$\mathbf{E}_{j}^{n+1/2} = \mathbf{E}_{j}^{n-1/2} + c^{2} \Delta t \, (\nabla_{h}^{D} \times B^{n})_{j} - \frac{\Delta t}{\varepsilon} \mathbf{j}_{j}^{n} , \, \forall j , \qquad (5.6)$$

$$(B_i^T)^{n+1} = (B_i^T)^n - \Delta t \, (\nabla_h^T \times \mathbf{E}^{n+1/2})_i \,, \, \forall i \,,$$
(5.7)

$$(B_k^P)^{n+1} = (B_k^P)^n - \Delta t \, (\nabla_h^P \times \mathbf{E}^{n+1/2})_k , \, \forall k \notin \Gamma_D \,.$$
(5.8)

Considérons le rôle joué par les conditions aux limites. La discrétisation de (5.4) est donnée simplement par

$$(B_k^P)^{n+1} = b_d(S_k, t^{n+1}), \,\forall S_k \in \bar{\Gamma}_D, \, (B_i^T)^{n+1} = \frac{1}{2} [(B_{k_1}^P)^{n+1} + (B_{k_2}^P)^{n+1}], \,\forall G_i \in \Gamma_D,$$
(5.9)

où, dans la seconde égalité, le point $G_i \in \Gamma_D$ est le milieu du segment $[S_{k_1}S_{k_2}] \subset \Gamma_D$, et il est alors normal que les égalités (5.8) ne soient écrites que pour les cellules duales qui ne sont pas sur cette frontière. Quant à la valeur de $(B_i^T)^{n+1}$, lorsque $G_i \in \Gamma_N$ est le milieu de l'arête frontière $A_{j(i)}$, nous la choisissons de telle sorte que l'équation

$$\frac{1}{2} (\mathbf{E}_{j(i)}^{n+3/2} + \mathbf{E}_{j(i)}^{n+1/2}) \cdot \boldsymbol{\tau} - \alpha \tilde{B}_{j(i)}^{n+1} = u_d(G_i, t^{n+1}),$$
(5.10)

soit vérifiée (rappelons que la trace $\tilde{B}_{j(i)}$ de *B* est définie par (3.4) page 42), ce qui, compte tenu de (5.6) écrit au temps n + 3/2, revient à écrire

$$c^{2}\frac{\Delta t}{2}\left(\nabla_{h}^{D}\times B^{n+1}\right)_{j(i)}\cdot\boldsymbol{\tau}_{j}-\alpha\tilde{B}_{j(i)}^{n+1}=u_{d}(G_{i},t^{n+1})-\mathbf{E}_{j(i)}^{n+1/2}\cdot\boldsymbol{\tau}_{j}+\frac{\Delta t}{2\varepsilon}\mathbf{j}_{j}^{n+1}\cdot\boldsymbol{\tau}_{j}.$$
(5.11)

Il est aisé de vérifier que dans (5.11), la seule inconnue est bien $(B_i^T)^{n+1}$, puisque les valeurs dans le membre de droite sont données, en ce qui concerne u_d et **j**, ou viennent d'être calculées par (5.6) pour ce qui concerne $\mathbf{E}_{j(i)}^{n+1/2}$, et que les autres valeurs de B^{n+1} qui interviennent dans les définitions de $(\nabla_h^D \times B^{n+1})_{j(i)}$ et de $\tilde{B}_{j(i)}^{n+1}$ viennent elles aussi d'être calculées, par (5.7), (5.8) et (5.9). Par ailleurs, compte tenu de l'expression du rotationnel discret (3.10) page 43 et du fait que $i = i_2(j(i))$ pour $i \in \Gamma$, le coefficient multiplicatif de $(B_i^T)^{n+1}$ dans l'équation (5.11) est strictement négatif lorsque $\alpha \ge 0$, ce qui assure que cette équation est bien posée.

5.2 Propriétés du schéma

Nous énonçons les principales propriétés de cette discrétisation :

Proposition 5.1 Dans le cas où les maillages sont mutuellement orthogonaux, (voir Remarque 3.2), le schéma (5.6)-(5.11) se découple en deux sous-schémas de type covolume indépendants. Dans le cas de maillages cartésiens, nous obtenons deux schémas de Yee, l'un sur le maillage primal, et l'autre sur le maillage dual.

Proposition 5.2 Si les conditions initiales (n = 0) vérifient les lois de Gauss discrètes

$$\varepsilon \left(\nabla_h^T \cdot \mathbf{E}^{n+1/2} \right)_i = (\rho_i^T)^{n+1/2}, \, \forall i \,, \tag{5.12}$$

$$\varepsilon \left(\nabla_h^P \cdot \mathbf{E}^{n+1/2} \right)_k = (\rho_k^P)^{n+1/2} , \, \forall k \notin \bar{\Gamma}_D , \qquad (5.13)$$

où $((\rho_i^T)^{n+1/2}, (\rho_k^P)^{n+1/2}))$ sont des approximations adéquates de ρ sur les mailles primales et duales à l'instant $t^{n+1/2}$, et si les densités de charge et de courant vérifient les équations de conservation de la charge discrètes suivantes

$$(\rho_i^T)^{n+1/2} = (\rho_i^T)^{n-1/2} - \Delta t (\nabla_h^T \cdot \mathbf{j}^n)_i , \ \forall i , \qquad (5.14)$$

$$(\rho_k^P)^{n+1/2} = (\rho_k^P)^{n-1/2} - \Delta t (\nabla_h^P \cdot \mathbf{j}^n)_k , \ \forall k \notin \bar{\Gamma}_D , \qquad (5.15)$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$, alors le schéma préserve les lois de Gauss discrètes (5.12) et (5.13) pour tout $n \in \mathbb{N}$.

Proposition 5.3 Soient $\rho(\mathbf{x}, t)$ et $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ des fonctions données vérifiant la loi de conservation de la charge continue. Définissons

$$(\rho_i^T)^{n+1/2} = \frac{1}{|T_i|} \int_{T_i} \rho(\mathbf{x}, t^{n+1/2}) \, d\mathbf{x} \quad , \qquad (\rho_k^P)^{n+1/2} = \frac{1}{|P_k|} \int_{P_k} \rho(\mathbf{x}, t^{n+1/2}) \, d\mathbf{x} \; .$$
(5.16)

$$\mathbf{j}_{j}^{n} \cdot \mathbf{n}_{j} = \frac{1}{\Delta t} \frac{1}{|A_{j}|} \int_{t^{n-1/2}}^{t^{n+1/2}} \int_{A_{j}} \mathbf{j}(\sigma, t) \cdot \mathbf{n}_{j} \, d\sigma \, dt \qquad (5.17)$$

$$\mathbf{j}_{j}^{n} \cdot (|A'_{j1}|\mathbf{n}'_{j1} + |A'_{j2}|\mathbf{n}'_{j2}) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^{n-1/2}}^{t^{n+1/2}} \left[\int_{A'_{j1}} \mathbf{j}(\sigma, t) \cdot \mathbf{n}'_{j1} \, d\sigma + \int_{A'_{j2}} \mathbf{j}(\sigma, t) \cdot \mathbf{n}'_{j2} \, d\sigma \right] dt. \quad (5.18)$$

Ces quantités vérifient les équations de conservation de la charge discrètes (5.14) et (5.15) pour $k \notin \Gamma$.

Corollaire 5.1 Si $((\rho_i^T)^{n+1/2}, (\rho_k^P)^{n+1/2})$ et \mathbf{j}_j^n sont calculés via (5.16)–(5.18), alors la loi de Gauss discrète (5.12)–(5.13) est vérifiée pour tout n si elle l'est à n = 0, pour $k \notin \Gamma$.

Dans ce qui suit, nous supposons que $\rho = 0$, $\mathbf{j} = 0$, $b_d = 0$ et $u_d = 0$.

Proposition 5.4 L'énergie électromagnétique discrète suivante est conservée ou décroissante :

$$\mathbb{E}_{1}^{n} = \frac{1}{2} \left(\varepsilon ||\mathbf{E}^{n+1/2}||_{D}^{2} + \frac{1}{\mu} (B^{n}, B^{n+1})_{T,P} \right).$$
(5.19)

La preuve de cette proposition est fondée sur la formule de Green discrète et sur l'expression du schéma, qui permettent d'écrire

$$\left(\mathbb{E}_1^n - \mathbb{E}_1^{n-1}\right) = -\Delta t \frac{1}{2\mu} (\tilde{B}^n, (\mathbf{E}^{n+1/2} + \mathbf{E}^{n-1/2}) \cdot \boldsymbol{\tau})_{\Gamma,h}.$$

Le membre de droite de l'égalité précédente dépend des conditions aux limites données plus haut. Dans le cas du mur magnétique, (5.9), alors \tilde{B}^n est nul puisque $b_d = 0$, et l'énergie est constante. Dans le cas (5.10), alors nous avons

$$(\tilde{B}^n, (\mathbf{E}^{n+1/2} + \mathbf{E}^{n-1/2}) \cdot \boldsymbol{\tau})_{\Gamma,h} = 2\alpha(\tilde{B}^n, \tilde{B}^n)_{\Gamma_N,h}$$

ce qui prouve le résultat puisque $\alpha \geq 0$. En particulier, dans le cas du conducteur parfait, l'énergie est conservée, et dans le cas des conditions absorbantes de Silver-Müller, l'énergie est décroissante.

Remarque 5.1 Le même résultat de non-croissance de l'énergie peut être obtenu pour l'énergie

$$\mathbb{E}_{2}^{n} = \frac{1}{2} \left(\varepsilon(\mathbf{E}^{n-1/2}, \mathbf{E}^{n+1/2})_{D} + \frac{1}{\mu} ||B^{n}||_{T,P}^{2} \right).$$
(5.20)

Puisque l'énergie discrète \mathbb{E}_i^n (avec i = 1 ou i = 2) ne croît pas, il suffit de prouver que c'est une forme quadratique définitive positive en les variables $\mathbf{E}^{n+1/2}$ et B^n pour prouver la stabilité du schéma. En effet, cela prouve qu'il existe une constante C_h telle que pour tout $n \in \mathbb{N}$

$$||\mathbf{E}^{n+1/2}||_{D}^{2} + ||B^{n}||_{T,P}^{2} \le C_{h} |\mathbb{E}_{i}^{n}| \le C_{h} |\mathbb{E}_{i}^{0}|.$$
(5.21)

Cette approche énergétique a été utilisée, dans le contexte des équations de Maxwell, par exemple dans [55]. Pour passer de (5.19) ou (5.20) à (5.21), il suffit d'utiliser la définition du schéma et de majorer ensuite les normes des rotationnels par les normes des champs, en fonction de leurs expressions données dans le paragraphe 3.2. Travailler avec \mathbb{E}_1 permet d'obtenir la stabilité sous une condition de type CFL faisant intervenir la géométrie des cellules primales et duales ; travailler avec \mathbb{E}_2 fait intervenir la géométrie des cellules diamants. Les expressions de ces deux conditions de stabilité sont relativement difficiles à interpréter et ne sont donc pas données ici. Toutefois, il est important de noter que lorsque le maillage est constitué de cellules carrées de taille h, on retrouve la condition de stabilité du schéma de Yee, à savoir $c\Delta t \leq \frac{h\sqrt{2}}{2}$.

5.3 Résultats numériques

Nous considérons $\Omega = [0, 1]^2$ et les équations (5.1) et (5.2). Pour $k = \ell = 2$, nous définissons la pulsation :

$$\omega = \pi \left(\frac{k^2 + \ell^2}{\varepsilon \mu}\right)^{\frac{1}{2}},$$

et la permittivité et la perméabilité :

$$\begin{cases} \varepsilon = \varepsilon_0 , \quad \mu = -\mu_0 \quad \text{si} \quad x \le 0.5, \\ \varepsilon = 2\varepsilon_0 , \quad \mu = \frac{1}{2}\mu_0 \quad \text{si} \quad x > 0.5. \end{cases}$$

Nous avons choisi ε et μ de telle sorte que la vitesse de la lumière soit la même dans chacun des deux domaines, ceci uniquement dans le but d'avoir une solution analytique simple. D'autres valeurs arbitraires de ε et μ pourraient bien sûr être choisies. Les conditions initiales sont :

$$\begin{cases} B^{0} = \mu H^{0} = \cos(\pi kx) \cos(\pi \ell y) & \text{si} \quad x \leq 0.5, \\ B^{0} = \mu H^{0} = \frac{1}{2} \cos(\pi kx) \cos(\pi \ell y) & \text{si} \quad x > 0.5, \\ \mathbf{D}^{0} = \varepsilon \mathbf{E}^{0} = \mathbf{0}, \\ \rho = 0, \quad \mathbf{j} = \mathbf{0}, \\ \alpha = 0, \quad u_{d} = 0 \quad \text{(conditions limites de conducteur parfait)} \end{cases}$$

Mémoire d'habilitation à diriger des recherches

61

et la solution de (5.1) et (5.2) est :

$$\begin{array}{ll}
B = \mu H = & \cos(\pi kx)\cos(\pi \ell y)\cos(\omega t) & \text{si} \quad x \leq 0.5, \\
B = \mu H = & \frac{1}{2}\cos(\pi kx)\cos(\pi \ell y)\cos(\omega t) & \text{si} \quad x > 0.5, \\
D_x = \varepsilon E_x = -\frac{\ell\pi}{\mu_0\omega}\cos(\pi kx)\sin(\pi \ell y)\sin(\omega t), \\
D_y = \varepsilon E_y = & \frac{k\pi}{\mu_0\omega}\sin(\pi kx)\cos(\pi \ell y)\sin(\omega t).
\end{array}$$

Nous testons le schéma proposé sur huit familles de maillage respectant la frontière (x = 0.5) entre les deux domaines (voir Fig. 5.1). Nous avons choisi les centres de gravité comme points de contrôle dans les mailles primales convexes, et le point milieu de la diagonale intérieure pour les quadrilatères non-convexes. Ces familles de maillages sont :

- 1. Maillages de carrés.
- 2. Maillages de rectangles non-conformes.
- 3. Maillages de quadrilatères déformés (le raffinement est obtenu en découpant chaque quadrilatère en quatre en joignant les milieux des côtés opposés).
- 4. Maillages de triangles déformés obtenus en divisant les quadrangles des maillages précédents en quatre triangles en joignant les sommets opposés.
- 5. Maillages de triangles rectangles.
- 6. Maillages de quadrangles déformés aléatoirement (les sommets internes du maillage sont déplacés aléatoirement). Notons que ces maillages peuvent contenir des cellules non-convexes.
- 7. Maillages de triangles déformés aléatoirement (les sommets internes du maillage sont déplacés aléatoirement).
- 8. Maillages de quadrilatères fortement non-convexes, construits de telle sorte que le centre (x, y) de chaque motif de quatre carrés est remplacé par $(x + \Delta x(1 + \cos \theta), y + \Delta y(1 + \sin \theta)), \Delta x = \Delta y$ étant la longueur des carrés initiaux et $\theta = \pi/4$.

Nous avons choisi le temps final T comme étant égal à 20 périodes de l'onde :

$$T = 20 \times \frac{2\pi}{\omega} \simeq 4.71734 \times 10^{-8} \,\mathrm{s}.$$

Les erreurs relatives moyennes sur la dernière période de la simulation sont données en norme L^2 discrète dans les tableaux 5.1 et 5.2 pour le champ magnétique H (des comportement similaires ont été obtenus pour le champ**D**). Les commentaires suivants peuvent être faits : Il est prouvé dans la thèse de Siham Layouni [78] que, sous réserve de l'uniformité par rapport à h de la constante C_h dans (5.21) et sous réserve d'une certaine régularité des solutions exactes des équations de Maxwell, la norme L^2 de l'erreur au temps final de la simulation peut être bornée par un terme qui se comporte comme $C(\theta^*)h^{\alpha}$, où h est le pas d'espace du maillage et θ^* l'angle minimal entre les diagonales des cellules diamants (voir Figure 6.2). Lorsque θ^* tend vers 0, c'est-à-dire lorsque le maillage est très déformé, $C(\theta^*)$ tend vers $+\infty$, dans les autres cas il reste borné. Il est prouvé dans la thèse de Siham Layouni [78] que l'ordre de convergence α est au moins 1 pour des maillages généraux et au moins 1.5 si les maillages sont plus réguliers ou tendent à être plus réguliers lorsqu'ils sont raffinés. Ici, plus régulier signifie que les cellules-diamants sont presque toutes des parallélogrammes (un phénomène identique se



FIG. 5.1 – Maillages grossiers du carré unité.

produit pour l'analyse numérique du schéma DDFV appliqué à l'équation de Laplace, voir paragraphe 6.4) et lorsque les sommets S_k du maillage primal sont les centres de gravité de leurs cellules duales associées P_k . Ces résultats théoriques sont vraisemblablement sous-optimaux à la vue des résultats numériques présentés ici, qui semblent indiquer une convergence à l'ordre deux; toutefois, ils nous aident à comprendre la convergence irrégulière sur les maillages quadrangulaires et triangulaires déformés aléatoirement. Puisque ces familles de maillages connaissent de grandes variations de leurs angles θ définis ci-dessus, ceci implique de large variations dans la fonction $C(\theta)$, puisque celle-ci est singulière en 0.

h^{-1}	carrés	ordre	rectangles non-conformes	ordre	quadrangles déformés	ordre	triangles déformés	ordre
	$e_{h,2}$		$e_{h,2}$		$e_{h,2}$		$e_{h,2}$	
10	9.66×10^{-1}		1.52×10^{0}		1.43×10^{0}			
20	2.58×10^{-1}	1.90	6.00×10^{-1}	1.34	1.23×10^{0}	0.22	1.51×10^0	
40	6.36×10^{-2}	2.02	1.51×10^{-1}	1.98	3.39×10^{-1}	1.86	5.16×10^{-1}	1.55
80	1.47×10^{-2}	2.11	3.65×10^{-2}	2.05	8.29×10^{-2}	2.03	1.28×10^{-1}	2.01
160	2.44×10^{-3}	2.57	7.90×10^{-3}	2.20	1.94×10^{-2}	2.09	3.06×10^{-2}	2.06
320	5.95×10^{-4}	2.05	7.66×10^{-4}	3.36	3.66×10^{-3}	2.40	6.45×10^{-3}	2.25
	$e_{h,\infty}$		$e_{h,\infty}$		$e_{h,\infty}$		$e_{h,\infty}$	
10	8.56×10^{-1}		1.66×10^{0}		2.07×10^{0}			
20	2.28×10^{-1}	1.90	5.70×10^{-1}	1.54	1.35×10^0	0.22	1.69×10^{0}	
40	5.66×10^{-2}	2.01	1.43×10^{-1}	1.99	3.63×10^{-1}	1.86	5.14×10^{-1}	1.71
80	1.31×10^{-2}	2.11	3.43×10^{-2}	2.05	8.93×10^{-2}	2.03	1.27×10^{-1}	2.01
160	2.23×10^{-3}	2.55	7.48×10^{-3}	2.20	2.12×10^{-2}	2.09	3.07×10^{-2}	2.04
320	5.40×10^{-4}	2.04	8.21×10^{-4}	3.19	4.28×10^{-3}	2.40	6.69×10^{-3}	2.20

TAB. 5.1 – Erreurs relatives pour le champ magnétique H.

h^{-1}	triangles	ordre	quadrilatères	ordre	${ m triangles}$	ordre	$\operatorname{quadrilat}\operatorname{eres}$	ordre
	rectangles		aléatoires		aléatoires		non-convexes	
	$e_{h,2}$		$e_{h,2}$		$e_{h,2}$		$e_{h,2}$	
10			1.17×10^{0}					
20	7.63×10^{-1}		2.82×10^{-1}	2.06	1.06×10^{0}		1.33×10^{0}	
40	2.05×10^{-1}	1.89	8.13×10^{-2}	1.79	2.01×10^{-1}	2.39	1.01×10^{0}	0.39
80	5.05×10^{-2}	2.02	1.06×10^{-2}	2.94	9.71×10^{-2}	1.05	2.70×10^{-1}	1.90
160	1.16×10^{-2}	2.12	9.92×10^{-3}	0.09	2.25×10^{-2}	2.11	6.63×10^{-2}	2.03
320	1.98×10^{-3}	2.54	1.15×10^{-3}	3.11	6.24×10^{-3}	1.85	1.53×10^{-2}	2.11
	$e_{h,\infty}$		$e_{h,\infty}$		$e_{h,\infty}$		$e_{h,\infty}$	
10			1.14×10^{0}					
20	9.12×10^{-1}		2.76×10^{-1}	2.05	1.29×10^{0}		1.63×10^0	
40	2.42×10^{-1}	1.91	7.90×10^{-2}	1.84	2.50×10^{-1}	2.37	$1.07 imes 10^0$	0.60
80	5.96×10^{-2}	2.02	1.22×10^{-2}	2.69	1.06×10^{-1}	1.23	2.82×10^{-1}	1.92
160	1.38×10^{-2}	2.10	9.83×10^{-3}	0.31	2.67×10^{-2}	1.98	6.95×10^{-2}	2.02
320	2.42×10^{-3}	2.52	1.97×10^{-3}	2.32	9.01×10^{-3}	1.57	1.64×10^{-2}	2.08

TAB. 5.2 – Erreurs relatives pour le champ magnétique H.

La Figure. 5.2 représente le champ magnétique H = H(T) pour les huit maillages de la Figure. 5.1 raffinés de telle sorte qu'ils possèdent 80×80 cellules. Les légères oscillations que l'on peut observer sur certains maillages sont un effet de l'outil de visualisation dû aux maillages déformés sur lesquels sont représentées les solutions (le même phénomène est observé avec la solution analytique).



FIG. 5.2 – Isovaleurs de $H\left(t=20\frac{2\pi}{\omega}\right)$ sur des maillages de 80×80 cellules, appartenant aux familles représentées sur la Figure 5.1.

Le second test illustre le comportement du schéma lorsque les solutions présentent de forts gradients et que les maillages sont très déformés. Nous choisissons $\Omega = [-1, 1]^2$. Soit $r = (x^2 + y^2)^{\frac{1}{2}}$, $r_0 = 0.25$ et F(r) la fonction telle que F(r) = 1 si $r \leq r_0$ et F(r) = 0 si $r > r_0$. Soit également :

$$\omega = c\pi \left(k^2 + \ell^2\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Les conditions initiales, les conditions limites et la densité de courant \mathbf{j} sont choisis de telle sorte que la solution exacte de (5.1) et (5.2) est donnée par

$$\begin{cases} B = \left(\cos(\pi kx)\cos(\pi \ell y) + \frac{4c^2}{\omega^2} \frac{r_0^2(r_0^4 - r^4 - r_0^2 r^2)}{(r_0^2 - r^2)^4} \exp\left(-\frac{r^2}{r_0^2 - r^2}\right) F(r)\right)\cos(\omega t), \\ E_x = c^2 \left(-\frac{\ell\pi}{\omega}\cos(\pi kx)\sin(\pi \ell y) - \frac{2}{\omega} \frac{r_0^2 y}{(r_0^2 - r^2)^2}\exp\left(-\frac{r^2}{r_0^2 - r^2}\right) F(r)\right)\sin(\omega t), \\ E_y = c^2 \left(-\frac{k\pi}{\omega}\sin(\pi kx)\cos(\pi \ell y) + \frac{2}{\omega} \frac{r_0 x}{(r_0^2 - r^2)^2}\exp\left(-\frac{r^2}{r_0^2 - r^2}\right) F(r)\right)\sin(\omega t), \end{cases}$$

Notons que ces fonctions présentent un pic très fort au centre de Ω . Nous considérons $\omega = [-1/4, 1/4]^2$ et $\Omega \setminus \omega$ est maillé de façon uniforme avec des carrés de taille h, tandis que ω est maillé de façon uniforme avec des carrés de taille $h_0 = h/2^p$. Nous choisissons p = 2 (soit $h/h_0 = 4$) et faisons tendre h et h_0 conjointement vers zéro. La Figure 5.3 indique que le schéma semble être d'ordre deux pour de tels maillages.



FIG. 5.3 – Convergence de la norme L^2 discrète (en haut : **E**, en bas : B).

Mémoire d'habilitation à diriger des recherches

Pascal Omnes

Perspectives

Comme nous l'avons indiqué dans l'introduction générale de ce document, l'origine des schémas en dualité discrète tient à une étude que nous avions menée sur le problème de Stokes. Il était donc naturel de s'intéresser à cette application. Nous ne l'avons pas fait dans ce document, mais le lecteur pourra consulter la thèse de Sarah Delcourte [41], avec qui nous finalisons deux contributions. L'une concerne la résolution numérique du problème de Stokes avec conditions aux limites "non-standards" (on se donne par exemple la composante normale de la vitesse et la pression sur la frontière), pour lequel la formulation vitesse - tourbillon - pression est particulièrement adaptée [45, 46, 103]. L'autre concerne la résolution de ce même problème de Stokes, mais avec des conditions aux limites "standards" (c'est-à-dire de Dirichlet sur la frontière), pour lequel la formulation vitesse - pression est la mieux adaptée. Cette distinction entre différentes formes de conditions aux limites est fondamentale, car, dans le premier cas, nous sommes dans une application quasi-immédiate de la décomposition de Hodge (paragraphe 3.3.3 page 44) et de la résolution du problème div-rot (section 4.2 page 53), ce qui revient à résoudre quatre équation de Laplace, tandis que dans l'autre cas, nous sommes ramenés à la résolution d'un bi-laplacien.

Par ailleurs, un autre aspect concernant le problème de Stokes est à mentionner et concerne le choix de localisation des inconnues du problème discret. Le choix réalisé dans les travaux menés par Sarah Delcourte [41] est de discrétiser les inconnues de vitesse du problème de Stokes sur les arêtes (cellules-diamants), et les inconnues de pression et de tourbillon aux centres et aux sommets du maillage (mailles primales et duales). Cependant, un deuxième choix, "dual", est possible : localiser les inconnues de vitesse sur les mailles primales et duales, et les inconnues de pression sur les arêtes (cellules diamants). La discrétisation du Laplacien de vitesse ne pose pas de problème supplémentaire par rapport à celle d'un champ scalaire, tandis que le gradient de pression et la divergence de la vitesse sont définis en dualité discrète. Cependant, dans ce cas, nous ne savons montrer de condition inf-sup discrète que sur des maillages dont les cellules primales sont des triangles, sans pouvoir toutefois en montrer l'uniformité visà-vis du maillage [41]. Ce problème a été surmonté par Stella Krell [71, 72] qui propose une formulation où l'on stabilise la condition d'incompressibilité par un Laplacien de pression, comme dans les travaux de Pitkäranta-Brezzi [20]. Il conviendrait d'effectuer une comparaison des deux choix possibles de localisation des inconnues, à la fois sur le plan théorique, mais également en termes de précision numérique.

Un aspect à explorer plus avant est l'utilisation que l'on peut faire de la décomposition de Hodge discrète : cette décomposition permet par exemple de filtrer la partie irrotationnelle de la partie solénoïdale d'un champ de vecteurs défini aux arêtes. Cela peut avoir de nombreuses applications potentielles, et nous pensons en particulier aux méthodes numériques qui nécessitent l'emploi de vitesses à divergence nulle ; un premier travail pourrait être d'étendre les travaux de [110] à des maillages quelconques.

Un reproche parfois adressé à la méthode DDFV est "qu'elle rajoute des inconnues",

et que les systèmes linéaires issus de la discrétisation par cette méthode sont donc de plus grande taille, et donc plus coûteux à résoudre. Dans le cadre de l'équation de diffusion stationnaire anisotrope et inhomogène, nous avons proposé un remède possible à cette question [P2] : il s'agit de garder ce qui a fait le succès du schéma DDFV, à savoir la formulation variationnelle discrète équivalente sur maillages quelconques, mais d'éliminer localement la dépendance vis-à-vis des nœuds, à la fois dans les inconnues, mais aussi dans les fonctions tests. Une façon possible pour cela est de reconstruire les inconnues et les fonctions tests aux nœuds en fonction de leurs valeurs respectives aux centres des cellules en utilisant l'approche moindres carrés exposée dans [32]. Le schéma proposé dans [P2] est nommé HD³, pour "hybride diamant - dualité discrète". Les premiers tests numériques ont montré que, sur des maillages peu déformés et pour des tenseurs de diffusion peu anisotropes (test 1.1 du benchmark [59]), les résultats fournis par ce nouveau schéma sont très proches en terme de précision de ceux fournis par le schéma DDFV, en étant toutefois systématiquement moins bons, étant donnée la propriété de meilleure approximation donnée par la proposition 4.2. De plus nombreux tests, ainsi qu'une implémentation en trois dimensions d'espace sont actuellement en cours.

Par ailleurs, l'emploi de la méthode DDFV dans le cadre d'équations de convectiondiffusion-réaction stationnaires ou non, linéaires ou non, reste largement à étudier. De premiers pas dans cette direction ont été effectués par Yves Coudière et Gianmarco Manzini [34].

Enfin, il faut bien sûr évoquer dans ces perspectives la question de la généralisation de la méthodologie DDFV aux problèmes posés en trois dimensions d'espace. Sur les problèmes de diffusion, certaines pistes ont été proposées par François Hermeline [62, 64], Yves Coudière, Charles Pierre, Olivier Rousseau et Rodolphe Turpault [35], et Yves Coudière et Florence Hubert [33]. En revanche, la généralisation de la décomposition de Hodge et l'application de ces techniques à l'approximation numérique des équations de Maxwell semble moins aisée et ce point est à approfondir. Troisième partie

Analyse a priori et a posteriori pour l'équation de Laplace discrétisée par la méthode de volumes finis en dualité discrète

Chapitre 6

Analyse a priori pour l'équation de diffusion et le problème div-rot

Couramment, les estimations d'erreur que l'on peut montrer pour les méthodes d'éléments finis dépendent de la géométrie des cellules du maillage; en particulier, il est bien connu que des triangles très plats ne sont en général pas de "bons" triangles (en tous les cas pour des problèmes isotropes). Ceci peut être relié à la théorie de l'angle maximal (voir [8] et [75] pour les éléments finis de Lagrange et [1] pour les éléments finis de Raviart-Thomas et de Crouzeix-Raviart) : le taux de convergence optimal de ces méthodes est obtenu lorsque l'angle maximum des triangles est majoré, indépendemment du maillage, par un angle strictement inférieur à π . Nous allons montrer ici que la méthode DDFV appliquée à la résolution de l'équation de Laplace requiert une hypothèse moins forte que celle de l'angle maximal, ce qui explique sa précision sur des maillages déformés, aplatis ou fortement non-conformes, tels que ceux employés dans le paragraphe 4.1.3. Nous allons utiliser les deux hypothèses suivantes.

Hypothèse 6.1 Il existe un angle $\theta^* > 0$ indépendant du maillage, tel que : 1. Tous les angles entre les diagonales des cellules-diamants sont minorés par θ^* (voir figure 6.2 pour les notations) :

$$\exists \theta^*, \ 0 < \theta^* \le \frac{\pi}{2} \quad t.q. \quad \theta \ge \theta^*$$
(6.1)

2. Tous les angles des cellules diamants de la frontière sont minorés par θ^* .

Nous introduisons ensuite le découpage de D_j selon ses diagonales

majoré par τ^* (voir figure 6.1 pour les notations)

Définition 6.1 Nous pouvons découper chaque cellule diamant interne en deux triangles selon l'une de ses diagonales. Il y a donc deux façons de découper ces cellules, la première en $D_j = D_{j,1} \cup D_{j,2}$ et la seconde en $D_j = D'_{j,1} \cup D'_{j,2}$, comme indiqué sur la figure 6.1. Une fois ce choix de découpage effectué, nous définissons $\mathcal{T}_{j,\alpha} = D_{j,\alpha}$ ou $\mathcal{T}_{j,\alpha} = D'_{j,\alpha}$. Les cellules-diamants frontières n'auront quant à elles pas besoin d'être découpées et nous posons pour celles-ci $D_j = \mathcal{T}_{j,1}$.

Hypothèse 6.2 Il existe un angle $\tau^* < \pi$, indépendant du maillage, tel que : 1. Pour chaque cellule diamant D_j , le minimum entre l'angle maximum parmi le couple de triangles $(D_{j,1}, D_{j,2})$ ou l'angle maximum parmi le couple de triangles $(D'_{j,1}, D'_{j,2})$ est

$$\exists \tau^* < \pi, \ t.g. \ \tau := \min \Big(\max(\alpha_1, \beta_1, \mu_1 + \mu_2, \alpha_2, \beta_2, \nu_1 + \nu_2), \tag{6.2}$$

$$\max(\mu_1, \nu_1, \alpha_1 + \alpha_2, \mu_2, \nu_2, \beta_1 + \beta_2)) \le \tau^*$$
 (6.3)


FIG. 6.1 – Une cellule-diamant peut être découpée en deux triangles de deux façons.

2. L'angle maximal des cellules-diamants de la frontière est majoré par τ^* .

Proposition 6.1 Les Hypothèses 6.1 et 6.2 ne sont pas équivalentes, et, pour des cellules diamants convexes, la seconde est une conséquence de la première avec $\tau^* = \pi - \theta^*/2$.

La première hypothèse nous sera utile dans l'analyse d'erreur portant sur les flux calculés par la méthode DDFV, section 6.1. La seconde hypothèse sera utile pour l'analyse d'erreur portant sur le gradient de la solution, section 6.2. Nous supposerons la solution exacte $\hat{\phi}$ au moins dans $H^2(\Omega)$. Nous pourrons également prouver certains résultats de superconvergence en supposant que $\hat{\phi}$ est dans $H^3(\Omega)$.

6.1 Approche volumes finis

Nous cherchons à mesurer l'erreur sur les flux calculés au travers des arêtes des cellules primales et duales. Le flux calculé à travers les arêtes primales est, selon (4.6) et la définition de la divergence (3.5), $\nabla_h^D \phi \cdot \mathbf{n}_j$. Par ailleurs, le flux exact est $\delta \hat{\phi} \cdot \mathbf{n}_j$, où $\delta \hat{\phi}$ est défini par la Définition 4.1. De même, pour les flux au travers des arêtes duales, nous cherchons à mesurer la différence entre $\frac{1}{|A'_{j1}|+|A'_{j2}|} \left(|A'_{j1}|\mathbf{n}'_{j1}+|A'_{j2}|\mathbf{n}'_{j2}\right) \cdot \delta \hat{\phi}_j$ et $\frac{1}{|A'_{j1}|+|A'_{j2}|} \left(|A'_{j1}|\mathbf{n}'_{j1}+|A'_{j2}|\mathbf{n}'_{j2}\right) \cdot \nabla_h^D \phi_j$. Il est donc clair qu'une bonne mesure de l'erreur commise sur les flux est $||\nabla_h^D \phi - \delta \hat{\phi}||_D$. Afin d'exploiter la propriété (4.20), nous aurons besoin de la définition suivante, valide puisque $\hat{\phi}$ est supposée dans $H^2(\Omega)$ et est donc continue sur $\overline{\Omega}$:

Définition 6.2 Nous définissons $\Pi \hat{\phi} = \left((\Pi \hat{\phi})_i^T, (\Pi \hat{\phi})_k^P \right) par$

$$\forall i \in [1, I] \quad (\Pi \hat{\phi})_i^T = \hat{\phi}(G_i) \tag{6.4}$$

$$\forall i \in \Gamma, \quad (\Pi \hat{\phi})_i^T = \frac{1}{2} \left((\Pi \hat{\phi})_{k_1}^P + (\Pi \hat{\phi})_{k_2}^P \right) \tag{6.5}$$

$$\forall k \in [1, K], \quad (\Pi \hat{\phi})_k^P = \hat{\phi}(S_k) \tag{6.6}$$

où, dans la seconde égalité, le point $G_i \in \Gamma$ est le milieu du segment $[S_{k_1}S_{k_2}] \subset \Gamma$. Par l'inégalité triangulaire, nous avons

$$||\nabla_h^D \phi - \delta \hat{\phi}||_D \le ||\nabla_h^D \phi - \nabla_h^D \Pi \hat{\phi}||_D + ||\nabla_h^D \Pi \hat{\phi} - \delta \hat{\phi}||_D.$$
(6.7)



FIG. 6.2 – Notations pour les hypothèses 6.1 et 6.2.

Posons $\psi := \phi - \Pi \hat{\phi}$. Il est important de remarquer que, compte tenu des conditions aux limites imposées sur ϕ par (4.9) et compte tenu de la définition de $\Pi \hat{\phi}$ au bord, d'une part par (6.5) et d'autre part par (6.6) appliqué à $k \in \overline{\Gamma}_D$, nous avons $\psi_k^P = 0$, $\forall k \in \overline{\Gamma}_D$ et $\psi_i^T = 0$, $\forall i \in \Gamma_D$. Ceci permet d'écrire, puisque l'on peut alors appliquer (4.20),

$$\begin{aligned} ||\nabla_{h}^{D}\phi - \nabla_{h}^{D}\Pi\hat{\phi}||_{D}^{2} &= (\nabla_{h}^{D}\phi - \nabla_{h}^{D}\Pi\hat{\phi}, \nabla_{h}^{D}\psi)_{D} \\ &= (\delta\hat{\phi} - \nabla_{h}^{D}\Pi\hat{\phi}, \nabla_{h}^{D}\psi)_{D} \\ &+ \frac{1}{4}\sum_{j\in\Gamma_{N}}|A_{j}|\nabla_{h}^{D}\psi \cdot \boldsymbol{\tau}_{j}(dg)_{j}. \end{aligned}$$
(6.8)

Il est ensuite possible de montrer, que pour $g \in H^s(\Gamma_N)$, avec $0 \le s \le 1$, nous avons

$$\sum_{j \in \Gamma_N} (dg)_j^2 \le Ch^{1+2s} ||g||_{H^s(\Gamma_N)}^2, \tag{6.9}$$

avec une constante qui ne dépend pas du maillage. Puisque nous avons supposé que $\hat{\phi} \in H^2(\Omega)$ et que g est la trace normale sur Γ_N de $\nabla \hat{\phi} \in (H^1(\Omega))^2$, nous avons au minimum $g \in H^{1/2}(\Gamma_N)$ et $||g||_{H^{1/2}(\Gamma_N)} \leq ||\hat{\phi}||_{H^2(\Omega)}$, et donc l'estimation donnée par (6.9) est une estimation qui est au moins en $h^2 ||\hat{\phi}||_{H^2(\Omega)}$. Par ailleurs, l'hypothèse 6.1 implique que $|A_j|^2 \leq C|D_j|$ pour toute cellule diamant du bord, avec une constante C qui ne dépend que de θ^* . En appliquant l'inégalité de Cauchy-Schwarz à chacun des deux termes de la somme du membre de droite de (6.8), on obtient que

$$||\nabla_h^D \phi - \nabla_h^D \Pi \hat{\phi}||_D \le ||\nabla_h^D \Pi \hat{\phi} - \delta \hat{\phi}||_D + Ch ||\hat{\phi}||_{H^2(\Omega)},$$

ce qui, compte tenu de (6.7), permet d'écrire que

$$||\nabla_h^D \phi - \delta \hat{\phi}||_D \le 2||\nabla_h^D \Pi \hat{\phi} - \delta \hat{\phi}||_D + Ch||\hat{\phi}||_{H^2(\Omega)}.$$

Mémoire d'habilitation à diriger des recherches

Pascal Omnes

Finalement, il reste donc à estimer $||\nabla_h^D \Pi \hat{\phi} - \delta \hat{\phi}||_D$, ce qui peut être facilement adapté des lemmes 5.9, 5.10 et 5.11 de [A7], bien que la définition de $\delta \hat{\phi}$ diffère légèrement entre le présent document et [A7], en raison de la définition différente des cellules duales. On peut donc prouver que sous l'hypothèse 6.1, il existe une constante ne dépendant que de θ^* telle que $||\nabla_h^D \Pi \hat{\phi} - \delta \hat{\phi}||_D \leq Ch ||\hat{\phi}||_{H^2(\Omega)}$. Finalement, nous avons donc

Théorème 6.1 Sous l'hypothèse 6.1 et si la solution exacte du problème (4.1)-(4.3) est dans $H^2(\Omega)$, alors il existe une constante C, ne dépendant que de θ^* telle que

$$||\nabla_h^D \phi - \delta \hat{\phi}||_D \le Ch ||\hat{\phi}||_{H^2(\Omega)}$$

6.2 Approche éléments finis

Nous partons de la proposition 4.1 page 48 concernant la (presque) équivalence du schéma DDFV avec une méthode d'éléments finis non-conformes. Comme les fonctions ϕ_h et ψ_h sont non-conformes dans $H^1(\Omega)$, nous utilisons la seconde formule de Strang pour évaluer la norme (brisée) du gradient de l'erreur entre ϕ_h et $\hat{\phi}$. Notons

$$\begin{aligned} a_h(\phi_h, \psi_h) &:= \sum_j \int_{D_j} \nabla \phi_h \cdot \nabla \psi_h \, d\mathbf{x} \\ \ell(\psi_h) &:= \int_{\Omega} f \, \psi_h^* \left(\mathbf{x} \right) d\mathbf{x} + \int_{\Gamma_N} g \, \tilde{\psi}_h(\sigma) \, d\sigma \end{aligned}$$

alors on a, en posant $|\cdot|_{1,h} := a_h(\cdot,\cdot)^{1/2}$ et en remarquant que les arguments de a_h peuvent aussi être des fonctions de H^1 :

$$|\hat{\phi} - \phi_h|_{1,h} \le 2 \inf_{w_h \in V_h} |\hat{\phi} - w_h|_{1,h} + \sup_{w_h \in V_{h0}} \frac{|a_h(\hat{\phi}, w_h) - \ell(w_h)|}{|w_h|_{1,h}}, \tag{6.10}$$

où V_h est l'ensemble des fonctions w_h associées par la définition 3.6 aux éléments (w_i^T, w_k^P) vérifiant les mêmes conditions aux limites que ϕ sur Γ_D , voir (4.9), et V_{h0} est l'ensemble des fonctions w_h associées par la définition 3.6 aux éléments (w_i^T, w_k^P) dont les w_i^T et w_k^P sont nuls sur $\overline{\Gamma}_D$.

Le premier terme du membre de droite de (6.10) est l'erreur d'interpolation; le second l'erreur de consistance. Nous supposerons dans la suite pour plus de simplicité que toutes les cellules-diamants sont convexes, bien que le cas de cellules-diamants nonconvexes soit traité dans [A7].

Selon l'hypothèse 6.2, il est toujours possible de découper une cellule-diamant interne D_j de telle sorte que l'angle maximum des $\mathcal{T}_{j,\alpha}$ (voir Définition 6.1) soit borné supérieurement par τ^* . Pour estimer l'erreur d'interpolation, nous avons besoin de définir $\omega_{j,\alpha}$ l'interpolé P^1 de Lagrange usuel de $\hat{\phi}$ sur le triangle $\mathcal{T}_{j,\alpha}$, dont la valeur en chacun des trois sommets de $\mathcal{T}_{j,\alpha}$ est égale à la valeur de la fonction $\hat{\phi}$ en ce point.

Puis, nous choisissons comme w_h particulier dans l'erreur d'interpolation $w_h := (\Pi \hat{\phi})_h$, où nous rappelons que $\Pi \hat{\phi}$ est défini par (6.4)-(6.6). La propriété

$$\int_{D_j} \nabla w_h(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_{\alpha=1,2} \int_{\mathcal{T}_{j,\alpha}} \nabla \omega_{j,\alpha}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

sur les cellules-diamants internes et la propriété

$$w_h = \omega_{j,1}$$

sur les cellules-diamants de la frontière impliquent la majoration suivante :

$$|\hat{\phi} - w_h|_{1,h}^2 \leq 2\sum_{j \notin \Gamma} ||\nabla \hat{\phi} - \left\langle \nabla \hat{\phi} \right\rangle_j ||_{0,D_j}^2$$
(6.11)

+
$$4\sum_{j\notin\Gamma}\sum_{\alpha=1,2}\frac{|\mathcal{T}_{j,\alpha}|}{|D_j|}||\nabla\hat{\phi} - \nabla\omega_{j,\alpha}||^2_{0,\mathcal{T}_{j,\alpha}} + 2\sum_{j\in\Gamma}||\nabla\hat{\phi} - \nabla\omega_{j,1}||^2_{0,D_j}, (6.12)$$

où $\left\langle \nabla \hat{\phi} \right\rangle_{j}$ est la valeur moyenne de $\nabla \hat{\phi}$ sur D_{j} . Le premier des trois termes du membre de droite de (6.11) est majoré par l'inégalité de Poincaré-Wintiger (voir (7.9) car $\nabla \hat{\phi} - \left\langle \nabla \hat{\phi} \right\rangle_{j}$ est de moyenne nulle sur D_{j} et $\nabla \hat{\phi}$ est dans $(H^{1}(\Omega))^{2}$. Nous avons donc

$$\sum_{j\notin\Gamma} ||\nabla\hat{\phi} - \left\langle\nabla\hat{\phi}\right\rangle_j||_{0,D_j}^2 \le Ch^2 ||\hat{\phi}||_{2,\Omega}^2, \tag{6.13}$$

où $C = (1/\pi)^2$ en raison de la convexité des cellules-diamants. D'autre part, cette convexité implique aussi que $|\mathcal{T}_{j,\alpha}| \leq |D_j|$ et nous utilisons l'estimation d'erreur obtenue par [8, Théorème 2.3] pour majorer les deuxièmes et troisièmes termes de (6.11), sous l'hypothèse 6.2 : Il existe une constante $C(\tau^*)$ ne dépendant que de τ^* , telle que

$$\sum_{j \notin \Gamma} \sum_{\alpha=1,2} \frac{|\mathcal{T}_{j,\alpha}|}{|D_j|} ||\nabla \hat{\phi} - \nabla \omega_{j,\alpha}||_{0,\mathcal{T}_{j,\alpha}}^2 + \sum_{j \in \Gamma} ||\nabla \hat{\phi} - \nabla \omega_{j,1}||_{0,D_j}^2 \le C(\tau^*) h^2 ||\hat{\phi}||_{2,\Omega}^2.$$
(6.14)

En regroupant (6.11), (6.13) et (6.14), nous obtenons la proposition :

Proposition 6.2 Si la solution exacte du problème (4.1)–(4.3) est dans $H^2(\Omega)$, si l'hypothèse 6.2 est vérifiée et si toutes les cellules-diamants sont convexes, il existe une constante $C(\tau^*)$, ne dépendant que de τ^* telle que

$$\inf_{w_h \in V_h} |\hat{\phi} - w_h|_{1,h} \le C(\tau^*)h||\hat{\phi}||_{2,\Omega}.$$
(6.15)

Le second point est d'obtenir une majoration de l'erreur de consistance. Pour cela, nous pouvons écrire en premier lieu

$$a_h(\hat{\phi}, w_h) - \ell(w_h) = [a_h(\hat{\phi}, w_h) - (f, w_h)_{\Omega} - \int_{\Gamma_N} g\tilde{w}_h(\sigma)d\sigma] + (f, w_h - w_h^*)_{\Omega}.$$
 (6.16)

Le dernier terme du membre de droite de (6.16) est aisément borné, car il suffit de remarquer que la fonction constante par morceaux w_h^* vaut $\frac{1}{2}(w_i^T + w_k^P)$ sur $T_i \cap P_k$, et qu'elle interpole donc la fonction w_h aux points milieux des arêtes des cellules-diamants. On peut donc énoncer le lemme suivant :

Lemme 6.1 Si toutes les cellules diamants sont convexes, il existe une constante C indépendante du maillage, telle que

$$|(f, w_h - w_h^*)_{\Omega}| \le Ch ||f||_{0,\Omega} |w_h|_{1,h} .$$
(6.17)

Par ailleurs, pour estimer le premier terme du membre de droite de (6.16), nous définissons $RT(\nabla \hat{\phi})$, l'interpolation de Raviart-Thomas de $\nabla \hat{\phi}$ sur chaque $\mathcal{T}_{j,\alpha}$ (voir [98]) par

$$RT(\nabla\hat{\phi})_{|\mathcal{T}_{j,\alpha}} \in (P_0(\mathcal{T}_{j,\alpha}))^2 \oplus \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} P_0(\mathcal{T}_{j,\alpha}) \quad \text{et} \quad \int_s RT(\nabla\hat{\phi}) \cdot \mathbf{n} \, d\xi = \int_s \nabla\hat{\phi} \cdot \mathbf{n} \, d\xi$$

pour chaque arête s de $\mathcal{T}_{j,\alpha}$, dont nous avons noté le vecteur unitaire normal extérieur par **n**. Nous avons le lemme suivant :

Lemme 6.2 Soit $w_h \in V_{h0}$. Soit $\langle w_h \rangle_{j,\alpha}$ la valeur moyenne de w_h sur $\mathcal{T}_{j,\alpha}$. Alors, si toutes les cellules-diamants sont convexes, nous avons

$$a_{h}(\hat{\phi}, w_{h}) - (f, w_{h})_{\Omega} - \int_{\Gamma_{N}} g \,\tilde{w}_{h}(\sigma) \, d\sigma =$$

$$\sum_{j,\alpha} \int_{\mathcal{T}_{j,\alpha}} \left[(\nabla \hat{\phi} - RT(\nabla \hat{\phi})) \cdot \nabla w_{h} - f \left(w_{h} - \langle w_{h} \rangle_{j,\alpha} \right) \right] \, d\mathbf{x} \, .$$
(6.18)

Le premier terme du membre de droite de (6.18) est majoré grâce aux estimations sur l'interpolation de Raviart-Thomas, prouvées dans [1, Lemmes 4.1 et 4.2] sous la condition de l'angle maximal sur chaque $\mathcal{T}_{j,\alpha}$. Nous avons donc

Lemme 6.3 Si la solution exacte du problème (4.1)-(4.3) est dans $H^2(\Omega)$, si l'hypothèse 6.2 est vérifiée et si toutes les cellules-diamants sont convexes, il existe une constante $C(\tau^*)$, telle que

$$\left|\sum_{j,\alpha} \int_{\mathcal{T}_{j,\alpha}} (\nabla \hat{\phi} - RT(\nabla \hat{\phi})) \cdot \nabla w_h \right| \le C(\tau^*) h ||\hat{\phi}||_{2,\Omega} |w_h|_{1,h}.$$
(6.19)

Le second terme du membre de droite de (6.18) est majoré par une inégalité de type Poincaré-Wintiger puisque $w_h - \langle w_h \rangle_{i,\alpha}$ est de moyenne nulle sur $\mathcal{T}_{j,\alpha}$ et nous avons

Lemme 6.4 Il existe une constante C, ne dépendant pas du maillage, telle que

$$\left|\sum_{j,\alpha} \int_{\mathcal{T}_{j,\alpha}} f\left(w_h - \langle w_h \rangle_{j,\alpha}\right) d\mathbf{x}\right| \le Ch ||f||_{0,\Omega} |w_h|_{1,h}.$$
(6.20)

Nous pouvons donc, en regroupant (6.16), (6.17) (6.18), (6.19) et (6.20), et en tenant compte du fait que si $\hat{\phi}$ est dans $H^2(\Omega)$, alors $||f||_{L^2(\Omega)} \leq ||\hat{\phi}||_{H^2(\Omega)}$, énoncer la proposition suivante

Proposition 6.3 Si la solution exacte du problème (4.1)-(4.3) est dans $H^2(\Omega)$, si l'hypothèse 6.2 est vérifiée et si toutes les cellules-diamants sont convexes, il existe une constante $C(\tau^*)$, ne dépendant que de τ^* telle que

$$\sup_{w_h \in V_{h0}} \frac{|a_h(\phi, w_h) - \ell(w_h)|}{|w_h|_{1,h}} \le C(\tau^*)h||\hat{\phi}||_{H^2(\Omega)}.$$

En regroupant (6.10) et les propositions 6.2 et 6.3, nous pouvons énoncer le théorème :

Théorème 6.2 Si la solution exacte du problème (4.1)-(4.3) est dans $H^2(\Omega)$, si l'hypothèse 6.2 est vérifiée et si toutes les cellules-diamants sont convexes, il existe une constante $C(\tau^*)$, ne dépendant que de τ^* telle que

$$|\hat{\phi} - \phi_h| \le C(\tau^*)h||\hat{\phi}||_{H^2(\Omega)}.$$
 (6.21)

6.3 Erreur en norme L^2

Nous supposons ici que Ω est un domaine polygonal convexe, que $\Gamma_N = \emptyset$ et que la donnée u_d de (4.2) vérifie $u_d = 0$. Ceci permet d'affirmer que si $f \in L^2(\Omega)$, alors $\hat{\phi} \in H^2(\Omega)$ et qu'il existe une constante C telle que

$$||\phi||_{H^2(\Omega)} \le C||f||_{L^2(\Omega)}.$$
(6.22)

L'argument classique de dualité consiste à écrire :

$$\left\|\hat{\phi} - \phi_h\right\|_{L^2(\Omega)} = \sup_{v \in L^2(\Omega)} \frac{\int_{\Omega} (\phi_h - \tilde{\phi}) v(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}{\|v\|_{L^2(\Omega)}} \,. \tag{6.23}$$

Ensuite, pour un $v \in L^2(\Omega)$ donné, définissons $\hat{\psi} \in H_0^1(\Omega)$ comme étant l'unique solution du problème suivant

$$\begin{cases} -\Delta \hat{\psi} = v \text{ dans } \Omega, \\ \hat{\psi} = 0 \text{ sur } \Gamma. \end{cases}$$
(6.24)

Puisque v est dans $L^2(\Omega)$, et puisque nous avons supposé que Ω est un domaine polygonal convexe, $\hat{\psi}$ appartient à $H^2(\Omega)$ et il existe une constante C ne dépendant que de Ω telle que

$$\left\|\hat{\psi}\right\|_{H^{2}(\Omega)} \le C \left\|v\right\|_{L^{2}(\Omega)}$$
 (6.25)

La preuve de la convergence en norme $L^2(\Omega)$ ser a basée sur la formule de représentation suivante

Proposition 6.4 Soit $\psi_h \in V_h$. Si toutes les cellules-diamants sont convexes, alors nous avons

$$\begin{aligned} (\phi_{h} - \hat{\phi}, v)_{\Omega} &= a_{h}(\phi_{h} - \hat{\phi}, \hat{\psi} - \psi_{h}) \\ &- \sum_{j,\alpha} \int_{\mathcal{T}_{j,\alpha}} (\nabla \hat{\phi} - RT(\nabla \hat{\phi})) \cdot \nabla(\psi_{h} - \hat{\psi}) \, d\mathbf{x} \\ &- \sum_{j,\alpha} \int_{\mathcal{T}_{j,\alpha}} f\left[\left(\hat{\psi} - \psi_{h} \right) - \left\langle \hat{\psi} - \psi_{h} \right\rangle_{j,\alpha} \right] \, d\mathbf{x} \end{aligned} \tag{6.26} \\ &- \sum_{j,\alpha} \int_{\mathcal{T}_{j,\alpha}} (\nabla \hat{\psi} - RT(\nabla \hat{\psi})) \cdot \nabla(\phi_{h} - \hat{\phi}) \, d\mathbf{x} \\ &- \sum_{j,\alpha} \int_{\mathcal{T}_{j,\alpha}} v\left[\left(\hat{\phi} - \phi_{h} \right) - \left\langle \hat{\phi} - \phi_{h} \right\rangle_{j,\alpha} \right] \, d\mathbf{x} \\ &+ \sum_{j} \int_{D_{j}} f(\psi_{h}^{*} - \psi_{h}) \, d\mathbf{x} \,, \end{aligned}$$

où la notation $\langle \cdot \rangle_{j,\alpha}$ désigne toujours la valeur moyenne sur $\mathcal{T}_{j,\alpha}$. Il est aisé de prouver que, à condition de choisir judicieusement ψ_h , les cinq premiers termes de (6.26) sont d'ordre $C(\tau^*)h^2||f||_{L^2(\Omega)}||v||_{L^2(\Omega)}$ compte tenu des résultats prouvés ou utilisés dans le paragraphe précédent, avec une constante $C(\tau^*)$ qui ne dépend que de τ^* si les maillages vérifient l'hypothèse 6.2. Le seul terme pour lequel nous ne savons pas prouver de l'ordre deux, sauf dans des configurations particulières (voir paragraphe 6.4 et chapitre 9) est le dernier terme, qui vient du fait que (4.17) n'est pas une véritable formulation éléments finis. Néanmoins, il est facile de prouver que ce terme est d'ordre un, ce qui fait que nous pouvons énoncer le résultat suivant, probablement non optimal, compte tenu de la convergence observée à l'ordre deux dans les tests numériques effectués dans le paragraphe 4.1.3 :

Théorème 6.3 Soit Ω un domaine polygonal convexe. Soit $f \in L^2(\Omega)$ donné et soit $\hat{\phi}$ la solution exacte du problème (4.1)-(4.2) avec $\Gamma_N = \emptyset$ et $u_d = 0$. Soit ϕ_h la fonction associée à la solution du schéma (4.6)-(4.9) par la définition 3.6 page 43. Si toutes les cellules-diamants sont convexes et sous l'hypothèse 6.2, il existe une constante C, ne dépendant que de τ^* , telle que

$$||\phi_h - \hat{\phi}||_{0,\Omega} \le C(\tau^*) h||f||_{0,\Omega}$$

Mémoire d'habilitation à diriger des recherches

Pascal Omnes



FIG. 6.3 – Raffinement homothétique d'un triangle en quatre sous-triangles semblables

6.4 Superconvergence sur certaines familles de maillages

Nous considérons ici des familles de maillages qui vérifient la propriété suivante :

Hypothèse 6.3 Il existe un nombre L, fini, de sous-domaines $(\Omega_{\ell})_{\ell \in [1,L]}$, inclus dans Ω et ne dépendant pas du maillage, tels que les cellules-diamants qui ne sont pas des parallélogrammes sont incluses dans des bandes de largeur Ch situées autour des frontières des Ω_{ℓ} , où C est une constante indépendante de h.

Remarque 6.1 Les cellules-diamants situées sur la frontière de Ω étant des triangles, il est exclu que toutes les cellules-diamants puissent être des parallélogrammes.

Nous pouvons citer plusieurs familles de maillages vérifiant l'hypothèse 6.3. En premier lieu bien sûr des familles de maillages dont les cellules primales sont toutes des rectangles conformes de même taille, mais également des réunions, conformes ou non, de tels maillages, à condition que l'interface entre les différentes maillages reste de longueur bornée vis-à-vis de h. Par exemple, les maillages non-conformes considérés sur la figure 7.2 page 86 vérifient cette hypothèse, mais les maillages représentés sur la figure 4.1page 50 ne la vérifient pas. Les maillages triangulaires de la figure 4.4 page 51 vérifient également cette hypothèse. Une autre classe de maillages vérifiant cette hypothèse est celle obtenue par raffinements homothétiques successifs d'un maillage initial triangulaire grossier en joignant entre eux les milieux des côtés de chaque triangle (voir figure 6.3). Dans ce cas, les seules cellules-diamants qui ne sont pas des parallélogrammes sont celles associées à des arêtes primales incluses dans les arêtes des triangles du maillage grossier initial, qui sont les Ω_{ℓ} de l'hypothèse 6.3. Nous supposons ici que $\hat{\phi}$ est dans $H^3(\Omega)$. Ceci implique en particulier que $f \in H^1(\Omega)$ et que $q \in H^{3/2}(\Gamma_N)$. Lorsque l'on reprend les estimations de la partie 6.1, on se rend compte d'une part que l'on peut appliquer (6.9) avec s = 1, et que cela donne une estimation en $h^{3/2}$ pour ce terme, et d'autre part que

$$d_j := (\nabla_h^D \Pi \hat{\phi})_j - (\delta \hat{\phi})_j$$

est nul pour tout polynôme d'ordre deux lorsque D_j est un parallélogramme. Il suffit alors d'appliquer le lemme de Bramble-Hilbert sous la forme exposée dans [30, Th. 4.1.3] et un argument de mise à l'échelle pour montrer que sous l'hypothèse 6.1, il existe une constante $C(\theta^*)$ telle que

 $|d_j|^2 \leq C(\theta^*) h^2 ||\hat{\phi}||^2_{H^3(D_j)}$ lorsque D_j est un parallélogramme.

En revanche, lorsque D_j n'est pas un parallélogramme, d_j ne s'annule que sur les polynômes d'ordre un, et l'on peut alors montrer que

 $|d_j|^2 \leq C(\theta^*) ||\hat{\phi}||^2_{H^2(D_j)}$ lorsque D_j n'est pas un parallélogramme.

Mémoire d'habilitation à diriger des recherches

77

La quantité $\sum_{j} |D_j| d_j^2$ est donc la somme d'un terme en $h^4 ||\hat{\phi}||^2_{H^3(\Omega)}$ et d'un terme en $h^2 \sum_{j \in \mathcal{J}} ||\hat{\phi}||^2_{H^2(D_j)}$, où \mathcal{J} est l'ensemble des indices j tels que les cellules-diamants ne sont pas des parallélogrammes. Puisque $\hat{\phi}$ est dans H^3 et sous l'hypothèse 6.3, alors l'inégalité de Ilin (voir, par exemple, [22, Formule (2.2)]) nous dit que $\sum_{j \in \mathcal{J}} ||\hat{\phi}||^2_{H^2(D_j)} \leq Ch ||\hat{\phi}||^2_{H^3(\Omega)}$. Finalement, la quantité $\sum_j |D_j| d_j^2$ est donc un terme en $Ch^3 ||\hat{\phi}||^2_{H^3(\Omega)}$. Nous avons donc le théorème suivant

Théorème 6.4 Sous les hypothèses 6.1 et 6.3, et si la solution exacte du problème (4.1)-(4.3) est dans $H^3(\Omega)$, alors il existe une constante C, ne dépendant que de θ^* et des Ω_{ℓ} de l'hypothèse 6.3 telle que

$$||\nabla_h^D \phi - \delta \hat{\phi}||_D \le Ch^{3/2} (||\hat{\phi}||_{H^3(\Omega)} + ||g||_{H^1(\Gamma_N)}).$$

Par ailleurs, en ce qui concerne l'erreur en norme $L^2(\Omega)$, on peut raffiner l'estimation du dernier terme de (6.26) en écrivant

$$\int_{D_j} f(\psi_h^* - \psi_h) \, d\mathbf{x} = \int_{D_j} \left(f - \langle f \rangle_j \right) \left(\psi_h^* - \psi_h \right) \, d\mathbf{x} + \langle f \rangle_j \int_{D_j} \left(\psi_h^* - \psi_h \right) \, d\mathbf{x} \,, \quad (6.27)$$

où, pour tout j, $\langle f \rangle_j$ est la valeur moyenne de f sur D_j . Comme f est dans $H^1(\Omega)$, et grâce aux estimations obtenues dans le paragraphe 6.2, on peut montrer que le premier terme du membre de droite de (6.27) est borné par $Ch^2 ||f||_{1,D_j} ||\nabla \psi_h||_{L^2(D_j)}$. D'autre part, le second terme du membre de droite de (6.27) est nul si la cellule diamant D_j est un parallélogramme et est borné par $Ch|D_j||\langle f \rangle_j ||\nabla \psi_h|_j$ sinon. En appliquant l'inégalité d'Ilin (voir, par exemple, [22, Formule (2.2)]) sur les frontières des Ω_ℓ , nous pouvons prouver le résultat suivant :

Théorème 6.5 Sous les hypothèses du théorème 6.3, sous l'hypothèse 6.3 et si de plus f est dans $H^1(\Omega)$, alors il existe une constante C ne dépendant que de τ^* et de la géométrie des Ω_{ℓ} telle que

$$||\phi_h - \hat{\phi}||_{0,\Omega} \le C h^2 (||\hat{\phi}||_{H^2(\Omega)} + ||f||_{1,\Omega}).$$

Chapitre 7

Analyse a posteriori pour l'équation de diffusion

La méthode de volumes finis pour l'équation de Laplace que nous avons présentée permet de travailler sur des maillages très généraux, en particuliers non-conformes; elle autorise donc des raffinements locaux permettant d'adapter le maillage en fonction du problème considéré. Encore faut il pour cela disposer d'un critère de raffinement de maillage facile et peu coûteux à mettre en œuvre. La théorie des estimations a posteriori. qui a été amplement développée pour les méthodes d'éléments finis (voir par exemple [4, 9, 113]), fournit un outil efficace dans cette optique. Néanmoins, son développement est nettement moins avancé dans le cadre des volumes finis centrés sur les cellules que dans le cadre des éléments finis, d'une part en raison de l'utilisation plus récente des volumes finis pour les équations elliptiques, et d'autre part parce que ces schémas numériques ne sont pas fondés, en général, sur une formulation variationnelle. En ce qui concerne le schéma "VF4", Agouzal et Oudin [2] ont utilisé la relation entre ce schéma et les éléments finis mixtes pour donner un estimateur a posteriori pour la norme L^2 de l'erreur. Pour ce même schéma, Nicaise [89] donne une estimation de l'erreur en norme (brisée) de l'énergie, entre la solution exacte et un polynôme, globalement discontinu, d'ordre deux dans chaque triangle, obtenu à partir des flux du schéma sur les arêtes et de valeurs aux sommets des triangles, calculées par interpolation des valeurs aux cellules. Ces idées sont ensuite étendues dans [90], pour traiter le schéma diamant (décrit dans [32]); l'estimateur obtenu peut être utilisé, en deux dimensions d'espace, si les cellules du maillage sont des triangles ou des rectangles. L'estimateur est complètement calculable, au sens où il ne fait pas intervenir de constante inconnue, et son efficacité est autour de 7 pour les test réalisés dans [90]. Une extension de ces idées aux équations de diffusion-convection-réaction a été présentée dans [91]. Plus récemment, Vohralík [116] a aussi proposé un estimateur a posteriori complètement calculable pour l'approximation des équations de diffusion-convection-réaction par des schémas volumes finis centrés sur les cellules sur des maillages généraux. La principale amélioration vis-à-vis de [90, 91] est que l'estimateur obtenu est asymptotiquement exact. Comme dans [90], il mesure la norme (brisée) de l'énergie de l'erreur entre la solution exacte et un polynôme, globalement discontinu, d'ordre deux dans chaque élément, obtenu à partir des flux du schéma sur les arêtes et des valeurs dans les éléments. Lorsque ceux-ci ne sont pas des simplexes (des triangles en deux dimensions), il est nécessaire de résoudre des petits problèmes locaux dans les éléments. Puisque les estimateurs donnés dans [90, 116] ne requièrent que les flux sur les arêtes et les valeurs des inconnues du schéma aux centres des mailles, il est possible de les utiliser pour le schéma DDFV. Cependant, le traitement de maillages aussi généraux que ceux employés avec le schéma DDFV, en particulier ceux de la figure 4.1 ou de la figure 7.2, est impossible avec la technique de [90] et implique un coût calcul supplémentaire avec celle de [116]. Par ailleurs, ces deux techniques ne mesureraient pas directement l'erreur commise par le gradient calculé par DDFV, mais comme nous venons de l'expliquer, par le gradient d'une solution post-traitée.

Finalement, nous pouvons aussi mentionner un certain nombre de travaux dans le cadre des méthodes de volumes (éléments) finis centrées sur les nœuds [11, 22, 80, 94, 95, 97].

En ce qui concerne le travail présenté ici, j'ai profité de la (presque) équivalence du schéma DDFV avec une méthode d'éléments finis non-conforme (voir Proposition 4.1) pour reprendre une technique usuelle en éléments finis, qui permet d'obtenir des estimations a posteriori efficaces; une grande attention a été portée dans ce travail à l'obtention d'estimateurs complètement calculables, c'est-à-dire ne faisant pas intervenir de constante inconnue, et à l'obtention d'estimations les plus précises possibles, afin de ne pas trop dégrader leur efficacité. Deux difficultés sont apparues : la première tient au fait que la méthode d'éléments finis considérée est non-conforme, la seconde à la présence simultanée des deux maillages, primaux et duaux. La première difficulté a été levée en décomposant, de façon assez classique maintenant, l'erreur en une partie conforme additionnée à une partie non-conforme. La seconde difficulté conduit à une expression de l'estimateur final comme somme d'estimateurs locaux provenant des deux maillages. Dans la pratique, puisque c'est sur le maillage primal que l'utilisateur du code possède un certain contrôle, les estimateurs duaux sont redistribués sur les cellules primales qui intersectent les cellules duales associées.

7.1 Une formule de représentation de l'erreur dans la norme de l'énergie

Nous cherchons à mesurer la semi norme brisée H^1 de l'erreur entre la solution exacte $\hat{\phi}$ et la fonction ϕ_h associée à la solution du schéma DDFV par la définition 3.6. Pour cela, nous définissons

$$e = \left(\sum_{j} \int_{D_{j}} \left| \nabla \hat{\phi} - \nabla_{h} \phi_{h} \right|^{2} (\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \right)^{1/2} \tag{7.1}$$

et nous suivons une stratégie à présent classique utilisée dès que la solution discrète n'est pas dans $H^1(\Omega)$ (voir [3, 39, 90]). Puisque $\nabla \hat{\phi} - \nabla_h \phi_h$ appartient à $(L^2(\Omega))^2$, nous pouvons écrire sa décomposition de Helmholtz-Hodge de la façon suivante

$$\nabla \hat{\phi} - \nabla_h \phi_h = \nabla \hat{\Phi} + \nabla \times \hat{\Psi} \tag{7.2}$$

avec $\hat{\Phi}$ appartenant à $H_D^1(\Omega) := \{\psi \in H^1(\Omega) / \psi = 0 \text{ sur } \Gamma_D\}$ et $\hat{\Psi}$ appartenant à $H_N^1 := \{\hat{\Psi} \in H^1(\Omega), \nabla \hat{\Psi} \cdot \boldsymbol{\tau} = 0 \text{ sur } \Gamma_N\}$. Afin de simplifier la présentation, nous supposerons ici que Γ_N est simplement connexe. Il a été vérifié que les résultats obtenus dans cette étude s'étendent au cas général.

Hypothèse 7.1 Nous supposons que Γ_N est simplement connexe.

La décomposition (7.2) est orthogonale et l'on a

$$\nabla \hat{\Psi} \cdot \boldsymbol{\tau} = 0 \text{ sur } \Gamma_N \Leftrightarrow \exists c_N \in \mathbb{R} \text{ t.q. } \hat{\Psi}_{|\Gamma_N} = c_N.$$
(7.3)

Si Γ_N était multiplement connexe, il y aurait une constante c_ℓ pour chaque composante $\Gamma_{N,\ell}$ de Γ_N . En utilisant le fait que la solution exacte du problème (4.1)-(4.2)-(4.3) vérifie

$$\int_{\Omega} \nabla \hat{\phi} \cdot \nabla \psi \left(\mathbf{x} \right) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} f \psi \left(\mathbf{x} \right) d\mathbf{x} + \int_{\Gamma_N} g \psi \left(\sigma \right) d\sigma \tag{7.4}$$

pour tout $\psi \in H_D^1$, nous pouvons obtenir la formule suivante :

$$e^{2} = \left\| \nabla \hat{\Phi} \right\|_{0,\Omega}^{2} + \left\| \nabla \times \hat{\Psi} \right\|_{0,\Omega}^{2}$$

$$= \sum_{j} \int_{D_{j}} (\nabla \hat{\phi} - \nabla_{h} \phi_{h}) \cdot \nabla \hat{\Phi} (\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \sum_{j} \int_{D_{j}} (\nabla \hat{\phi} - \nabla_{h} \phi_{h}) \cdot \nabla \times \hat{\Psi} (\mathbf{x}) d\mathbf{x} (7.5)$$

$$:= i_{1} + i_{2}.$$

Dans le but de trouver une formule de représentation adéquate pour i_1 et i_2 , nous aurons besoin des définitions suivantes

Définition 7.1 La frontière ∂D_j de chaque cellule diamant D_j est composée des quatre segments $\left[G_{i_{\alpha}(j)}S_{k_{\beta}(j)}\right]$ avec $(\alpha,\beta) \in \{1;2\}$. (voir Figure 3.2 page 40). Nous noterons par S l'ensemble de ces arêtes lorsque j parcourt l'ensemble des cellules diamants, et \mathring{S} celles des arêtes de S qui ne sont pas sur la frontière Γ du domaine. Chaque $s \in S$ est donc un segment que nous noterons par $\left[G_{i(s)}S_{k(s)}\right]$. Nous écrirons également que $s \subset \mathring{T}_i$ (resp. $s \subset \mathring{P}_k$) si $s \subset T_i$ (resp. $s \subset P_k$) et $s \not\subset \Gamma$. Finalement, nous noterons par \mathbf{n}_s l'un des deux vecteurs unitaires orthogonaux à s, arbitrairement choisi parmi les deux possibilités, mais ensuite fixé pour la suite de ce chapitre, et nous noterons par $\left[\nabla_h \phi_h \cdot \mathbf{n}_s\right]_s$ (resp. $\left[\nabla_h \phi_h \cdot \boldsymbol{\tau}_s\right]_s$), le saut de la composante normale (resp. tangentielle) de $\nabla_h \phi_h$ à travers s, où $\boldsymbol{\tau}_s$ est tel que $(\mathbf{n}_s, \boldsymbol{\tau}_s)$ soit une base orthonormée orientée positivement.

Proposition 7.1 Soit $\phi = (\phi_i^T, \phi_k^P)$ la solution du schéma (4.6)–(4.11) et ϕ_h la fonction associée à ϕ par la définition 3.6. Soit $\hat{\Phi}$ défini par (7.2). Soit $\Phi = (\Phi_i^T, \Phi_k^P) \in \mathbb{R}^{I+J^{\Gamma}} \times \mathbb{R}^K$ vérifiant

$$\Phi_k^P = 0, \,\forall k \in \bar{\Gamma}_D \quad et \quad \Phi_i^T = 0, \,\forall i \in \Gamma_D.$$
(7.6)

Nous avons la formule de représentation suivante

$$i_{1} = \frac{1}{2} \sum_{i \in [1,I]} \int_{T_{i}} f\left(\hat{\Phi} - \Phi_{i}^{T}\right) (\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \frac{1}{2} \sum_{k \in [1,K]} \int_{P_{k}} f\left(\hat{\Phi} - \Phi_{k}^{P}\right) (\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$
$$+ \sum_{A_{j} \subset \Gamma_{N}} \int_{A_{j}} (g - \bar{g}_{j}) \left(\hat{\Phi} - \tilde{\Phi}_{h}\right) (\sigma) d\sigma$$
$$- \frac{1}{2} \sum_{i \in [1,I]} \sum_{s \subset \mathring{T}_{i}} \int_{s} [\nabla_{h} \phi_{h} \cdot \mathbf{n}_{s}]_{s} \left(\hat{\Phi} - \Phi_{i}^{T}\right) (\sigma) d\sigma$$
$$- \frac{1}{2} \sum_{k \in [1,K]} \sum_{s \subset \mathring{P}_{k}} \int_{s} [\nabla_{h} \phi_{h} \cdot \mathbf{n}_{s}]_{s} \left(\hat{\Phi} - \Phi_{k}^{P}\right) (\sigma) d\sigma.$$
(7.7)

Proposition 7.2 Soit $\phi = (\phi_i^T, \phi_k^P)$ la solution du schéma (4.6)–(4.11) et ϕ_h sa fonction associée. Soit $\hat{\Psi}$ défini par (7.2). Soit $\Psi = (\Psi_i^T, \Psi_k^P) \in \mathbb{R}^{I+J^{\Gamma}} \times \mathbb{R}^K$ vérifiant $\Psi_k^P = c_N, \forall k \in \overline{\Gamma}_N$ et $\Psi_i^T = c_N, \forall i \in \Gamma_N$ et soit Ψ_h sa fonction associée. Soit

 $t := \nabla \phi_d \cdot \boldsymbol{\tau}$ défini sur la frontière Γ_D et \bar{t}_j la valeur moyenne de t sur A_j . Nous avons la formule de représentation suivante :

$$i_{2} = -\sum_{A_{j} \subset \Gamma_{D}} \int_{A_{j}} (t - \bar{t}_{j}) \left(\hat{\Psi} - \tilde{\Psi}_{h}\right) (\sigma) d\sigma$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i \in [1,I]} \sum_{s \subset \tilde{T}_{i}} \int_{s} [\nabla_{h} \phi_{h} \cdot \boldsymbol{\tau}_{s}]_{s} \left(\hat{\Psi} - \Psi_{i}^{T}\right) (\sigma) d\sigma$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{k \in [1,K]} \sum_{s \subset \tilde{P}_{k}} \int_{s} [\nabla_{h} \phi_{h} \cdot \boldsymbol{\tau}_{s}]_{s} \left(\hat{\Psi} - \Psi_{k}^{P}\right) (\sigma) d\sigma.$$
(7.8)

7.2 Un estimateur calculable et efficace

Les résultats que nous allons exposer reposent sur des inégalités de type Poincaré et sur une inégalité de trace que nous allons rappeler.

Lemme 7.1 Soit ω un ouvert borné étoilé par rapport à l'un de ses points. Soit $u \in H^1(\omega)$ et soit \bar{u}_{ω} la valeur moyenne de u sur ω . Alors,

$$\exists C(\omega), t.q. \|u - \bar{u}_{\omega}\|_{L^{2}(\omega)} \le C(\omega) \operatorname{diam}(\omega) \|\nabla u\|_{L^{2}(\omega)}.$$
(7.9)

Lorsque ω est convexe, une constante universelle pour $C(\omega)$ est donnée par $\frac{1}{\pi}$. Lorsque ω n'est pas convexe, il est possible d'utiliser des formules explicites données, par exemple, dans [21, 114].

Lemme 7.2 Soit ω un ouvert polygonal tel que $\bar{\omega}$ soit étoilé par rapport à l'un de ses sommets, noté z, situé sur une partie γ_D (de mesure non nulle) de la frontière $\gamma = \partial \omega$. Supposons qu'au moins l'un des segments s de $\partial \omega$ et de sommet z soit tout entier inclus dans γ_D . Alors,

$$\exists C(\omega, \gamma_D) \, t.q. \, \|u\|_{L^2(\omega)} \le C(\omega, \gamma_D) \, |\omega|^{1/2} \, \|\nabla u\|_{L^2(\omega)} \, . \tag{7.10}$$

pour toute fonction $u \in H^1(\omega)$, telle que $u_{|\gamma_D} = 0$.

Il est possible d'estimer $C(\omega, \gamma_D)$ par la formule (3.2) de [21].

Remarque 7.1 Dans (7.9) et (7.10), les constantes $C(\omega)$ et $C(\omega, \gamma_D)$ ne dépendent pas du diamètre de ω , mais seulement de sa forme géométrique.

Lemme 7.3 Soit T un triangle et soit E l'un de ses côtés. Alors, pour toute fonction $u \in H^1(T)$, telle que $\int_E u(\sigma) d\sigma = 0$, on a

$$\|u\|_{L^{2}(E)} \leq \frac{\alpha}{\sqrt{2}\hat{\rho}} \left(\frac{|E|}{|T|}\right)^{1/2} \operatorname{diam}(T) \|\nabla u\|_{L^{2}(T)},$$
 (7.11)

où $\alpha \approx 0.730276$ et $\hat{\rho} = 1 - \frac{\sqrt{2}}{2}$ sont donnés par la formule (23) de [90].

Finalement, l'inégalité de trace donnée par le théorème 4.1 et la remarque 4.1 de [21] pour des fonctions de $W^{1,p}$, p > 1 peut être améliorée pour $p \ge 2$ et fournit



FIG. 7.1 – Pour une cellule primale T_i et son sommet S_k , l'intersection $T_i \cap P_k$ est partagée en deux sous triangles $t_{ik,1}$ et $t_{ik,2}$.

Lemme 7.4 Soit T un triangle et soit E l'un de ses côtés; soit ρ la distance de E au sommet de T opposé à E, et soit σ la longueur du plus grand des deux autres côtés de T. Soit $\varepsilon > 0$ un nombre réel arbitraire; alors, pour tout $u \in H^1(T)$, on a

$$\|u\|_{L^{2}(E)}^{2} \leq \frac{1}{\rho} \left((2 + \varepsilon^{-2}) \|u\|_{L^{2}(T)}^{2} + \varepsilon^{2} \sigma^{2} \|\nabla u\|_{L^{2}(T)}^{2} \right).$$
(7.12)

Par ailleurs, nous formulons une hypothèse sous laquelle les estimateurs d'erreur locaux seront efficaces.

Hypothèse 7.2 Nous supposons que la sous-triangulation de Ω composée de tous les triangles $t_{ik,\alpha}$ (voir la Figure 7.1) est régulière, au sens où les angles minimums de ces triangles sont tous minorés par un angle strictement positif indépendant du maillage.

Nous pouvons énoncer le théorème suivant

Théorème 7.1 Soit $h_i^T := \operatorname{diam}(T_i)$ et $h_k^P := \operatorname{diam}(P_k)$. Soit \overline{f}_i^T (resp. \overline{f}_k^P) la valeur moyenne de f sur T_i (resp. sur P_k). Soit \overline{g}_j (resp. \overline{t}_j) la valeur moyenne de g (resp. de $\nabla \phi_d \cdot \boldsymbol{\tau}$) sur le segment A_j situé sur la frontière de Neumann (resp. Dirichlet). Soit $C(T_i)$, $C(P_k)$ et $C(P_k, \partial P_k \cap \Gamma_D)$, $C(P_k, \partial P_k \cap \Gamma_N)$ les constantes calculables qui apparaissent respectivement dans (7.9) et (7.10). Soit α la constante apparaissant dans (7.11). Définissons, par analogie avec [3], les quantités suivantes

$$osc(f,T,\Omega) = \left(\sum_{i \in [1,N]} \left(C(T_i) h_i^T\right)^2 \left\| f - \bar{f}_i^T \right\|_{L^2(T_i)}^2 \right)^{1/2},$$
(7.13)

$$osc(f, P, \Omega) = \left(\sum_{k \notin \bar{\Gamma}_D} \left(C(P_k)h_k^P\right)^2 \left\| f - \bar{f}_k^P \right\|_{L^2(P_k)}^2\right)^{1/2},$$
(7.14)

$$str(f, P, \Gamma_D, \Omega) = \left(\sum_{k \in \bar{\Gamma}_D} \left(C(P_k, \partial P_k \cap \Gamma_D) \right)^2 |P_k| \, \|f\|_{L^2(P_k)}^2 \right)^{1/2}, \tag{7.15}$$

$$osc(g,\Gamma_N) = \alpha(1+\sqrt{2}) \left(\sum_{j\in\Gamma_N} \frac{\operatorname{diam}^2(D_j)}{|D_j|} |A_j| \|g - \bar{g}_j\|_{L^2(A_j)}^2\right)^{1/2},$$
(7.16)

$$osc(t, \Gamma_D) = \alpha (1 + \sqrt{2}) \left(\sum_{j \in \Gamma_D} \frac{\operatorname{diam}^2(D_j)}{|D_j|} |A_j| \|t - \bar{t}_j\|_{L^2(A_j)}^2 \right)^{1/2}.$$
(7.17)

Mémoire d'habilitation à diriger des recherches

83

De plus, pour tout $\mu > 0$, définissons

$$\chi_i(\mu) = (C(T_i)h_i^T)^2 + \mu$$
(7.18)

$$\chi_k(\mu) = \begin{cases} \left(C(P_k)h_k^P\right)^2 + \mu & si \quad k \notin \bar{\Gamma}_D\\ C^2(P_k, \Gamma_D \cap \partial P_k) |P_k| + \mu & si \quad k \in \bar{\Gamma}_D \end{cases},$$
(7.19)

$$\chi'_{k}(\mu) = \begin{cases} \left(C(P_{k})h_{k}^{P} \right)^{2} + \mu & si \ k \notin \bar{\Gamma}_{N} \\ C^{2}(P_{k}, \Gamma_{N} \cap \partial P_{k}) |P_{k}| + \mu & si \ k \in \bar{\Gamma}_{N} \end{cases}.$$
(7.20)

Pour toute cellule primale T_i et toute cellule duale P_k telle que $T_i \cap P_k \neq \emptyset$, soit $s = [G_i S_k]$ et $t_{ik,1}$ et $t_{ik,2}$ les triangles définis sur la figure 7.1 tels que $t_{ik,1} \cup t_{ik,2} = T_i \cap P_k$. Soit $\rho_{ik,\alpha}$ la distance de s au sommet de $t_{ik,\alpha}$ opposé à s et $\sigma_{ik,\alpha}$ la longueur du plus grand des deux autres côtés de $t_{ik,\alpha}$. Pour tout $\mu > 0$, définissons

$$C_{s}(\mu) = \frac{\left(1 + \sqrt{1 + \frac{\sigma_{ik,1}^{2}}{\mu}}\right) \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\sigma_{ik,2}^{2}}{\mu}}\right)}{\left(1 + \sqrt{1 + \frac{\sigma_{ik,1}^{2}}{\mu}}\right) \rho_{ik,2} + \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\sigma_{ik,2}^{2}}{\mu}}\right) \rho_{ik,1}}.$$
(7.21)

Nous définissons les estimateurs locaux et globaux par

$$\left(\eta_{i}^{T}\right)^{2} = \inf_{\mu>0} \left[\chi_{i}(\mu) \sum_{s\in\overset{\circ}{T_{i}}} C_{s}(\mu) \left\| \left[\nabla_{h}\phi_{h}\cdot\mathbf{n}_{s}\right]_{s}\right\|_{L^{2}(s)}^{2} \right] et\left(\eta^{T}\right)^{2} = \sum_{i} \left(\eta_{i}^{T}\right)^{2}, \quad (7.22)$$

$$\left(\eta_{i}^{\prime T}\right)^{2} = \inf_{\mu>0} \left[\chi_{i}(\mu) \sum_{s\in \overset{\circ}{T}_{i}} C_{s}(\mu) \| [\nabla_{h}\phi_{h} \cdot \boldsymbol{\tau}_{s}]_{s} \|_{L^{2}(s)}^{2} \right] et\left(\eta^{\prime T}\right)^{2} = \sum_{i} \left(\eta^{\prime T}_{i}\right)^{2}, \quad (7.23)$$

$$\left(\eta_{k}^{P}\right)^{2} = \inf_{\mu>0} \left[\chi_{k}(\mu) \sum_{s\in\stackrel{\circ}{P_{k}}} C_{s}(\mu) \| [\nabla_{h}\phi_{h} \cdot \mathbf{n}_{s}]_{s} \|_{L^{2}(s)}^{2} \right] et \left(\eta^{P}\right)^{2} = \sum_{k} \left(\eta_{k}^{P}\right)^{2}, \quad (7.24)$$

$$\left(\eta'_{k}^{P}\right)^{2} = \inf_{\mu>0} \left[\chi'_{k}(\mu) \sum_{s \in \overset{\circ}{P}_{k}} C_{s}(\mu) \| [\nabla_{h}\phi_{h} \cdot \boldsymbol{\tau}_{s}]_{s} \|_{L^{2}(s)}^{2} \right] et\left(\eta'^{P}\right)^{2} = \sum_{k} \left(\eta'^{P}_{k}\right)^{2}.$$
(7.25)

Alors, on a les estimations d'erreur a posteriori suivantes

$$\left(\sum_{j} \int_{D_{j}} \left| \nabla \hat{\phi} - \nabla_{h} \phi_{h} \right|^{2} (\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \right)^{1/2} \leq$$
(7.26)

$$\begin{split} &\frac{1}{2} \bigg(\Big[osc(f,T,\Omega) + \big(osc^2(f,P,\Omega) + str^2(f,P,\Gamma_D,\Omega) \big)^{1/2} + 2osc(g,A,\Gamma_N) + \eta^T + \eta^P \Big]^2 \\ &+ \big[2osc(t,A,\Gamma_D) + \eta'^T + \eta'^P \big]^2 \bigg)^{1/2}. \end{split}$$

De plus, sous l'Hypothèse 7.2, il existe une constante C indépendante du maillage telle que

$$(\eta_{i}^{T})^{2} \leq C \left(\left\| \nabla_{h} \phi_{h} - \nabla \hat{\phi} \right\|_{L^{2}(T_{i})}^{2} + (h_{i}^{T})^{2} \left\| f - (\bar{f})_{i}^{T} \right\|_{L^{2}(T_{i})}^{2} \right), \forall i \in [1, I], \quad (7.27)$$

$$\left(\eta'_{i}^{T}\right)^{2} \leq C \left\|\nabla_{h}\phi_{h} - \nabla\hat{\phi}\right\|_{L^{2}(T_{i})}^{2}, \forall i \in [1, I],$$

$$(7.28)$$

$$\left(\eta_k^P\right)^2 \leq C\left(\left\|\nabla_h \phi_h - \nabla \hat{\phi}\right\|_{L^2(P_k)}^2 + \left(h_k^P\right)^2 \left\|f - \left(\bar{f}\right)_k^P\right\|_{L^2(P_k)}^2\right), \forall k \in [1, K], (7.29)$$

$$\left(\eta_k^{\prime P}\right)^2 \leq C \left\|\nabla_k \phi_k - \nabla \hat{\phi}\right\|^2 \quad \forall k \in [1, K]$$

$$\left(\eta'_{k}^{P}\right)^{2} \leq C \left\|\nabla_{h}\phi_{h} - \nabla\hat{\phi}\right\|_{L^{2}(P_{k})}^{2}, \forall k \in [1, K].$$

$$(7.30)$$

Remarque 7.2 Pour $\varepsilon > 0$, les quantités de (7.13) à (7.17) sont des termes d'ordre supérieur à un (l'ordre optimal de convergence de la méthode) dès que $(f, g, t) \in H^{\varepsilon}(\Omega) \times H^{1/2+\varepsilon}(\Gamma_N) \times H^{1/2+\varepsilon}(\Gamma_D)$.

En effet, dans ce cas, $\|f - \bar{f}_i^T\|_{L^2(T_i)}$ est d'ordre $(h_i^T)^{\min(1,\varepsilon)} \|f\|_{H^{\varepsilon}(T_i)}$, de telle sorte que $osc(f, T, \Omega)$ est d'ordre $h^{1+\min(1,\varepsilon)}$. C'est aussi le cas pour le terme (7.14). De plus, puisque Ω_D^P est l'union des cellules duales associées aux sommets S_k situés sur $\bar{\Gamma}_D$, alors Ω_D^P est inclus dans une bande de largeur h le long de Γ_D . L'inégalité de Ilin (voir, par exemple, [22, Formule (2.2)]), assure que $\|f\|_{L^2(\Omega_D^P)}$ est d'ordre $h^{\min(\frac{1}{2},\varepsilon)}$, ce qui implique que $str(f, P, \Gamma_D, \Omega)$ est d'ordre $h^{1+\min(\frac{1}{2},\varepsilon)}$. Finalement, $\|g - \bar{g}_j\|_{L^2(A_j)}$ et $\|t - \bar{t}_j\|_{L^2(A_j)}$ sont d'ordre $\frac{1}{2} + \varepsilon$, et donc $osc(g, \Gamma_N)$ et $osc(t, \Gamma_D)$ sont d'ordre $1 + \varepsilon$ dès que la quantité $\frac{\dim^2(D_j)}{|D_j|}$ est bornée indépendemment de h sur toute la frontière Γ .

Remarque 7.3 Les minimisations intervenant dans (7.22)-(7.25) sont effectuées numériquement au moment où les estimateurs sont calculés.

7.3 Simulations adaptatives

Nous considérons deux tests numériques. Le premier test possède une solution raide mais régulière $(C^{\infty}(\Omega))$. Un raffinement uniforme du maillage permettra donc d'obtenir une convergence avec un ordre optimal, c'est-à-dire en O(h), ou, de façon équivalente, en $O(I^{-1/2})$, où nous rappelons que I est le nombre de cellules primales du maillage. Nous allons vérifier qu'une stratégie adaptative nous donnera le même ordre asymptotique de convergence, mais avec des erreurs nettement moindres pour une valeur de I fixée. Le second test possède une solution moins régulière puisqu'elle appartient à $H^{1+s}(\Omega)$, avec s < 2/3. Nous vérifierons qu'un raffinement uniforme du maillage induira une convergence de la solution à l'ordre $O(h^{2/3})$, ce qui veut dire en $O(I^{-1/3})$. La stratégie adaptative permettra de récupérer l'ordre optimal en $O(I^{-1/2})$. Afin d'appliquer une stratégie de raffinement de maillage, il est nécessaire de réécrire l'estimateur total donné par (7.26) comme une somme de quantités définies sur les cellules primales ; en effet, c'est sur celui-ci que l'utilisateur a un certain contrôle, soit par l'intermédiaire d'un logiciel de maillage, soit par un raffinement approprié du maillage précédent. Une telle réécriture de (7.26) est aisée, puisque nous pouvons découper chaque cellule duale en ses intersections avec différentes cellules primales, et puisque nous pouvons affecter chaque terme de bord avec la cellule primale dont la frontière contient l'arête frontière considérée. Dans la suite, nous noterons par η_i cet estimateur local agrégé.

7.3.1 Adaptation pour une solution raide mais régulière

Nous débutons par un problème inspiré de [54], dans lequel les auteurs considèrent le problème multiéchelle suivant. Soit $\Omega =]-1, 1[^2$. Nous posons $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ et $\chi(r) = 1$ si $r \leq \varepsilon$, tandis que $\chi(r) = 0$ si $r > \varepsilon$. Des conditions aux limites de Dirichlet homogènes sont imposées et la fonction f dans (4.1) est choisie de telle sorte que la solution exacte $\hat{\phi}$ soit donnée par

$$\hat{\phi} = \cos(k\pi x)\cos(k\pi y) + \eta\chi(r)\,\exp(1/\varepsilon^2)\,\exp[-1/(\varepsilon^2 - r^2)],$$

où nous imposons $k = \frac{1}{2}$, $\eta = 10$ et $\varepsilon = \frac{1}{4}$. Cette solution est donc dans $C^{\infty}(\Omega)$, mais possède un pic très important dans le voisinage de (0,0). Nous utiliserons une famille de maillages avec des cellules carrées éventuellement non-conformes. Plus précisément,



FIG. 7.2 – Maillage non conforme avec h = 1/4 et p = 2.



FIG. 7.3 – Erreurs pour le problème multiéchelle pour le raffinement uniforme (courbe supérieure) et le raffinement adaptatif (courbe inférieure), ainsi que pour tous les autres maillages.

comme dans [54], nous considérons $\omega = [-1/4, 1/4]^2$ et $\Omega \setminus \omega$ est maillé de façon uniforme avec des carrés de taille h, tandis que ω est maillé de façon uniforme avec des carrés de taille $h_0 = h/2^p$. Pour $p \ge 1$, le maillage est donc non conforme. Le maillage correspondant à h = 1/4 et $h/h_0 = 4$ est représenté sur la Figure 7.2. Ensuite, la stratégie de raffinement suivante est employée : nous commençons avec un maillage conforme correspondant à $h_0 = h = 1/4$, et pour tout maillage de cette famille, nous posons $\eta_{ext}^2 := \sum_{T_i \subset \Omega \setminus \omega} \eta_i^2$ et $\eta_{int}^2 := \sum_{T_i \subset \omega} \eta_i^2$, et dénotons par N_{ext} et N_{int} respectivement le nombre de cellules primales dans $\Omega \setminus \omega$ et dans ω . Nous nous attendons à ce que l'erreur totale se comporte ainsi : $e \approx C(N_{ext} + N_{int})^{-1/2}$. Nous pouvons aussi nous attendre à ce que η_{ext} (respectivement η_{int}) se comporte également approximativement proportionnellement à $N_{ext}^{-1/2}$ (resp. $N_{int}^{-1/2}$), de telle sorte que : - si nous raffinons uniquement ω , l'erreur totale sera approximativement ($\eta_{ext}^2 + \eta_{ext}^2$)

- $\eta_{int}^2/4$)^{1/2} pour ($N_{ext} + 4N_{int}$) cellules.
- si nous raffinons uniquement $\Omega \setminus \omega$, l'erreur totale sera approximativement $(\eta_{ert}^2/4 +$ η_{int}^2)^{1/2} pour (4N_{ext} + N_{int}) cellules.
- si nous raffinons à la fois $\omega \in \Omega \setminus \omega$, l'erreur totale sera approximativement $\frac{1}{2}(\eta_{ext}^2 +$ η_{int}^2)^{1/2} pour 4($N_{ext} + N_{int}$) cellules.

La stratégie proposée est donc la suivante : après chaque résolution sur un maillage donné, nous comparons $C_i := (\eta_{ext}^2 + \eta_{int}^2/4)^{1/2} (N_{ext} + 4N_{int})^{1/2}, C_e := (\eta_{ext}^2/4 + \eta_{int}^2)^{1/2} (4N_{ext} + N_{int})^{1/2}$ et $C_{ie} := (\eta_{ext}^2 + \eta_{int}^2)^{1/2} (N_{ext} + N_{int})^{1/2}$ et nous raffinons le maillage

- seulement dans ω si $C_i = \min(C_i, C_e, C_{ie}),$
- seulement dans $\Omega \setminus \omega$ si $C_e = \min(C_i, C_e, C_{ie}),$
- à la fois dans ω et $\Omega \setminus \omega$ si $C_{ie} = \min(C_i, C_e, C_{ie})$.

Nous présentons sur la figure 7.3 un nuage de points correspondant aux véritables erreurs en fonction du nombre total de cellules primales, pour tous les choix possibles de (h, h_0) (avec $h_0 \leq h$) qui conduisent à des maillages dont le nombre de cellules primales est plus petit que 70000. Nous avons également tracé la courbe correspondant à un raffinement uniforme $(h = h_0)$ et la courbe correspondant à la stratégie de raffinement proposée ci-dessus; nous remarquons que cette dernière courbe épouse le bas du nuage de points; nous pouvons donc considérer que, au moins sur ce cas test, la stratégie proposée est optimale. Cette stratégie conduit à raffiner le maillage uniquement dans ω jusqu'à $h/h_0 = 16$, avec h = 1/4, et ensuite à raffiner uniformément l'ensemble du



FIG. 7.4 – Efficacités pour le problème multi-échelle.



FIG. 7.5 – Efficacités pour le problème multi-échelle en fonction du rapport de raffinement central p.

maillage. Notons que cela correspond à l'observation que nous avions faite dans [A7]. Toutefois, c'est maintenant l'estimateur a posteriori qui guide ce raffinement adaptatif, alors que dans [A7] nous avions besoin de la véritable erreur pour cela! En ce qui concerne l'efficacité de l'estimateur, la Figure 7.4 représente les rapports des estimateurs sur les vraies erreurs pour tous les maillages utilisés pour ce cas-test. Pour ces tests, l'efficacité de l'estimateur est le plus souvent autour de 5, et toujours entre 3.5 et 7. La Figure 7.5 représente les efficacités pour un maillage de $\Omega \setminus \omega$ fixé, de pas h = 1/4et pour différents rapports de raffinement, avec p allant jusqu'à 8. Nous remarquons que l'efficacité varie peu autour de la valeur 5 jusqu'à p = 6, et commence ensuite à se détériorer pour p > 7. Ceci est cependant suffisamment robuste pour nos besoins dans ce cas, puisque nous avons trouvé que le p optimal était de 4. Cette détérioration était toutefois attendue, puisque le théorème 7.1 indique (via l'hypothèse 7.2) que l'efficacité de l'estimateur dépend de la régularité de la sous-triangulation $t_{ik,\alpha}$ (voir Figure 7.1). Le fait que ces triangles dégénèrent à la frontière entre la grille grossière et la grille fine lorsque p croît explique cette dégradation de l'efficacité. Notons toutefois que l'estimation a priori (voir Théorème 6.1) ne dégénère pas avec ce rapport de raffinement, puisque pour ce type de maillages, toutes les cellules-diamants sont convexes et que l'angle θ^* de l'hypothèse 6.1 vaut $\pi/4$.

7.3.2 Adaptivité pour une solution singulière

Ce cas-test est assez classique. Le domaine Ω est $]-1;1[\times]-1;1[\backslash]0;1[\times]-1;0[$. La solution exacte est $\hat{\phi}(r,\theta) = r^{2/3} \sin(2\theta/3)$, exprimée en coordonnées cylindriques (r, θ) centrées sur (0, 0). Nous utilisons le mailleur Triangle décrit dans [104]. Sur un maillage donné, nous calculons la solution du schéma numérique, puis les estimateurs agrégés η_i , et demandons au mailleur un raffinement d'un triangle T_i par un facteur 4 en termes d'aire si $\eta_i \geq (\max_j \eta_j)/2$. Le mailleur Triangle ne va pas exactement raffiner un triangle T_i donné en 4 sous-triangles similaires, mais va faire en sorte que les aires des triangles dans la région de l'ancien T_i soient plus petites que $|T_i|/4$. Sur la Figure 7.6, nous avons tracé les courbes d'erreurs pour un raffinement uniforme et pour un raffinement adaptatif, en fonction du nombre de triangles dans le maillage primal. La courbe correspondant au raffinement uniforme est, comme attendu, parallèle à la courbe variant comme $I^{-1/3}$, tandis que la courbe correspondant au raffinement adaptatif est parallèle à la courbe variant comme $I^{-1/2}$, ce qui signifie que l'ordre optimal de convergence a été retrouvé. Finalement, nous traçons sur la Figure 7.7 les courbes d'efficacité pour le raffinement uniforme et le raffinement adaptatif. L'efficacité varie grossièrement entre 10 et 8 (hormis pour le maillage le plus grossier) dans le premier



FIG. 7.6 – Erreurs pour la solution singulière pour les raffinements uniforme et adaptatif.

cas, et semble tendre vers 7 dans le second.



FIG. 7.7 - Efficacités pour la solution singulière pour les raffinements uniforme et adaptatif.

Perspectives

Un certain nombre de travaux complémentaires à ceux présentés ici sont d'ores et déjà en cours. Ils concernent tout d'abord l'analyse numérique du schéma DDFV appliqué aux équations de Maxwell, comme présenté dans le chapitre 5. Cette analyse a été développée dans le cas où les champs électriques et magnétiques sont suffisamment réguliers [78], mais n'est pas valable dans le cas de champs singuliers tels que ceux rencontrés lorsque le domaine de calcul présente des coins rentrants. C'est un point fondamental à étudier, car il est fréquent de rencontrer ce type de singularités géométriques dans la pratique.

D'autre part, il a été remarqué dans [63] une superconvergence à l'ordre deux des gradients calculés par la méthode DDFV par rapport aux valeurs des gradients de la solution exacte aux points milieux des arêtes du maillage primal lorsque celui-ci est composé de triangles. Ceci entraîne une convergence à l'ordre un du Hessien de la solution. En plus d'une démonstration de ce résultat (avec les hypothèses minimales sur les données du problème pour l'obtenir), il serait utile d'en évaluer les implications sur la convergence à l'ordre deux en norme L^2 sur maillages triangulaires (voir la problématique de la quatrième partie de ce mémoire), ainsi que sur les applications potentielles en terme d'adaptation du maillage à la solution, à la fois pour l'anisotropie du maillage que pour son raffinement local (sur cette problématique, voir par exemple la thèse de Raphaël Kuate [73] et les références qui y sont citées).

Concernant l'analyse *a posteriori*, une adaptation des travaux de Martin Vohralík au schéma DDFV est en cours avec Amadou Mahamane [84], dans le but d'obtenir des estimateurs à la fois plus efficaces (efficacité proche de un) et robustes vis-à-vis des inhomogénéités du coefficient de diffusion. Enfin, dans le cadre de la thèse de Anh-Ha Le, nous avons entrepris l'analyse *a posteriori* du schéma DDFV pénalisé pour le problème de Stokes [71]. Quatrième partie

Convergence en norme L^2 des méthodes de volumes finis sur maillages admissibles pour l'équation de Laplace : ordre deux ou non ?

Chapitre 8

Étude en dimension un

Ce chapitre résume l'article [A3]. Nous montrons de façon simple que la convergence de l'erreur avec l'ordre deux en norme L^2 n'est pas toujours obtenue. Nous énonçons des conditions suffisantes sur le choix des points de contrôle dans les cellules et sur la régularité du second membre de l'équation de Laplace pour qu'il en soit ainsi. Nous donnons également des contre-exemples indiquant que lorsque les points de contrôle sont mal choisis, ou si le second membre n'est pas assez régulier, l'ordre deux est effectivement perdu.

8.1 Le schéma volume fini

Soit $\Omega =]0; 1[$ le domaine de calcul; soit f une fonction donnée dans $L^2(\Omega)$ et soit $\hat{\phi}$ la solution exacte de l'équation de Laplace avec conditions aux limites de Dirichlet homogènes :

$$\begin{cases} -\hat{\phi}'' = f \operatorname{dans} \Omega, \\ \hat{\phi}(0) = \hat{\phi}(1) = 0. \end{cases}$$
(8.1)

Pour construire la méthode de volumes finis, nous découpons $\overline{\Omega}$ en N segments nommés K_i et définis par $K_i := [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$ pour $i \in [1, N]_{\mathbb{N}}$ avec $x_{\frac{1}{2}} = 0 < x_{\frac{3}{2}} < \ldots < x_{N-\frac{1}{2}} < x_{N+\frac{1}{2}} = 1$. Nous définissons d'autre part

$$h = \sup_{i \in [1,N]_{\mathbb{N}}} x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}.$$
(8.2)

Dans chacun de ces intervalles, nous choisissons un point x_i , qui n'est pas nécessairement le milieu de K_i . Ensuite, nous construisons des cellules duales $K_{i+\frac{1}{2}}$ de la façon suivante : $K_{i+\frac{1}{2}} = [x_i, x_{i+1}]$ pour $i \in [0, N]_{\mathbb{N}}$, avec, par convention, $x_0 = 0$ et $x_{N+1} = 1$. Nous posons

$$h_{i+\frac{1}{2}} = \left| K_{i+\frac{1}{2}} \right| = x_{i+1} - x_i.$$

La méthode de volumes finis centrée sur les cellules définie par les équations (5.8)–(5.11) de [52] consiste à trouver un ensemble de valeurs $(\phi_i)_{i \in [0, N+1]_{\mathbb{N}}}$ vérifiant :

$$\begin{cases} -\frac{1}{h_{i}} \left(F_{i+1/2} - F_{i-1/2} \right) &= f_{i} , \forall i \in [1, N]_{\mathbb{N}}, \\ F_{i+1/2} &= \frac{1}{h_{i+1/2}} \left(\phi_{i+1} - \phi_{i} \right) , \forall i \in [0, N]_{\mathbb{N}}, \\ \phi_{0} &= \phi_{N+1} = 0, \end{cases}$$

$$(8.3)$$

où f_i est la valeur-moyenne de f sur K_i :

$$f_i = \frac{1}{h_i} \int_{K_i} f(x) \, dx \,. \tag{8.4}$$

L'analyse numérique de cette méthode est présentée dans [52, Théorème 6.1, Remarques 6.2, 6.3 et 6.4], voir aussi [76, 79]. Un résultat de convergence à l'ordre deux en norme L^{∞} ([53]) et en norme H_0^1 ([79]) peut être obtenu sous la condition suffisante que la solution exacte soit suffisamment régulière (C^4 dans [53] et H^3 dans [79]) lorsque l'on choisit comme points x_i les milieux des cellules K_i . Si ces conditions ne sont pas remplies, le seul résultat prouvé à notre connaissance est un résultat de convergence à l'ordre un dans les normes L^{∞} et H_0^1 discrètes. Nous pouvons aussi mentionner que les auteurs de [117] ont étudié la même méthode de volumes finis, mais avec des conditions aux limites de Neumann homogènes. Ce cas est beaucoup plus simple que celui que nous étudions ici, puisque la première équation de (8.3) avec la condition initiale $F_{1/2} = 0$ conduit évidemment à la valeur exacte de $F_{i+1/2}$ pour tout i; ensuite ϕ est calculé par la seconde équation de (8.3), et l'on peut aisément prouver, par des développements de Taylor, que c'est une approximation du second ordre de $\hat{\phi}(x_i)$ si x_j est le milieu de K_j pour tout j ou si $x_{j+1/2}$ est le milieu de $K_{j+1/2}$ pour tout $j \in [1, N - 1]_{\mathbb{N}}$.

8.2 Expression de l'erreur par fonctions de Green

Une expression exacte de l'erreur entre ϕ_i et $\hat{\phi}(x_i)$ peut être obtenue en introduisant les fonctions de Green continues et discrètes associées à l'équation de Laplace et à son approximation. Alors que ces outils ont été assez communément utilisés pour analyser les méthodes de type éléments finis, Galerkin ou Petrov-Galerkin, (voir, par exemple, [26, 29, 31, 44, 82, 96, 102, 112]) et dans le contexte des différences finies (voir, par exemple, [12, 16, 17, 19, 25, 49, 56, 85]), ils ont été en revanche assez peu utilisés, à notre connaissance, dans le contexte volumes finis. Le lecteur pourra par exemple consulter [83, 81] dans le cadre des volumes finis centrés sur les nœuds. Dans le cadre des volumes finis centrés sur les cellules, la seule autre référence que nous connaissons est un cours de Master par R. Eymard [51], où cet outil est employé sur des grilles régulières, le milieu de K_i étant choisi comme point x_i associé au segment.

Définition 8.1 Soit K_i une cellule, avec $i \in [1, N]_{\mathbb{N}}$. Définissons la fonction de Green g^i associée au point x_i :

$$\begin{cases} -(g^i)'' = \delta_{x_i} \operatorname{dans} \mathcal{D}'(\Omega), \\ g^i(0) = g^i(1) = 0. \end{cases}$$

Proposition 8.1 Il est immédiat de vérifier que l'expression de g^i est donnée par la formule suivante

$$g^{i}(x) = \begin{cases} (1-x_{i})x & \text{si } x \leq x_{i} \\ x_{i}(1-x) & \text{si } x \geq x_{i} \end{cases}$$
(8.5)

Définition 8.2 Définissons également la fonction de Green discrète $(G_j^i)_{j \in [0,N+1]_N}$ associée à K_i de la façon suivante, où nous notons par δ_j^i le symbole de Kronecker :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{h_j} \left(\frac{G_{j+1}^i - G_j^i}{h_{j+1/2}} - \frac{G_j^i - G_{j-1}^i}{h_{j-1/2}} \right) &= \frac{\delta_j^i}{h_j} , \ \forall j \in [1, N]_{\mathbb{N}} , \end{aligned} \tag{8.6} \\ G_0^i &= G_{N+1}^i = 0 . \end{aligned}$$

Proposition 8.2 L'expression de G^i est donnée par la formule suivante :

$$G_j^i = g^i(x_j), \, \forall j \in [0, N+1]_{\mathbb{N}},$$
(8.7)

où la fonction g^i est définie par (8.5).

Nous déduisons des expressions précédentes la formule exacte suivante pour l'erreur $\hat{\phi}(x_i) - \phi_i$

Proposition 8.3

$$\hat{\phi}(x_i) - \phi_i = \left(f, g^i - g^i_*\right)_{\Omega},$$
(8.8)

où la fonction constante par morceaux g^i_* est définie par

$$g_*^i(x) = G_j^i = g^i(x_j) \ , \forall x \in K_j \,, \forall j \in [1,N]_{\mathbb{N}} \,.$$

8.3 Ordre de convergence du schéma

La proposition 8.3 permet d'étudier l'erreur commise au point x_i et aussi l'erreur en norme L² discrète définies par

$$e_i := \left| \hat{\phi}(x_i) - \phi_i \right| , \ e = \left(\sum_{i=1}^N h_i \left| \hat{\phi}(x_i) - \phi_i \right|^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Nous avons les résultats suivants :

Proposition 8.4 Soit x_j^* le point milieu de K_j . Si $f \in H^1(\Omega)$ et s'il existe une constante C, indépendante du maillage, telle que $\forall j \in [1, N]_{\mathbb{N}}, |x_j - x_j^*| \leq Ch^2$, alors il existe une constante K, ne dépendant que de f, telle que

$$\forall i \in [1, N]_{\mathbb{N}}, e_i \leq Kh^2, \qquad (8.9)$$

$$e \leq Kh^2. \tag{8.10}$$

En effet, l'équation (8.8) peut également s'écrire

$$\hat{\phi}(x_i) - \phi_i = \left(f, g^i - g^i_*\right)_{\Omega} = \left(f - \Pi f, g^i - g^i_*\right)_{\Omega} + \left(\Pi f, g^i - g^i_*\right)_{\Omega} , \qquad (8.11)$$

où Πf est la projection L^2 de f sur le maillage :

$$(\Pi f)(x) = f_j, \, \forall x \in K_j, \, \forall j \in [1, N]_{\mathbb{N}}.$$

Puisque $f \in H^1(\Omega)$, $f - \Pi f$ est d'ordre un en norme L^2 . Par ailleurs, il est facile de déduire de l'expression exacte de g que $g^i - g^i_*$ est aussi d'ordre un en norme L^2 . Le premier terme du membre de droite de 8.11 est donc d'ordre deux. Par ailleurs, toujours selon l'expression exacte de g, l'intégrale de $g^i - g^i_*$ sur chaque intervalle K_j , avec $j \neq i$, peut être majorée en h^3 en raison de l'hypothèse effectuée sur le choix de x_j dans K_j ; enfin, l'intégrale de $g^i - g^i_*$ sur l'intervalle K_i est quant à elle d'ordre h^2 . Ces deux éléments permettent ensuite de conclure que le second terme du membre de droite de 8.11 est lui aussi d'ordre deux.

Une proposition semblable peut être obtenue en considérant la moyenne de f non plus sur les cellules primales K_j , mais sur les cellules duales $K_{j+\frac{1}{2}}$ et en suivant le même raisonnement :

Proposition 8.5 Si $f \in H^1(\Omega)$ et s'il existe une constante C, indépendante du maillage, telle que $\forall j \in [1, N-1]_{\mathbb{N}}, \left|x_{j+\frac{1}{2}} - \frac{x_j + x_{j+1}}{2}\right| \leq Ch^2$, alors il existe une constante K, ne dépendant que de f, telle que

$$\forall i \in [1, N]_{\mathbb{N}}, e_i \leq Kh^2, \qquad (8.12)$$

$$e \leq Kh^2. \tag{8.13}$$

Nous indiquons à présent des contre-exemples montrant que l'on peut perdre l'ordre deux lorsque l'une des conditions des propositions précédentes n'est plus vérifiée. Commençons par un cas pour lequel f est moins régulier que dans les propositions 8.4 et 8.5.

Proposition 8.6 Considérons un maillage composé de N segments identiques de longueur $h = \frac{1}{N}$ et choisissons les points x_j comme étant les milieux des segments

$$x_j = (j - 1/2) h$$
, $1 \le j \le N$

Soit de plus $\alpha \in]0; 1/2[$ et choisissons $f(x) = x^{-\alpha}$. (Bien sûr, $f \in L^2(\Omega)$ mais $f \notin H^1(\Omega)$). Soit enfin $x_* \in]0; 1[$, fixé indépendemment du maillage, et notons N_* l'entier tel que $N_*h \leq x_* < (N_*+1)h$. Supposons que h est suffisamment petit pour que $N_* \geq 2$. Alors, il existe K > 0 ne dépendant que de α et x_* , tel que pour tout h suffisamment petit petit

$$e_i \geq Kh^{2-\alpha} , \quad \forall i \in [2, N_*]_{\mathbb{N}} ,$$

$$(8.14)$$

$$e \geq Kh^{2-\alpha}. \tag{8.15}$$

Continuons par un cas pour lequel f est régulier, mais pour lequel les points x_j ne sont pas correctement choisis dans les K_j .

Proposition 8.7 Sur des maillages généraux, et même si f est régulier, nous pouvons ne pas avoir de meilleure estimation que

$$F(x_i)h \le e_i \le Kh, \qquad (8.16)$$

$$C_1 h \le e \le C_2 h, \qquad (8.17)$$

où les constantes K, C_1 et C_2 et la fonction F sont indépendantes du maillage.

Pour montrer les inégalités de gauche, considérons à présent l'exemple suivant : le maillage consiste en N = 2P segments identiques de longueur $h = \frac{1}{2P}$ et nous choisissons les points x_j de la façon suivante

$$x_j = \begin{cases} (j - \frac{3}{4})h & \text{si} \quad j \le P \\ \\ (j - \frac{1}{4})h & \text{si} \quad j > P \end{cases}$$

De plus, choisissons la fonction f suivante :

$$f(x) = 1 \quad \forall x \in \Omega \,,$$

et nous avons donc $\hat{\phi}(x) = \frac{1}{2}(1-x)x$.

Nous trouvons l'expression suivante pour ϕ_i :

$$\begin{split} \phi_i &= \frac{1}{2}(1-x_i)x_i - \frac{h}{4}x_i + \frac{3}{32}h^2 \\ &= \hat{\phi}(x_i) - \frac{h}{4}x_i + \frac{3}{32}h^2 \ , \ \forall i \in [1,P]_{\mathbb{N}}. \end{split}$$

C'est-à-dire

$$e_i = x_i h \left| \frac{1}{4} - \frac{3}{8(4i-3)} \right| \ge x_i \frac{h}{8} , \quad \forall i \in [1, P]_{\mathbb{N}}.$$

D'autre part,

$$\begin{split} \phi_i &= \frac{1}{2}(1-x_i)x_i - \frac{h}{4}(1-x_i) + \frac{3}{32}h^2 \\ &= \hat{\phi}(x_i) - \frac{h}{4}(1-x_i) + \frac{3}{32}h^2 \ , \ \forall i \in [P+1,2P]_{\mathbb{N}} \ , \end{split}$$

ce qui implique

$$\left| \hat{\phi}(x_i) - \phi_i \right| \ge (1 - x_i) \frac{h}{8} , \quad \forall i \in [P + 1, 2P]_{\mathbb{N}}.$$

Ceci permet d'obtenir les inégalités de gauche dans (8.16) et (8.17).

Chapitre 9

Etude en dimension deux, sur maillages triangulaires et de Voronoi associés

Je résume dans ce chapitre l'article [A1] dans lequel je m'intéresse, pour l'équation de Laplace, à l'analyse de la convergence en norme $L^2(\Omega)$ de la méthode de volumes finis centrée sur les cellules, lorsque les cellules sont des triangles (les T_i du paragraphe 3.1), et que le point de contrôle (le point G_i) associé à l'un de ces triangles est le centre de son cercle circonscrit (schéma dit "VF4", voir [52, Exemple 9.1] et [109]), et de la méthode de volumes finis centrée sur les nœuds, lorsque les cellules sont les cellules de Voronoi (les P_k) associées aux sommets (les S_k) des triangles (voir [52, Exemple 9.2] et [86]). On pourra se référer à la figure 3.3 page 41 pour les notations.

Sans pouvoir répondre à la question posée séparément pour chacun des deux schémas, nous montrons qu'une combinaison adéquate des solutions de ces deux schémas converge à l'ordre deux, lorsque le domaine de calcul est bidimensionnel polygonal convexe, sous la condition suffisante que la donnée de l'équation de Laplace soit dans $H^1(\Omega)$, et sous une condition sur les angles des triangles. Pour cela, et en lien avec les schémas DDFV de la deuxième partie de ce document, nous considérons la fonction P^1 par cellule diamant dont les valeurs sont définies à partir des valeurs des solutions numériques des deux schémas par la Définition 3.6. Le résultat principal de ce chapitre est le suivant

Théorème 9.1 Soit Ω un domaine polygonal convexe bidimensionnel. Soit $\hat{\phi}$ la solution exacte de l'équation $-\Delta \hat{\phi} = f$ dans Ω , avec des conditions de Dirichlet homogènes. Soit $\phi = ((\phi_i^T), (\phi_k^P)) \in \mathbb{R}^{I+J^{\Gamma}} \times \mathbb{R}^K$ la solution des schémas volumes finis (9.1)– (9.6) ci-dessous, et soit ϕ_h la fonction associée à ϕ par la définition 3.6. Alors, sous l'hypothèse 9.1 et si $f \in H^1(\Omega)$, il existe une constante C ne dépendant que de Θ^* , telle que

$$\left\| \hat{\phi} - \phi_h \right\|_{L^2(\Omega)} \le Ch^2 \left\| f \right\|_{H^1(\Omega)}$$

Nous formulerons une hypothèse concernant le maillage, qui est la suivante

Hypothèse 9.1 Nous supposons qu'il existe un angle $\Theta^* > 0$, ne dépendant pas de h, tel que tous les angles de tous les triangles du maillage soient inférieurs ou égaux à $\pi/2 - \Theta^*$.

Remarque 9.1 Cette hypothèse nous permet de majorer de façon indépendante de h certaines quantités géométriques liées aux cellules primales et aux cellules diamants. En particulier, cela implique que toutes les cellules-diamants sont convexes, et que le point 2. de l'hypothèse 6.1 est vérifié avec un angle θ^* qui ne dépend que de Θ^* , le point 1. de cette hypothèse étant trivialement vérifié compte tenu, ici, de l'orthogonalité des arêtes primales et duales.

9.1 Les deux schémas volumes finis

Nous renvoyons au paragraphe 3.1 pour ce qui est des notations employées dans ce chapitre. Le premier schéma est centré sur les triangles T_i , et ses inconnues sont les ϕ_i^T associés à ces triangles, ainsi qu'aux milieux des arêtes situées sur la frontière Γ . Il s'écrit

$$-\frac{1}{|T_i|} \sum_{j \in \partial T_i} F_{i,j} = (\bar{f})_i^T , \forall i \in [1, I],$$
(9.1)

avec les flux

$$F_{i,j} = |A_j| \frac{(\phi_{i_2(j)} - \phi_{i_1(j)})}{|A'_j|} \mathbf{n}_j \cdot \mathbf{n}_{ji} .$$
(9.2)

Le second schéma est centré sur les nœuds S_k (ou, de façon équivalente, sur les polygones de Voronoi P_k), et ses inconnues sont les ϕ_k^P associés, et s'écrit

$$-\frac{1}{|P_k|} \sum_{j \in \partial P_k} F_{k,j} = (\bar{f})_k^P , \forall k \notin \Gamma ,$$
(9.3)

avec les flux

$$F_{k,j} = |A'_j| \frac{(\phi_{k_2(j)} - \phi_{k_1(j)})}{|A_j|} \mathbf{n}'_j \cdot \mathbf{n}'_{jk} .$$
(9.4)

Notons que les flux sur les arêtes $\partial P_k \cap \partial \Omega$ n'entrent pas dans la définition du second schéma, puisque (9.3) n'est écrit que pour les cellules duales intérieures. Dans (9.2), nous posons

$$\phi_{i_2(j)}^T = 0 \text{ si } j \in \Gamma , \qquad (9.5)$$

en raison des conditions aux limites de Dirichlet homogènes (nous rappelons que si $j \in \partial T_i \cap \Gamma$ alors $i_1(j) = i$). Ces mêmes conditions fournissent

$$\phi_k^P = 0 , \forall k \in \Gamma .$$
(9.6)

Dans (9.1) et (9.3), les membres de droite sont les valeurs moyennes de f sur les T_i et les P_k (voir la formule (4.8)).

Il est aisé de constater, compte tenu de l'orthogonalité des maillages et des formules (3.5), (3.6) et (3.9), que les schémas ci-dessus peuvent se combiner de façon équivalente sous la forme d'un seul et même schéma DDFV (4.6)–(4.9) en tenant compte du fait que $\Gamma_N = \emptyset$ et que la donnée de Dirichlet ϕ_d est nulle. Nous avons vu à l'occasion de l'analyse numérique a priori du schéma DDFV que la fonction ϕ_h associée aux inconnues (ϕ_i^T, ϕ_k^P) par la définition 3.6 vérifie la formulation variationnelle (4.17) avec ici $\Gamma_N = \emptyset$. Afin d'étudier l'erreur en norme L^2 entre ϕ_h et $\hat{\phi}$, reprenons l'argument de dualité classique (6.23). Nous pourrions utiliser la formule (6.26) que nous avons obtenue et utilisée dans le paragraphe 6.3. Cependant, nous pouvons donner une autre formule de représentation de l'erreur :

Proposition 9.1 Soit $\psi = ((\psi_i^T), (\psi_k^P))$ donné dans $\mathbb{R}^{I+J^{\Gamma}} \times \mathbb{R}^K$ tel que $\psi_i^T = 0$ si $i \in \Gamma$ et $\psi_k^P = 0$ si $k \in \Gamma$, et soit ψ_h la fonction associée à ψ par la définition 3.6. On a

la formule

$$\int_{\Omega} (\phi_h - \hat{\phi}) v(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = a_h (\phi_h - \hat{\phi}, \hat{\psi} - \psi_h) - \int_{\Omega} f(\psi_h - \psi_h^*) (\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$
$$- \sum_{D_j} \int_{\partial D_j} \nabla \hat{\phi} \cdot \mathbf{n} \psi_h d\sigma$$
$$- \sum_{D_j} \int_{\partial D_j} (\phi_h - \hat{\phi}) \nabla \hat{\psi} \cdot \mathbf{n} d\sigma.$$
(9.7)

9.2 Estimation de l'erreur

Dans la proposition 9.1, l'élément ψ est arbitraire. Nous choisissons ici les valeurs de ψ comme étant les solutions des méthodes de volumes finis associées à l'équation de Laplace vérifiée par $\hat{\psi}$, l'une centrée sur les cellules du maillage triangulaire et l'autre sur les cellules de Voronoi. C'est-à-dire que dans les équations (9.1)–(9.6), nous remplaçons ϕ par ψ et f par la fonction v de (6.24). En particulier, deux points seront importants dans ce qui suit. Tout d'abord, puisque $\hat{\psi}$ est dans $H^2(\Omega)$, nous pouvons appliquer l'estimation d'erreur (6.21), dans laquelle nous remplaçons $\hat{\phi}$ et ϕ_h par $\hat{\psi}$ et ψ_h , et dans laquelle τ^* ne dépend que de Θ^* , compte tenu la proposition 6.1 et de la remarque 9.1. De la sorte, en prenant en compte (6.25), on a

$$\left|\hat{\psi} - \psi_h\right|_{1,h} \le Ch \, \|v\|_{L^2(\Omega)} ,$$
(9.8)

avec une constante C ne dépendant que de Θ^* . De plus, il est clair à partir de la définition (3.9) et à partir de (9.1) et (9.2) appliquées à ψ et à v, que ψ_h vérifie

$$-\sum_{j\in\partial T_i} |A_j| \nabla_h \psi_h \cdot \mathbf{n}_{ji} = \int_{T_i} v(\mathbf{x}) d\mathbf{x} , \, \forall i \in [1, I] \,.$$

$$(9.9)$$

Nous pouvons à présent procéder à l'estimation des différents termes de (9.7). Compte tenu des estimations (6.21) et (9.8), le premier terme est aisément estimé.

Lemme 9.1 Il existe une constante C ne dépendant que de Θ^* , telle que

$$\left| a_h(\phi_h - \hat{\phi}, \hat{\psi} - \psi_h) \right| \le Ch^2 \| f \|_{L^2(\Omega)} \| v \|_{L^2(\Omega)} .$$
(9.10)

La technique utilisée pour évaluer les deux derniers termes dans la formule (9.7) est classique et remonte à [38]. Ces deux termes proviennent de la non conformité de l'espace discret sur lequel est écrit la formulation variationnelle discrète. Tout comme dans [38], on peut montrer qu'ils sont d'ordre deux sur la base de deux arguments : les fonctions de l'espace sont P^1 continues aux milieux des arêtes des cellules diamants et s'annulent sur la frontière du domaine, d'une part, et les fonctions $\hat{\phi}$ et $\hat{\psi}$ sont dans H^2 et leurs gradients normaux ne présentent donc pas de saut sur les arêtes des cellules diamants, d'autre part.

Lemme 9.2 Il existe une constante C ne dépendant que de Θ^* , telle que

$$\left|\sum_{D_j} \int_{\partial D_j} (\phi_h - \hat{\phi}) \,\nabla \hat{\psi} \cdot \mathbf{n} \, d\sigma\right| \le Ch^2 \, \|f\|_{L^2(\Omega)} \, \|v\|_{L^2(\Omega)} \, . \tag{9.11}$$

Lemme 9.3 Il existe une constante C ne dépendant que de Θ^* , telle que

$$\left|\sum_{D_j} \int_{\partial D_j} \nabla \hat{\phi} \cdot \mathbf{n} \, \psi_h \, d\sigma\right| \le Ch^2 \, \|f\|_{L^2(\Omega)} \, \|v\|_{L^2(\Omega)} \, . \tag{9.12}$$

A présent, le terme restant à évaluer dans (9.7) est celui venant du fait que (4.17) n'est pas une véritable méthode d'éléments finis. Nous définissons tout d'abord les fonctions suivantes

Définition 9.1 Soit $\psi = ((\psi_i^T), (\psi_k^P))$ donné dans $\mathbb{R}^{I+J^{\Gamma}} \times \mathbb{R}^K$, nous définissons ψ_h^T et ψ_h^P par

$$\psi_{h|T_i}^T(\mathbf{x}) := \frac{\psi_i^T}{2} , \, \forall \mathbf{x} \in T_i , \, \forall i , \qquad (9.13)$$

$$\psi_{h|P_k}^P(\mathbf{x}) := \frac{\psi_k^P}{2} , \ \forall \mathbf{x} \in P_k , \ \forall k .$$
(9.14)

Par ailleurs, dans chaque cellule-diamant D_j , nous définissons \mathbf{M}_j comme le point milieu de l'arête A_j (voir figure 3.3 page 3.3)

Définition 9.2 Soit $\psi = ((\psi_i^T), (\psi_k^P))$ donné dans $\mathbb{R}^{I+J^{\Gamma}} \times \mathbb{R}^K$, nous définissons ψ_h^1 et ψ_h^2 par

$$\psi_h^1(\mathbf{x})_{|D_j} := \frac{|A'_{j1}|\psi_{i_2(j)}^T + |A'_{j2}|\psi_{i_1(j)}^T}{2|A'_j|} + (\mathbf{x} - \mathbf{M}_j) \cdot \left(\frac{\psi_{i_2(j)}^T - \psi_{i_1(j)}^T}{|A'_j|}\right) \mathbf{n}_j, \forall \mathbf{x} \in D_j \quad (9.15)$$

et

$$\psi_h^2(\mathbf{x})_{|D_j} := \frac{\psi_{k_1(j)}^P + \psi_{k_2(j)}^P}{4} + (\mathbf{x} - \mathbf{M}_j) \cdot \left(\frac{\psi_{k_2(j)}^P - \psi_{k_1(j)}^P}{|A_j|}\right) \mathbf{n}_j', \,\forall \mathbf{x} \in D_j \,. \tag{9.16}$$

Avec ces définitions, nous avons

Lemme 9.4

$$\psi_h - \psi_h^* = \left(\psi_h^1 - \psi_h^T\right) + \left(\psi_h^2 - \psi_h^P\right) \,. \tag{9.17}$$

Cette égalité permet de décomposer $\psi_h - \psi_h^*$ en une fonction dont la variation est dans la direction de l'arête primale et une fonction dont la variation est dans la direction de l'arête duale. Ces deux contributions vont être estimées séparément. Avec ces définitions, le terme restant à évaluer dans (9.7) s'écrit

$$\int_{\Omega} f\left(\psi_{h} - \psi_{h}^{*}\right) \left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \left(f - f_{h}^{T}\right) \left(\psi_{h}^{1} - \psi_{h}^{T}\right) \left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} f_{h}^{T} \left(\psi_{h}^{1} - \psi_{h}^{T}\right) \left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \left(f - f_{h}^{D}\right) \left(\psi_{h}^{2} - \psi_{h}^{P}\right) \left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x}$$
(9.18)
+
$$\int_{\Omega} f_{h}^{D} \left(\psi_{h}^{2} - \psi_{h}^{P}\right) \left(\mathbf{x}\right) d\mathbf{x},$$

où les projections L^2 suivantes ont été utilisées :

$$f_h^T(\mathbf{x}) = (\bar{f})_i^T , \ \forall \mathbf{x} \in T_i , \ \forall i$$
(9.19)

Mémoire d'habilitation à diriger des recherches

Pascal Omnes

99

$$f_h^D(\mathbf{x}) = \frac{1}{|D_j|} \int_{D_j} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \ , \ \forall \mathbf{x} \in D_j \ , \forall D_j.$$

Nous allons tout d'abord donner une majoration des premier et troisième termes du membre de droite de (9.18). La régularité de f permet d'estimer $f - f_h^T$ et $f - f_h^D$. De plus, le fait que $\psi_{h|T_i}^T$ interpole $\psi_{h|D_j}^1$ au milieu du segment $[G_iM_j]$ lorsque A_j est une arête de T_i permet d'estimer $\psi_h^1 - \psi_h^T$. De même, le fait que $\psi_{h|P_k}^P$ interpole $\psi_{h|D_j}^2$ au milieu du segment $[S_kM_j]$ lorsque S_k est un sommet de A_j permet d'estimer $\psi_h^2 - \psi_h^P$. Nous avons donc le lemme suivant

Lemme 9.5 Il existe une constante C, ne dépendant pas du maillage, telle que

$$\left| \int_{\Omega} \left(f - f_h^T \right) \left(\psi_h^1 - \psi_h^T \right) \left(\mathbf{x} \right) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \left(f - f_h^D \right) \left(\psi_h^2 - \psi_h^P \right) \left(\mathbf{x} \right) d\mathbf{x} \right| \le (9.20)$$
$$Ch^2 \left\| f \right\|_{H^1(\Omega)} \left\| v \right\|_{L^2(\Omega)}.$$

A présent, le dernier terme de l'égalité (9.18) est facile à évaluer :

Lemme 9.6 On a

$$\int_{\Omega} f_h^D \left(\psi_h^2 - \psi_h^P \right) \left(\mathbf{x} \right) d\mathbf{x} = 0.$$
(9.21)

La preuve de ce lemme est basée sur le fait que la fonction $\psi_h^2 - \psi_h^P$ est impaire si l'on prend comme origine le milieu de l'arête primale, et que la cellule diamant est symétrique par rapport à l'arête duale.

Finalement, il reste à évaluer le deuxième terme dans le membre de droite de (9.18). Le lemme suivant sera utile pour cela :

Lemme 9.7 Soit R_i le rayon du cercle circonscrit au triangle T_i . On a

$$\int_{\Omega} f_h^T \left(\psi_h^1 - \psi_h^T \right) (\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \sum_i (\bar{f})_i^T \frac{R_i^2}{12} \sum_{j \in \partial T_i} |A_j| \nabla_h \psi_h \cdot \mathbf{n}_{ji} - \frac{1}{48} \sum_i (\bar{f})_i^T \sum_{j \in \partial T_i} |A_j|^3 \nabla_h \psi_h \cdot \mathbf{n}_{ji}.$$
(9.22)

La preuve de ce lemme est basée sur le fait que

$$\int_{D_j \cap T_i} \left(\psi_h^1 - \frac{\psi_i^T}{2} \right) \left(\mathbf{x} \right) d\mathbf{x} = \frac{(G_i M_j)^2 |A_j|}{12} \nabla_h \psi_h \cdot \mathbf{n}_{ji}$$

et que $(G_i M_j)^2 = R_i^2 - \frac{|A_j|^2}{4}$ (voir Figure 3.3 page 41). A présent, nous pouvons borner le premier terme du membre de droite de (9.22).

Lemme 9.8 Il existe une constante C telle que

$$\left|\sum_{i} (\bar{f})_{i}^{T} \frac{R_{i}^{2}}{12} \sum_{j \in \partial T_{i}} |A_{j}| \nabla_{h} \psi_{h} \cdot \mathbf{n}_{ji} \right| \le Ch^{2} \|f\|_{L^{2}(\Omega)} \|v\|_{L^{2}(\Omega)} .$$
(9.23)

Ceci est dû au fait que ψ a été choisi de telle sorte que l'on ait (9.9). Enfin,

Lemme 9.9 Sous l'hypothèse 9.1 et si $f \in H^1(\Omega)$, il existe une constante C, ne dépendant que de Θ^* , telle que

$$\left| \frac{1}{48} \sum_{i} (\bar{f})_{i}^{T} \sum_{j \in \partial T_{i}} |A_{j}|^{3} \nabla_{h} \psi_{h} \cdot \mathbf{n}_{ji} \right| \leq Ch^{2} \|f\|_{H^{1}(\Omega)} \|v\|_{L^{2}(\Omega)} .$$
(9.24)

La preuve de ce lemme est fondée sur la réorganisation suivante de cette somme. Rappelons que pour tout $j \notin \Gamma$, on a $\nabla_h \psi_h \cdot \mathbf{n}_{ji_1(j)} = -\nabla_h \psi_h \cdot \mathbf{n}_{ji_2(j)} = \nabla_h \psi_h \cdot \mathbf{n}_j$. Donc,

$$\sum_{i} (\bar{f})_{i}^{T} \sum_{j \in \partial T_{i}} |A_{j}|^{3} \nabla_{h} \psi_{h} \cdot \mathbf{n}_{ji} = \sum_{j \notin \Gamma} |A_{j}|^{3} \left[(\bar{f})_{i_{1}(j)}^{T} - (\bar{f})_{i_{2}(j)}^{T} \right] \nabla_{h} \psi_{h} \cdot \mathbf{n}_{j} + \sum_{j \in \Gamma} |A_{j}|^{3} (\bar{f})_{i_{1}(j)}^{T} \nabla_{h} \psi_{h} \cdot \mathbf{n}_{j} .$$

$$(9.25)$$

D'autre part, il est possible de montrer que puisque f est dans $H^1(\Omega)$, alors on a

$$\sum_{j \notin \Gamma} \left[(\bar{f})_{i_1(j)}^T - (\bar{f})_{i_2(j)}^T \right]^2 \le C \, \|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Par l'inégalité de Cauchy-Schwarz discrète, et par stabilité de $|\psi_h|_{1,h}$ vis-à-vis de la norme L^2 de v, le premier terme du membre de droite de (9.25) est majoré par

$$\left| \sum_{j \notin \Gamma} |A_j|^3 \left[(\bar{f})_{i_1(j)}^T - (\bar{f})_{i_2(j)}^T \right] \nabla_h \psi_h \cdot \mathbf{n}_j \right| \le Ch^2 \|f\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{L^2(\Omega)} .$$
(9.26)

Enfin, en notant B_h la portion de domaine autour de Γ qui contient tous les T_i tels que $|\partial T_i \cap \Gamma| \neq \emptyset$, on obtient

$$\left| \sum_{j \in \Gamma} |A_j|^3 (\bar{f})_{i_1(j)}^T \nabla_h \psi_h \cdot \mathbf{n}_j \right| \le Ch \, \|\nabla_h \psi_h\|_{L^2(B_h)} \, \|f\|_{L^2(B_h)} \, . \tag{9.27}$$

Notons que la portion de domaine B_h est incluse dans une bande de largeur au plus hautour de Γ , ce qui permet de conclure, à l'aide de l'inégalité de Ilin (voir, par exemple, [22, Formule (2.2)]), et puisque $\hat{\psi} \in H^2(\Omega)$ et que nous avons supposé que f appartient à $H^1(\Omega)$:

$$\left\|\nabla\hat{\psi}\right\|_{L^{2}(B_{h})} \leq Ch^{1/2} \left\|\hat{\psi}\right\|_{H^{2}(\Omega)} \quad \text{et} \quad \|f\|_{L^{2}(B_{h})} \leq Ch^{1/2} \,\|f\|_{H^{1}(\Omega)}$$

Ceci implique, par une inégalité triangulaire, l'estimation d'erreur (9.8) et la stabilité (6.25) de $\hat{\psi}$ vis-à-vis de v, que (9.27) peut être transformé en

$$\left| \sum_{j \in \Gamma} |A_j|^3 (\bar{f})_{i_1(j)}^T \nabla_h \psi_h \cdot \mathbf{n}_j \right| \le Ch^2 \, \|f\|_{H^1(\Omega)} \, \|v\|_{L^2(\Omega)} \,. \tag{9.28}$$

Le théorème 9.1 s'obtient en rassemblant (6.23), (9.7), (9.10), (9.11), (9.12), (9.18), (9.20), (9.21), (9.22), (9.23) et (9.24).

101

Perspectives

L'objectif de cette étude était de déterminer sous quelles conditions un schéma de type volumes finis centré sur les cellules pouvait fournir des valeurs approchées de la fonction inconnue convergeant à l'ordre deux en norme L^2 . Si l'on peut considérer que cet objectif a été atteint en une dimension d'espace, ce n'est pas le cas en dimensions supérieures. En particulier, la convergence à l'ordre deux de la fonction ϕ_h , associée aux inconnues centrées sur les triangles et centrées sur les polygones de Voronoi par la définition 3.6 page 43, n'implique pas la convergence en norme L^2 discrète de ces inconnues vers les valeurs ponctuelles de la solution exacte. Il est en effet aisé de constater qu'on ne change pas les valeurs de la fonction ϕ_h si l'on ajoute une même constante arbitraire aux valeurs sur les nœuds et qu'on la soustrait aux valeurs aux centres des triangles, la fonction ϕ_h étant définie par les demi-sommes des valeurs aux centres et aux nœuds. Un effort doit donc être poursuivi dans ce sens.

Par ailleurs, en lien avec les perspectives de la troisième partie de ce document, il conviendrait d'examiner l'impact que pourrait avoir la démonstration éventuelle de la convergence à l'ordre deux en norme discrète du gradient de la solution calculée par DDFV sur des triangles généraux. Il suffirait alors peut-être d'appliquer des techniques de type inégalité de Poincaré discrète [52, Lemme 9.1] pour obtenir la convergence à l'ordre deux en norme L^2 discrète de la solution calculée vers les valeurs ponctuelles de la solution exacte.

Travaux présentés dans ce mémoire

- [A1] P. Omnes, On the second-order convergence of a function reconstructed from finite volume approximations of the Laplace equation on Delaunay-Voronoi meshes. *ESAIM :M2AN*, 45, pp. 627–650, 2011.
- [A2] S. Dellacherie, P. Omnes and F. Rieper, The influence of cell geometry on the Godunov scheme applied to the linear wave equation. J. Comput. Phys. 229, pp. 5315-5338, 2010.
- [A3] P. Omnes, Error estimates for a finite volume for the Laplace equation in dimension one through discrete Green functions. *International Journal on Finite Volumes* 6 (1), 18p., electronic only, 2009.
- [A4] P. Omnes, Y. Penel and Y. Rosenbaum, A posteriori error estimation for the discrete duality finite volume discretization of the Laplace equation. SIAM J. Numer. Anal. 47, pp. 2782–2807, 2009.
- [A5] F. Hermeline, S. Layouni and P. Omnes, A finite volume method for the approximation of Maxwell's equations in two space dimensions on arbitrary meshes. J. Comput. Phys. 227, pp. 9365–9388, 2008.
- [A6] S. Delcourte, K. Domelevo and P. Omnes, A discrete duality finite volume approach to Hodge decomposition and div-curl problems on almost arbitrary twodimensional meshes. SIAM J. Numer. Anal. 45, pp. 1142–1174, 2007.
- [A7] K. Domelevo and P. Omnes, A finite volume method for the Laplace equation on almost arbitrary two-dimensional grids. ESAIM :M2AN, 39, pp. 1203–1249, 2005.
- [A8] C.-D. Munz, P. Omnes and R. Schneider, A three-dimensional finite-volume solver for the Maxwell equations with divergence cleaning on unstructured meshes. *Comput. Phys. Commun.* 130, pp. 83–117, 2000; erratum ibid. 135, p. 260, 2001.
- [P1] C.-D. Munz, P. Omnes and R. Schneider, Enforcing Gauss' law in computational electromagnetics within a finite-volume framework. Hyperbolic problems : theory, numerics, applications, Vol. I, II (Magdeburg, 2000), Internat. Ser. Numer. Math., 140, 141, Birkhäuser, Basel, pp. 755–764, 2001.
- [A9] C.-D. Munz, P. Omnes, R. Schneider, E. Sonnendrücker and U. Voss, Divergence correction techniques for Maxwell solvers based on a hyperbolic model. J. Comput. Phys. 161, pp. 484–511, 2000.

Autres travaux de l'auteur (Mai 2010)

- [P2] P. Omnes, Numerical solution of elliptic equations by a hybrid diamond/discrete duality finite volume scheme. In Proceedings of the third international conference on approximation methods and numerical modelling in environment and natural resources, Mamern'09. B. Amaziane et al. eds, Editorial Universidad de Granada, pp. 731-736, 2009.
- [P3] P. Omnes, An a posteriori error bound for the discrete duality finite volume discretization of the Laplace equation and application to the adaptive simulation in a domain with a crack. In *Proceedings of the 5th International Symposium on Finite Volumes for Complex Applications*, R. Eymard and J.-M. Hérard Eds., ISTE and Wiley & Sons, pp. 617–624, 2008.
- [P4] P. Omnes, Benchmark on anisotropic problems. Tests with the discrete duality finite volume method. In Proceedings of the 5th International Symposium on Finite Volumes for Complex Applications, R. Eymard and J.-M. Hérard Eds., ISTE Ltd and John Wiley & Sons, pp. 919–934, 2008.
- [A10] P. Omnes, Numerical and physical comparisons of two models of a gas centrifuge. Computers & Fluids 36, pp. 1028–1039, 2007.
- [P5] S. Delcourte, K. Domelevo and P. Omnes, Discrete duality finite volume method for second order elliptic problems. in *Proceedings of the 4th International Symposium on Finite Volumes for Complex Applications*, F. Benkhaldoun, D. Ouazar and S. Raghay Eds., Hermes Science publishing, pp. 447–458, 2005.
- [A11] P. Omnes, Dielectric conductivity of a bounded plasma and its rate of convergence towards its infinite geometry value. Journal of Plasma Physics 69, pp. 449–463, 2003.
- [A12] P. Omnes and P. Louvet, Self-consistent numerical simulation of isotope separation by selective ion cyclotron resonance heating in a magnetically confined plasma. Journal of Computational Physics 172, pp. 326–347, 2001.
- [P6] C.-D. Munz, P. Omnes and R. Schneider, A Godunov-type solver for the Maxwell equations with divergence cleaning, in Toro, E. F. (ed.), Godunov methods. Theory and applications. International conference, Oxford, GB, October 1999. New York, NY : Kluwer Academic/ Plenum Publishers, pp. 647-654, 2001.
- [P7] C.-D. Munz, P. Omnes, R. Schneider, E. Sonnendrücker, E. Stein, U.Voß and T. Westermann, KADI2D A Particle in Cell Code based on Finite-Volume Methods. In Proceedings of the 12th International Conference on High-Power Particle Beams (BEAMS'98), Haifa, Israel, M. Markovits & J. Shiloh Eds, pp. 541–544, 1998.

Bibliographie générale

- G. Acosta and R.G. Durán, The maximum angle condition for mixed and nonconforming elements : application to the Stokes equations. SIAM J. Numer. Anal. 37, pp. 18–36, 1999.
- [2] A. Agouzal and F. Oudin, A posteriori error estimator for finite volume methods. *Appl. Math. Comput.* **110**, pp. 239–250, 2000.
- [3] M. Ainsworth, Robust a posteriori error estimation for nonconforming finite element approximation. SIAM J. Numer. Anal. 42, pp. 2320–2341, 2005.
- [4] M. Ainsworth and J.T. Oden, A posteriori error estimation in finite element analysis. Pure and Applied Mathematics, Wiley-Interscience, New York, 2000.
- [5] B. Andreianov, F. Boyer and F. Hubert, Discrete duality finite volume schemes for Leray-Lions-type elliptic problems on general 2D meshes. *Numer. Methods Partial Differ. Equations* 23, pp. 145–195, 2007.
- [6] D. N. Arnold and R. S. Falk, A uniformly accurate finite element method for the Reissner-Mindlin plate. SIAM J. Numer. Anal. 26, pp. 1276–1290, 1989.
- [7] Assous F., Degond P., Heintze E., Raviart P.-A. and Segré J., On a finite-element method for solving the three-dimensional Maxwell equations. J. Comput. Phys. 109, pp. 222–237, 1993.
- [8] I. Babuska and A.K. Aziz, On the angle condition in the finite element method. SIAM J. Numer. Anal. 13, pp. 214–226, 1976.
- [9] I. Babuska and T. Strouboulis, The finite element method and its reliability. Oxford, Clarendon Press, 2001.
- [10] R. Barthelmé, Le problème de conservation de la charge dans le couplage des équations de Vlasov et de Maxwell, Thèse de l'Université Louis Pasteur, Strasbourg, 2005.
- [11] A. Bergam, Z. Mghazli, R. Verfürth, Estimations a posteriori d'un schéma de volumes finis pour un problème non linéaire. Numer. Math. 95, pp. 599-624, 2003.
- [12] W.-J. Beyn, Discrete Green's functions and strong stability properties of the finite difference method. Appl. Anal. 14, pp. 73–98, 1982.
- [13] Birdsall C.K., and Langdon A.B., Plasma Physics via Computer Simulation. McGraw-Hill, New-York, 1985.
- [14] S. Boivin, F. Cayré and J.-M. Hérard, A finite volume method to solve the Navier-Stokes equations for incompressible flows on unstructured meshes. Int. J. Therm. Sci. 39, pp. 806–825, 2000.
- [15] Boris J.P., Relativistic Plasma Simulations Optimization of a Hybrid Code. Proc. 4th Conf. on Num. Sim. of Plasmas, pp. 3–67, NRL Washington, Washington DC, 1970.

- [16] J.H. Bramble and B.E. Hubbard, On the formulation of finite difference analogues of the Dirichlet problem for Poisson's equation. *Numer. Math.* 4, pp. 313–327, 1962.
- [17] J.H. Bramble, B.E. Hubbard and M. Zlamal, Discrete analogues of the Dirichlet problem with isolated singularities. SIAM J. Numer. Anal. 5, pp. 1–25, 1968.
- [18] J. H. Bramble and J. E. Pasciak, A new approximation technique for div-curl systems. Math. Comp. 73, pp. 1739–1762, 2004.
- [19] J.H. Bramble and V. Thomée, Pointwise bounds for discrete Green's functions. SIAM J. Numer. Anal. 6, pp. 582–590, 1969.
- [20] F. Brezzi and J. Pitkäranta, On the stabilization of finite element approximations of the Stokes equations. In *Efficient solutions of elliptic systems* (Kiel, 1984), volume 10 of Notes Numer. Fluid Mech., pp. 11–19. Vieweg, Braunschweig, 1984.
- [21] C. Carstensen and S. Funken, Constants in Clément-interpolation error and residual based a posteriori estimates in finite element methods. East-West J. Numer. Math. 8, pp. 153–175, 2000.
- [22] C. Carstensen, R. Lazarov and S. Tomov, Explicit and averaging a posteriori error estimates for adaptive finite volume methods. SIAM J. Numer. Anal. 42, pp. 2496-2521, 2005.
- [23] C.E. Castro and E.F. Toro, Solvers for the high-order Riemann problem for hyperbolic balance laws. J. Comput. Phys. 227, pp. 2481-2513, 2008.
- [24] C. Chainais-Hillairet, Discrete duality finite volume schemes for two-dimensional drift-diffusion and energy-transport models. *Internat. J. Numer. Methods Fluids* 59, pp. 239–257, 2009.
- [25] Y. Chen, Uniform convergence analysis of finite difference approximations for singular perturbation problems on an adapted grid. Adv. Comput. Math. 24, pp. 197– 212, 2006.
- [26] S.-H. Chou and Q. Li, Error estimates in L^2 , H^1 and L^{∞} in covolume methods for elliptic and parabolic problems : A unified approach. *Math. Comput.* **69**, pp. 103–120, 2000.
- [27] S.-H. Chou and X. Ye, Unified Analysis of Finite Volume Methods for Second Order Elliptic Problems. SIAM J. Numer. Anal. 45, pp. 1639–1653, 2007.
- [28] S. Choudhury and R. A. Nicolaides, Discretization of incompressible vorticityvelocity equations on triangular meshes. Int. J. Numer. Methods Fluids 11, pp. 823-833, 1990.
- [29] P.G. Ciarlet, Discrete variational Green's function I. Aequationes Math. 4, pp. 74– 82, 1970.
- [30] P.G. Ciarlet, The finite element method for elliptic problems. Studies in Mathematics and its Applications. Vol. 4. Amsterdam - New York - Oxford : North-Holland Publishing Company, 1978.
- [31] P.G. Ciarlet and R.S. Varga, Discrete variational Green's function. Numer. Math. 16, pp. 115–128, 1970.
- [32] Y. Coudière, J.-P. Vila, P. Villedieu, Convergence rate of a finite volume scheme for a two dimensional convection-diffusion problem. *ESAIM* :*M2AN* 33, pp. 493– 516, 1999.
- [33] Y. Coudière and F. Hubert, A 3D discrete duality finite volume method for nonlinear elliptic equations. Proceedings of ALGORITMY 2009, 18th Conference
on Scientific Computing, Vysoké Tatry – Podbanské, Slovakia, pp. 51–60, 2009. http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00356879/fr.

- [34] Y. Coudière and G. Manzini, The Discrete Duality Finite Volume Method for Convection Diffusion Problems. Accepted for publication in SIAM J. Numer. Anal., 2009.
- [35] Y. Coudière, C. Pierre, O. Rousseau and R. Turpault, A 2D/3D Discrete Duality Finite Volume Scheme. Application to ECG simulation. International Journal On Finite Volumes 6 (1), 24p., 2009, electronic only.
- [36] N. Crouseilles, M. Gutnic, G. Latu and E. Sonnendrücker, Comparison of two Eulerian solvers for the four-dimensional Vlasov equation. I. Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. 13, pp. 88–93, 2008.
- [37] Crouseilles, N.; Gutnic, M.; Latu, G.; Sonnendrücker, E. Comparison of two Eulerian solvers for the four-dimensional Vlasov equation. II. Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. 13, pp. 94–99, 2008.
- [38] M. Crouzeix and P.-A. Raviart, Conforming and nonconforming finite element methods for solving the stationary Stokes equations. I. Rev. Française Automat. Informat. Recherche Opérationnelle Sér. Rouge 7, pp. 33-75, 1973.
- [39] E. Dari, R. Duran, C. Padra and V. Vampa, A posteriori error estimators for nonconforming finite element methods. ESAIM :M2AN, 30, pp. 385-400, 1996.
- [40] A. Dedner, F. Kemm, D. Kröner, C. -D. Munz, T. Schnitzer and M. Wesenberg, Hyperbolic Divergence Cleaning for the MHD Equations. J. Comput. Phys. 175, pp. 645-673, 2002.
- [41] S. Delcourte, Développement de méthodes de volumes finis pour la mécanique des fluides, Thèse de l'Université Paul Sabatier, Toulouse III, 2007, http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00200833/fr/
- [42] S. Dellacherie, Analysis of Godunov type schemes applied to the compressible Euler system at low Mach number. Accepted for publication in J. Comput. Phys, 2009.
- [43] S. Depeyre and D. Issautier, A new constrained formulation of the Maxwell system. RAIRO, Modélisation Math. Anal. Numér. 31, pp. 327–357, 1997.
- [44] A. Draganescu, T.F. Dupont and L.R. Scott, Failure of the discrete maximum principle for an elliptic finite element problem. *Math. Comput.* 74, pp. 1–23, 2005.
- [45] F. Dubois, Vorticity-velocity-pressure formulation for the Stokes problem. Math. Meth. in the Applied Sciences 25, pp. 1091–1119, 2002.
- [46] F. Dubois, M. Salaün, and S. Salmon, First vorticity-velocity-pressure numerical scheme for the Stokes problem. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 192, pp. 4877–4907, 2003.
- [47] M. Dumbser and M. Käser, Arbitrary high order non-oscillatory finite volume schemes on unstructured meshes for linear hyperbolic systems. J. Comput. Phys. 221, pp. 693–723, 2007.
- [48] T. Zh. Esirkepov, Exact charge conservation scheme for Particle-in-Cell simulation with an arbitrary form-factor. *Computer Physics Communications* 135, pp. 144– 153, 2001.
- [49] H. Esser, The Green's function of a compact discretization. Numer. Funct. Anal. Optimization 10, pp. 77–89, 1989.

- [50] R.E. Ewing, T. Lin and Y. Lin, On the accuracy of the finite volume element method based on piecewise linear polynomials. SIAM J. Numer. Anal. 39, pp. 1865– 1888, 2002.
- [51] R. Eymard, Personal communication, 2007.
- [52] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin, Finite volume methods, in Ciarlet, P. G. (ed.) et al., Handbook of numerical analysis. Vol. 7. Amsterdam : North-Holland/ Elsevier, pp. 713–1020, 2000.
- [53] P.A. Forsyth and P.H. Sammon, Quadratic convergence for cell-centered grids. Appl. Numer. Math. 4, pp. 377–394, 1988.
- [54] R. Glowinski, J. He, J. Rappaz and J. Wagner, A multi-domain method for solving numerically multi-scale elliptic problems. C.R. Acad. Sci. Paris, Ser.I, 338, pp. 741–746, 2004.
- [55] L. Fezoui, S. Lanteri, S. Lohrengel and S. Piperno, Convergence and stability of a discontinuous Galerkin time-domain method for the 3D heterogeneous Maxwell equations on unstructured meshes. *ESAIM* :*M2AN* 39, pp. 1149–1176, 2005.
- [56] R.D. Grigorieff, Convergence of discrete Green's functions for finite difference schemes. Appl. Anal. 19, pp. 233-250, 1985.
- [57] F. H. Harlow and J. E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Physics of Fluids* 8, pp. 2182–2189, 1965.
- [58] R. Herbin, An error estimate for a finite volume scheme for a diffusion-convection problem on a triangular mesh. Numer. Methods Partial Differ. Equations 11, pp. 165–173, 1995.
- [59] R. Herbin and F. Hubert, Benchmark on discretization schemes for anisotropic diffusion problems on general grids. in *Proceedings of the 5th International Symposium on Finite Volumes for Complex Applications*, R. Eymard and J.-M. Hérard (Eds), ISTE Ltd and John Wiley & Sons, pp. 659–692, 2008.
- [60] F. Hermeline, A finite volume method for the approximation of diffusion operators on distorted meshes. J. Comput. Phys. 160, pp. 481–499, 2000.
- [61] F. Hermeline, Approximation of diffusion operators with discontinuous tensor coefficients on distorted meshes. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 192, pp. 1939– 1959, 2003.
- [62] F. Hermeline, Approximation of 2-D and 3-D diffusion operators with variable full tensor coefficients on arbitrary meshes. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 196, pp. 2497–2526, 2007.
- [63] F. Hermeline, Benchmark on anisotropic problems. Numerical experiments with the DDFV method. in *Proceedings of the 5th International Symposium on Finite Volumes for Complex Applications*, R. Eymard and J.-M. Hérard (Eds), ISTE Ltd and John Wiley & Sons, pp. 851–863, 2008.
- [64] F. Hermeline, A finite volume method for approximating 3D diffusion operators on general meshes. J. Comput. Phys. 228, pp. 5763–5786, 2009.
- [65] R.W. Hockney and J.W. Eastwood, Computer Simulation using Particles. McGraw-Hill, New-York, 1981.
- [66] X. Hu and R. A. Nicolaides, Covolume techniques for anisotropic media. Numer. Math. 61, pp. 215–234, 1992.
- [67] Jacobs G.B., Hesthaven J.S., High-order nodal discontinuous Galerkin particle-incell method on unstructured grids. J. Comput. Phys. 214, pp. 96–121, 2006.

- [68] Jacobs G.B., Hesthaven J.S., Implicit-explicit time integration of a high-order particle-in-cell method with hyperbolic divergence cleaning. *Computer physics communications* 180, pp. 1760-1767, 2009.
- [69] B.N. Jiang, J. Wu and L.A. Povinelli, The origin of spurious solutions in computational electromagnetics. J. Comput. Phys. 125, pp. 104–123, 1996.
- [70] S.S. Komissarov, Multidimensional numerical scheme for resistive relativistic magnetohydrodynamics. Mon. Not. R. Astron. Soc. 382, pp. 995–1004, 2007.
- [71] S. Krell, Stabilized DDFV schemes for Stokes problem. Proceedings of ALGO-RITMY 2009, 18th Conference on Scientific Computing, Vysoké Tatry – Podbanské, Slovakia, pp. 21–30, 2009.
- [72] S. Krell, Stabilized DDFV schemes for Stokes problem with variable viscosity on general 2D meshes, submitted, 2009. http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00385687/fr/
- [73] R. Kuate, Adaptation de maillage anisotrope : Etude, construction d'estimateurs d'erreur et raffinement hexaédrique. Thèse de l'Université Pierre et Marie Curie, Paris VI, 2008. http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00363511/fr/
- [74] B. Marder, A method for incorporating Gauss' law into electromagnetic PIC codes. J. Comput. Phys. 68, pp. 48–55, 1987.
- [75] P. Jamet, Estimations d'erreur pour des éléments finis droits presque dégénérés. RAIRO Analyse numérique 10, pp. 43-61, 1976.
- [76] W.P. Jones and K.R. Menzies, Analysis of the cell-centred finite volume method for the diffusion equation. J. Comput. Phys. 165, pp. 45–68, 2000.
- [77] A.B. Langdon, On enforcing Gauss' law in electromagnetic particle-in-cell codes. Comput. Phys. Commun. 70, pp. 447–450, 1992.
- [78] S. Layouni, Étude d'une méthode de volumes finis pour la résolution des équations de Maxwell en deux dimensions d'espace sur des maillages quelconques et couplage avec l'équation de Vlasov. Thèse de l'Université Paul Sabatier, Toulouse III, 2008.
- [79] R.D. Lazarov, I.D. Mishev and P.S. Vassilevski, Finite volume methods for convection-diffusion problems. SIAM J. Numer. Anal. 33, pp. 31–55, 1996.
- [80] R. Lazarov, S. Tomov, A posteriori error estimates for finite volume element approximations of convection-diffusion-reaction equations. *Comput. Geosci.* 6, pp. 483–503, 2002.
- [81] T. Linss, Uniform pointwise convergence of an upwind finite volume method on layer-adapted meshes. Z. Angew. Math. Mech. 82, pp. 247–254, 2002.
- [82] T. Linss, Sufficient conditions for uniform convergence on layer-adapted meshes for one-dimensional reaction-diffusion problems. *Numer. Algorithms* 40, pp. 23– 32, 2005.
- [83] J.A. Mackenzie and K.W. Morton, Finite volume solutions of convection-diffusion test problems. *Math. Comput.* 60, pp. 189–220, 1993.
- [84] A. Mahamane, Analyse et estimation d'erreur en volumes finis. Application aux écoulements en milieu poreux et à l'adaptation de maillage. Thèse de l'Université Paris 13, 2009.
- [85] G.T. McAllister and E.F. Sabotka, Discrete Green's functions. Math. Comput. 27, pp. 59–80, 1973.
- [86] I.D. Mishev, Finite volume methods on Voronoi meshes. Numer. Methods Partial Differential Equations 14, pp. 193–212, 1998.

Mémoire d'habilitation à diriger des recherches

Pascal Omnes

109

- [87] C.-D. Munz, R. Schneider, E. Sonnendrücker and U. Voss, Maxwell's equations when the charge conservation is not satisfied. C.R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 328, pp. 431–436, 1999.
- [88] C.-D. Munz, R. Schneider and U. Voss, A finite-volume method for the Maxwell equations in the time domain. SIAM J. Sci. Comput. 22, pp. 449–475, 2000.
- [89] S. Nicaise, A posteriori residual error estimation of a cell-centered finite volume method. C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 338, pp. 419–424, 2004.
- [90] S. Nicaise, A posteriori error estimations of some cell-centered finite volume methods. SIAM J. Numer. Anal. 43, pp. 1481–1503, 2005.
- [91] S. Nicaise, A posteriori error estimations of some cell centered finite volume methods for diffusion-convection-reaction problems. SIAM J. Numer. Anal. 44, pp. 949–978, 2006.
- [92] R. A. Nicolaides, Direct discretization of planar div-curl problems. SIAM J. Numer. Anal. 29, pp. 32–56, 1992.
- [93] R. A. Nicolaides and D.-Q. Wang, Convergence analysis of a covolume scheme for Maxwell's equations in three dimensions. *Math. Comput.* 67, pp. 947-963, 1998.
- [94] M. Ohlberger, A posteriori error estimates for vertex centered finite volume approximations of convection-diffusion-reaction equations. ESAIM :M2AN 35, pp. 355–387, 2001.
- [95] M. Ohlberger, Higher order finite volume methods on selfadaptive grids for convection dominated reactive transport problems in porous media. *Comput. Vis. Sci.* 7, pp. 41–51, 2004.
- [96] E. O'Riordan and M. Stynes, An analysis of a superconvergence result for a singularly perturbed boundary value problem. *Math. Comput.* 46, pp. 81–92, 1986.
- [97] M. Plexousakis and G. E. Zouraris, On the construction and analysis of high order locally conservative finite volume-type methods for one-dimensional elliptic problems. SIAM J. Numer. Anal. 42, pp. 1226–1260, 2004.
- [98] P.-A. Raviart and J.-M. Thomas, A mixed finite element method for second order elliptic problems. in *Mathematical aspects of the finite element method*, I. Galligani and E. Magenes Eds., Lecture Notes in Math. **606**, Springer-Verlag New-York, pp. 292–315, 1977.
- [99] F. Rieper, Influence of Cell Geometry on the Behaviour of the First-Order Roe Scheme in the Low Mach Number Regime. In Proceedings of the 5th International Symposium on Finite Volumes for Complex Applications, R. Eymard and J.-M. Hérard (Eds), ISTE Ltd and John Wiley & Sons, pp. 625–632, 2008.
- [100] F. Rieper, On the dissipation mechanism of upwind-schemes in the low Mach number regime : A comparison between Roe and HLL. Accepted for publication in J. Comput. Phys., 2009.
- [101] F. Rieper and G. Bader, The influence of cell geometry on the accuracy of upwind schemes in the low Mach number regime. J. of Comp. Phys. 228, pp. 2918–2933, 2009.
- [102] R. Sacco, Convergence of a second-order accurate Petrov-Galerkin scheme for convection-diffusion problems in semiconductors. Appl. Numer. Math. 11, pp. 517– 528, 1993.
- [103] S. Salmon, Contribution aux méthodes numériques pour la simulation d'écoulements de fluides, d'électromagnétisme et de physique des plasmas. Mémoire d'habilitation à diriger des recherches, Université Louis Pasteur, Strasbourg I, 2008. http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00340299/fr/

- [104] J. R. Shewchuk, Triangle : Engineering a 2D Quality Mesh Generator and Delaunay Triangulator. In Applied Computational Geometry : Towards Geometric Engineering, Ming C. Lin and Dinesh Manocha, editors, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 1148, Springer-Verlag, Berlin, pp. 203–222, 1996.
- [105] M. Shoucri, Eulerian codes for the numerical solution of the Vlasov equation, Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. 13, pp. 174–182, 2008.
- [106] G. Strang, On the construction and comparison of difference schemes. SIAM J. Num. Anal. 5, pp. 506-517, 1968.
- [107] T. Umeda, Y. Omura, T. Tominaga and H. Matsumoto, A new charge conservation method in electromagnetic particle-in-cell simulations. *Computer Physics Communication* 156, pp. 73–85, 2003.
- [108] B. van Leer, Towards the ultimate conservative difference scheme V. A second order sequel to Godunov's method. J. Comput. Phys., 32, pp. 101–136, 1979.
- [109] R. Vanselow and H.P. Scheffler, Convergence analysis of a finite volume method via a new nonconforming finite element method. Numer. Methods Partial Differential Equations 14, pp. 213–231, 1998.
- [110] S. Vater and R. Klein, Stability of a Cartesian grid projection method for zero Froude number shallow water flows. *Numer. Math* 113, pp. 123–161, 2009.
- [111] A. Veeser and R. Verfürth, Explicit Upper Bounds for Dual Norms of Residuals. SIAM J. Numer. Anal. 47, pp. 2387–2405, 2009.
- [112] T. Vejchodsky and P. Solín, Discrete maximum principle for higher-order finite elements in 1D. Math. Comput. 76, pp. 1833–1846, 2007.
- [113] R. Verfürth, A review of a *posteriori* error estimation and adaptive meshrefinement techniques. Teubner–Wiley, Stuttgart, 1996.
- [114] R. Verfürth, Error estimates for some quasi-interpolation operators. ESAIM :M2AN 33, pp. 695-713, 1999.
- [115] J. Villasenor and O. Buneman, Rigorous charge conservation for electromagnetic field solvers, J. Comput. Phys. 69, pp. 306-316, 1992.
- [116] M. Vohralík, Residual flux-based a posteriori error estimates for finite volume and related locally conservative methods *Numer. Math.* **111**, pp. 121–158, 2008.
- [117] A. Weiser and M.F. Wheeler, On convergence of block centered finite differences for elliptic problems. SIAM J. Numer. Anal. 25, pp. 351–375, 1988.
- [118] W.R. Wolf and J.L.F. Azevedo, High-order ENO and WENO schemes for unstructured grids. Int. J. Numer. Methods Fluids 55, pp. 917–943, 2007.
- [119] K. Yee, Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's Equations in isotropic media. *IEEE Trans. Antennas and Propagation* 14, pp. 302– 307, 1966.
- [120] S. Zenitani, M. Hesse and A. Klimas, A relativistic two-fluid simulations of guide field magnetic reconnection. *The astrophysical journal* **705**, pp. 907–913, 2009.

111