



**HAL**  
open science

# Construction et développement de nouveaux schémas pour des problèmes elliptiques ou paraboliques

Christophe Le Potier

► **To cite this version:**

Christophe Le Potier. Construction et développement de nouveaux schémas pour des problèmes elliptiques ou paraboliques. Mathématiques [math]. Université Paris-Est, 2017. tel-01788736

**HAL Id: tel-01788736**

**<https://cea.hal.science/tel-01788736>**

Submitted on 9 May 2018

**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.

# HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

UNIVERSITÉ PARIS-EST

*École doctorale : MSTIC*

*Discipline : MATHÉMATIQUES*

*soutenue par*

**Christophe Le Potier**

*le 15/11/2017*

## Construction et développement de nouveaux schémas pour des problèmes elliptiques ou paraboliques

*Rapporteurs :*

- Claire Chainais-Hillairet** - Université de Lille 1  
**Yves Coudière** - Université de Bordeaux  
**Bruno Després** - Université de Paris 6

*Membres du jury :*

- Claire Chainais-Hillairet** - Université de Lille 1  
**Bruno Després** - Université de Paris 6  
**Alexandre Ern** - Ecole Nationale des Ponts et Chaussées  
**Robert Eymard** - Université de Paris-Est (Directeur d'habilitation)  
**Stéphane Gounand** - C.E.A. de Saclay  
**Roland Masson** - Université de Nice



# Remerciements

Je voudrais tout d'abord remercier chaleureusement Robert Eymard, qui a accepté avec enthousiasme d'être mon directeur d'habilitation, m'a encouragé et a été d'un soutien sans faille dans toute cette démarche. C'est d'ailleurs l'occasion ici de remercier également l'équipe "Marno-Marseillaise" pour les invitations aux congrès FVCA ou aux écoles d'été qui ont permis de faire connaître mon travail.

Toute ma reconnaissance va également à Jérôme Droniou pour nos nombreux échanges sur la compréhension théorique des schémas numériques non linéaires et pour l'ensemble de notre collaboration. Si Jérôme n'était pas en Australie, il serait sûrement des nôtres aujourd'hui.

Un grand merci aux trois rapporteurs Claire Chainais-Hillairet, Bruno Després et Yves Coudière qui ont pris de leurs temps pour rendre compte de ce travail. Leurs remarques et commentaires m'encouragent à continuer dans cette voie nommée "expertise" au CEA et à oser soutenir publiquement devant un jury. En outre, Bruno m'a fait grand honneur en testant et en analysant certaines des méthodes que je propose sur l'équation de la chaleur.

Je tiens également à remercier chaleureusement Alexandre Ern, Stéphane Gounand et Roland Masson qui ont accepté d'examiner ce travail.

Je témoigne également ma reconnaissance à Emmanuelle et Stéphane pour avoir été les premiers relecteurs de ce document.

Merci également aux joyeux drilles de l'équipe Castem du CEA : Alberto, Frédéric, Gilles et Stéphane. Leurs développements m'ont permis de comparer facilement les nouvelles méthodes que j'ai développées.

Je n'oublie pas mes co-auteurs avec qui j'ai collaboré ces quinze dernières années : Nathalie, Alberto, Gilles, François, Sophie, Clément, Mathieu, Alain, Stéphane, Olivier, Amadou, Thanh Hai et Mahdi.



# Table des matières

<b>Publications de l'auteur</b>	<b>6</b>
<b>Introduction</b>	<b>8</b>
<b>1 Schémas volumes finis symétriques centrés sur les mailles</b>	<b>12</b>
1.1 Formulation volumes finis en 2D	12
1.1.1 Schéma symétrique pour des triangles ou des quadrangles (VFSYM)	12
1.1.2 Propriétés de l'algorithme	14
1.1.3 Résultats numériques	15
1.1.4 Un autre schéma symétrique pour des quadrilatères (VFSYM2)	16
1.2 Formulation volumes finis en 3D (VFSYM3)	17
1.2.1 Discrétisation pour les faces intérieures au domaine de calcul	18
1.2.2 Prise en compte des conditions aux limites	19
1.2.3 Propriétés	19
1.2.4 Résultats numériques	20
1.2.5 Application à un scénario de sûreté sur le Site de Bure	21
1.3 Conclusion	30
<b>2 Un schéma linéaire vérifiant le principe du maximum pour des opérateurs de diffusion très anisotropes sur des maillages déformés</b>	<b>31</b>
2.1 Introduction	31
2.2 Différences finies généralisées	31
2.2.1 Cas isotrope : $\overline{D} = Id$	31
2.2.2 Cas anisotrope	33
2.3 Propriétés	33
2.4 Résultats numériques	33
2.4.1 Solution analytique avec des triangles allongés	34
2.4.2 Triangles allongés et $f$ discontinue	34
2.4.3 Solution analytique avec un tenseur très anisotrope	35
2.4.4 Tenseur très anisotrope et $f$ discontinue	36
<b>3 Schéma centré sur des mailles de forme presque générale pour des opérateurs de diffusion</b>	<b>38</b>
3.1 Présentation du schéma	38
3.1.1 Cas isotrope homogène	39
3.1.2 Cas anisotrope hétérogène	39

3.2	Une variante en modifiant le second membre . . . . .	41
3.3	Propriétés . . . . .	41
3.4	Résultats numériques . . . . .	43
3.5	Conclusion . . . . .	46
<b>4</b>	<b>Schémas non linéaires volumes finis monotones ou positifs pour des opérateurs de diffusion fortement anisotropes</b>	<b>47</b>
4.1	Formulation volumes finis . . . . .	47
4.1.1	Cas isotrope homogène . . . . .	48
4.1.2	Cas anisotrope hétérogène . . . . .	50
4.2	Propriétés du schéma . . . . .	52
4.3	Résultats numériques . . . . .	53
4.3.1	Méthode VFMON . . . . .	53
4.3.2	Méthode VFPMD . . . . .	54
4.4	Conclusion . . . . .	59
<b>5</b>	<b>Correction non linéaire et principe du maximum pour la discrétisation d'opérateurs de diffusion avec des schémas volumes finis</b>	<b>61</b>
5.1	Schéma centré sur les mailles . . . . .	61
5.1.1	Propriétés de l'algorithme . . . . .	62
5.1.2	Résultats numériques . . . . .	63
5.2	Schémas hybrides . . . . .	66
5.2.1	Propriétés du schéma modifié . . . . .	67
5.3	Correction non linéaire d'ordre 2 . . . . .	68
5.3.1	Propriétés de l'algorithme . . . . .	69
5.3.2	Résultats numériques . . . . .	70
5.4	Convergence théorique . . . . .	71
5.4.1	Une correction dépendant d'un paramètre $\epsilon$ ( $VFSYM_{cor1,\epsilon}$ ) . . . . .	71
5.4.2	Une autre correction sans ajout de paramètres ( $VFSYM_{cor1,\nu}^+$ ) . . . . .	74
	<b>Perspectives</b>	<b>78</b>
	<b>Références</b>	<b>78</b>
	<b>A Notations sur le maillage</b>	<b>85</b>
	<b>B Notations pour les résultats numériques</b>	<b>86</b>
	<b>C Tableau des méthodes proposées</b>	<b>87</b>

# Publications de l'auteur (avec comité de lecture)

Mes publications sont répertoriées à l'adresse suivante :

`"http://scholar.google.fr/citations?user=zrBrJLQAAAAJ"`.

- [P23] C. Le Potier. A nonlinear second order in space correction and maximum principle for diffusion operators, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Ser. I* 352, 947-952, (2014).
- [P22] C. Le Potier. Convergence of a Nonlinear Scheme for Anisotropic Diffusion Equations, *Finite Volume for Complex Applications VII*, (2014), pp. 439-447.
- [P21] C. Cancès, M. Cathala, C. Le Potier. Monotone coercive cell-centered finite volume schemes for anisotropic diffusion equations, *Numer. Math.* (2013), 387-417.
- [P20] C. Le Potier, T.H. Ong. A cell-centered Scheme for Heterogeneous Anisotropic Diffusion Problems On General Meshes, *Int. J. of Finite Vol.*, 8 (2012).
- [P19] C. Le Potier, A. Mahamane. A nonlinear correction and maximum principle for diffusion operators discretized using hybrid schemes, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Ser. I* 350, 101-106, (2012).
- [P18] A. Genty, C. Le Potier, S. Gounand. Analysis of the Excavation Deviation Impact on Geological Radioactive Waste Performance, *Geotech. Geol. Eng.*, 29, 537-554, (2011).
- [P17] A. Genty, C. Le Potier. Maximum and Minimum Principles for Radionuclide Transport Calculations in Geological Radioactive Waste Repository : Comparison Between Mixed Hybrid Finite Element Methods and Finite Volume Element discretizations, *Transp. Porous Media*, 88 (2011) 65-85.
- [P16] J. Droniou, C. Le Potier. Construction and convergence study of schemes preserving the elliptic local maximum principle, *SIAM, J. Numer. Anal.* 49 2 (2011), 459-490.
- [P15] C. Le Potier. A nonlinear correction and maximum principle for diffusion operators discretized using cell-centered finite volume schemes, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Ser. I* 348, 691-695, (2010).
- [P14] C. Le Potier. A nonlinear scheme satisfying maximum and minimum principles for diffusion operators, *Int. J. of Finite Vol.*, 6, 2 (2009).

- [P13] C. Le Potier. A linear scheme satisfying a maximum principle for anisotropic diffusion operators on distorted grids, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Ser. I* 347, (2009), pp. 105-110.
- [P12] C. Le Potier. Numerical results with two cell-centered finite volume schemes for heterogeneous anisotropic diffusion operators, *Finite Volume for Complex Applications V*, (2008), pp. 825-842.
- [P11] C. Le Potier. A finite Volume Scheme Satisfying Maximum and Minimum Principles for Anisotropic Diffusion Operators, *Finite Volume for Complex Applications V*, (2008), pp. 103-118.
- [P10] C. Le Potier. A finite volume monotone scheme for highly anisotropic diffusion operators on unstructured triangular meshes, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Ser. I* 341, 12 (2005), 787-792.
- [P9] C. Le Potier. A finite volume scheme for highly anisotropic diffusion operators on unstructured meshes, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Ser. I* 340, 12 (2005), 921-926.
- [P8] C. Le Potier. A finite volume method for the approximation of highly anisotropic diffusion operators on unstructured meshes, *Finite Volume for Complex Applications IV*, (2005), pp. 401-412.
- [P7] S. Borel, F. Dubois, C. Le Potier, M.M. Tekitek. Boundary Conditions for Petrov-Galerkin Finite volumes, pp. 305-314, *Finite Volume for Complex Applications IV*, (2005), pp 305-314.
- [P6] G. Bernard-Michel, C. Le Potier, S. Gounand, A. Beccantini. The ANDRA Couplex 1 test case : Comparisons between finite-element, mixed hybrid finite element and finite volume element discretizations, *Computat. Geosci.*, 8, 2 (2004) 187-201.
- [P5] N. Barnel, T. Lassabatère, C. Le Potier, P. Sémété. Sensitivity analysis on the thermal-hydraulic parameters governing the saturation of an engineered clay barrier system, *Appl. Clay Sci.*, 26, 1-4 (2004) 209-217.
- [P4] O. Lafitte, C. Le Potier. The Richards equation for modeling of a nuclear waste repository. Elliptic and parabolic problems, (Rolduc/Gaeta, 2001),152-159, World Sci.; Publishing, River Edge, NJ, (2002).
- [P3] C. Le Potier, A. Beccantini. A finite volume scheme for a parabolic equation on an unstructured mesh, *Finite Volume for Complex Applications III*, pp. 381-388, (2002).
- [P2] C. Le Potier. A Perfectly Matched Layer to solve the Maxwell's equations in non-steady mode, papier accepté en 1997 à IEEE transactions on Antennas and Propagation, non publié pour cause de mutation.
- [P1] R. Le Martret, C. Le Potier. Finite volume solution of Maxwell's equations in nonsteady mode, *La Recherche Aérospatiale*, Vol 5, 329-342, 1994.

### **Publication soumise**

C. le Potier. Une preuve complète de convergence pour un schéma modifié non linéaire vérifiant un principe du minimum local pour la discrétisation d'opérateurs de diffusion, 2017.

# Introduction

Nous présentons dans les trois premiers chapitres une synthèse des schémas linéaires que nous avons proposés depuis une dizaine d'années pour la discrétisation d'opérateurs de diffusion. L'ensemble de ces méthodes linéaires fait suite à des développements effectués dans les services SFME et STMF (Services de mécanique des fluides) du CEA (Commissariat à l'énergie atomique) dans le cadre des études concernant le stockage des déchets nucléaires en formation géologique profonde. On s'intéresse à un modèle de type hydraulique-transport qui s'écrit à l'aide de deux équations (voir (1.14) et (1.15)). La première est elliptique et modélise le flux d'eau d'un milieu poreux. La seconde de type convectif-diffusif-dispersif avec un terme de décroissance radioactive permet d'étudier la migration d'un radionucléide (par exemple l'iode  $^{129}I$ ).

Trois discrétisations ont été abordées pour ce modèle : les éléments finis  $\mathbb{P}1$  (EF), les éléments finis mixtes hybrides (EFMH) et les volumes finis (VF).

Les EF ont la propriété de très bien approcher les termes diffusifs sur des triangles en 2D ou des tétraèdres en 3D pour des milieux homogènes. En revanche, des imprécisions peuvent apparaître pour le calcul de l'écoulement car les perméabilités sont parfois fortement discontinues d'une couche géologique à l'autre.

Bien qu'un peu coûteux en place mémoire et parfois mal conditionnés, les EFMH ont la grande qualité d'être précis sur des problèmes elliptiques isotropes hétérogènes. Ils sont donc souvent bien adaptés pour discrétiser les problèmes d'écoulement. Par contre, ils sont parfois non monotones, même sur des maillages réguliers, ce qui peut aboutir à de fortes oscillations lors de couplages à des termes de convection. De plus, il a été mis en évidence dans [P8] qu'ils peuvent être très imprécis sur des problèmes très anisotropes.

En ce qui concerne les VF centrés sur les mailles, il est bien connu que les schémas classiques sont monotones pour traiter des termes convectifs. Nous verrons que de nombreuses solutions existent pour discrétiser les termes diffusifs. Les propriétés attendues sont le respect de la monotonie sur des maillages réguliers, la possibilité de couplage avec des algorithmes standards discrétisant des termes convectifs et en outre, la possibilité de traiter facilement des systèmes d'équations.

Dans le premier chapitre, nous présentons le nouvel algorithme de volumes finis qui a été développé dans [P8, P9, P12] prenant en compte des tenseurs hétérogènes anisotropes pour des simplexes, des parallélogrammes ou des parallélépipèdes.

Nous rappelons ici l'état de l'art des méthodes centrées sur les cellules pour approcher les termes de diffusion en 2004, période ce travail.

On peut tout d'abord s'intéresser aux éléments finis mixtes ou aux éléments finis mixtes hybrides [15, 30, 85]. L'idée est alors d'effectuer de la condensation de masse ou "Mass Lumping" sur la matrice des produits scalaires des fonctions de base de type Raviart-Thomas. Malheureusement, cela reste à notre connaissance un problème ouvert pour des mailles déformées.

On peut citer également une famille de méthodes volumes finis centrés sur les cellules décrites dans [56]. Elles ont donné lieu à toute une étude théorique de convergence avec estimation d'erreur sur des maillages non structurés [51, 52]. Mais, tous ces résultats ne sont en général valides que sur des maillages dit admissibles (par exemple des maillages de Delaunay-Voronoi pour des triangles), ce qui peut être restrictif dans certaines applications industrielles. Après 2005, les auteurs ont proposé de nombreuses publications, comme par exemple dans [3, 53], permettant de prendre en compte des mailles de forme générale.

Il existe en outre des méthodes volumes finis dites du "diamant" qui prennent en compte des maillages quelconques [16, 50]. D'un point de vue applicatif, elles donnent des résultats très intéressants. Elles sont en effet précises et restent souvent stables même avec des mailles très allongées. Dans [36, 37], une analyse de ce type de schéma est effectuée, avec tenseurs anisotropes hétérogènes. Il est montré en dimension 2 que le schéma converge sous réserve qu'une petite matrice locale définie à chaque nœud soit inversible et positive.

En 1998, il a été proposé dans [1, 2] une nouvelle approche précise (VFMPFA) pour des tenseurs discontinus. Malheureusement, les expériences numériques ont montré que ces méthodes devenaient instables pour des tenseurs très anisotropes.

Citons également la publication [89] où est établie une équivalence entre les éléments finis mixtes de Raviart-Thomas et les volumes finis centrés sur les mailles pour des simplexes. Malheureusement, la matrice globale issue des volumes finis n'est plus symétrique définie positive.

Il semble donc qu'en 2004, à notre connaissance, aucun schéma discrétisant des opérateurs de diffusion symétrique consistant, stable, centré sur les cellules n'existait dans la littérature.

L'idée de ce chapitre est inspirée du schéma décrit dans [1, 2]. Il s'agit de calculer le gradient sur chaque nœud de chaque maille à l'aide de l'inconnue principale au centre des mailles et d'inconnues auxiliaires définies sur les arêtes du maillage. Ces dernières sont éliminées localement en imposant des relations de continuité sur les flux. Notre contribution a consisté à rendre la méthode symétrique tout en conservant la consistance du schéma. La matrice globale associée à ce schéma est définie positive. La discrétisation est exacte pour des fonctions affines sur des simplexes ou des parallélogrammes. Nous montrons la robustesse et la précision du schéma par comparaison à des solutions analytiques. Cette technique a été reprise dans un certain nombre d'articles, notamment dans [4, 5, 8, 78] où est montrée la coercivité de la méthode, ce qui permet de déduire la convergence du schéma. Notons également que pour des quadrilatères de forme plus générale, il a été montré dans [69] que le schéma reste convergent avec des hypothèses particulières de raffinement sur le maillage.

Dans ce chapitre, nous décrivons également une approche prenant en compte des quadrangles quelconques et qui s'avère être exacte pour les fonctions affines.

D'autre part, nous généralisons la démarche en dimension 3. Nous retrouvons les mêmes propriétés qu'en dimension 2. Nous validons à l'aide de solutions analytiques et testons la technique sur un scénario de sûreté proposé par l'ANDRA (Agence Nationale pour la Gestion des Déchets Radioactifs).

Dans les années 2008-2009, nous avons cherché à résoudre le problème suivant : existe-t-il des schémas linéaires convergents discrétisant des termes de diffusion sur des maillages déformés, ou avec des tenseurs anisotropes, préservant le principe du maximum ? Nous montrons dans le chapitre 2 que la réponse est positive. Nous présentons une discrétisation de type différences finies généralisées sur des polygones publiée dans [P13]. Les dérivées d'ordre 2 sont calculées à l'aide de développements en séries de Taylor. La matrice associée au schéma est à diagonale fortement dominante. Une légère hypothèse sur le maillage permet d'établir la convergence de méthode. L'efficacité de l'algorithme est mise en évidence par comparaison à des solutions analytiques et aux résultats calculés par d'autres schémas

numériques. Tout ceci n'est pas en contradiction avec les publications [26, 67, 68, 83]. Dans ces articles, il est en effet montré qu'il n'existe pas de schémas linéaires convergents sur des quadrangles avec stencil à 9 points avec un tenseur très anisotrope (ou avec des cellules très allongées) satisfaisant le principe du maximum (ou du minimum). Dans notre approche, nous avons relaxé la contrainte sur le stencil et sur la conservativité habituellement vérifiée par la plupart des schémas linéaires classiques (Éléments finis, Volumes Finis, Éléments finis mixtes hybride, etc.). Notre technique est donc en générale non conservative, mais convergente. Soulignons cependant que le stencil du schéma devient non standard (les points peuvent être éloignés les uns des autres) et que la précision de la méthode peut se dégrader sur certains tests numériques. En outre, la technique n'est théoriquement valide que si le tenseur et le terme source sont suffisamment réguliers.

Un certain nombre d'applications dans le service STMF du CEA utilisent des maillages non conformes pour la résolution des équations de Navier-Stokes [17, 35, 55, 86]. Suite aux publications de [P8, P9], nous avons donc cherché à généraliser la démarche à des mailles de forme plus générale. La difficulté principale est de garder des propriétés de consistance, de stabilité (ou de coercivité) même sur des maillages allongés. Par exemple dans [1, 2, 7], les schémas ne sont plus coercifs si le facteur d'anisotropie est trop important. Dans [3], la méthode dépend de l'existence pour chaque arête d'un point dit à "moyenne harmonique".

Dans le chapitre 3, nous construisons une méthode centrée de type schéma "gradient" (voir [54]) sur des cellules de forme presque quelconque. Sous condition d'existence d'un maillage dual déduit du maillage initial, nous prouvons que la matrice associée au schéma est symétrique, définie positive. Pour des quadrilatères, notre construction aboutit à un stencil à 9 points. D'autre part, nous donnons une preuve de convergence de la méthode dans le cas de tenseurs de diffusion discontinus. De plus, à l'occasion de ce travail de synthèse, nous établissons le lien de l'algorithme proposé avec les méthodes de volumes finis. Ce schéma semble donc être un bon candidat pour discrétiser les termes de diffusion du modèle de Navier-Stokes.

Les chapitres suivants sont consacrés aux schémas ou aux corrections non linéaires que nous avons proposés depuis 2005, permettant de respecter le principe du maximum pour des maillages très allongés ou des tenseurs très anisotropes. En effet, pour des modèles de transport-chimie, ou pour des modèles diphasiques en milieu poreux, il peut être crucial de préserver les bornes physiques.

En 2005, à notre connaissance, une seule méthode existait dans ce contexte. Il s'agit du travail novateur [27] où est développée une correction non linéaire des éléments finis standard pour discrétiser un problème de type Laplacien. La structure de la matrice globale issue de la discrétisation permet d'obtenir les propriétés recherchées. Notons cependant une dégradation de l'ordre initial de la méthode. En outre, les tenseurs hétérogènes ne sont pas pris en compte.

Il semble donc qu'à cette période, il n'existait pas de schémas volumes finis satisfaisant les propriétés souhaitées sans condition sur la forme des mailles ou sur le rapport d'anisotropie.

Notons cependant que depuis une dizaine d'années, de nombreux travaux ont été publiés sur cette thématique. Citons par exemple le travail développé dans [28] où les auteurs proposent un algorithme non linéaire qui conserve les bornes physiques et une preuve complète de convergence pour des schémas de type volumes éléments finis. Cette méthode s'applique à des équations paraboliques.

Dans le chapitre 4, nous présentons la construction de schémas qui sont des variantes non linéaires de la méthode dite du "Diamant". L'idée du schéma est de calculer la combinaison non linéaire de deux flux de part et d'autre de chaque arête. Une première combinaison a donné lieu à la publication

[P10] en 2005. Pour les problèmes instationnaires, si le pas de temps est assez petit, la matrice globale associée à ce schéma est monotone sans condition géométrique sur le maillage et sans condition sur le rapport d'anisotropie. Dans ce cas, le calcul des flux donne une expression à 2 points, ce qui est particulièrement intéressant pour la mise en œuvre sur des machines parallèles [20].

Une autre combinaison non linéaire, inspirée d'une idée présentée dans [18], aboutit à un schéma satisfaisant le principe du maximum local (PML : voir (4.15)) [P16, P14, P11]. Dans ce cas, toutes les oscillations sont supprimées. Par contre, le stencil de la méthode est proche de celui d'un schéma linéaire classique. Sous condition de coercivité, nous montrons dans [P16] que la méthode est convergente. Nous vérifions sur les résultats numériques que les oscillations sont supprimées et que ces deux discrétisations sont d'ordre 2 même avec des tenseurs très anisotropes. Soulignons qu'à la suite de ce travail, un certain nombre de variantes ont été développées, notamment dans [66, 77, 90, 91]. Dans [82], l'approche est appliquée à des systèmes diphasiques en milieux poreux. Les auteurs montrent, sur des tests spécifiques, que la technique non linéaire est largement plus précise que certains schémas linéaires classiques. Citons également un travail récent [19] où les idées développées dans ce chapitre sont appliquées à un système d'équations hyperboliques.

Dans le chapitre 5, nous construisons des corrections non linéaires applicables à une large gamme de schémas classiques (Éléments finis, Volumes Finis, etc.). Nous visons ici un double objectif. Tout d'abord, on souhaite garder la coercivité des schémas initiaux. Cette propriété est importante car elle est utile pour montrer l'existence et la convergence de schémas non linéaires.

L'autre intérêt est de bénéficier de la structure informatique de méthodes existantes. Le gain en temps de développement logiciel devient alors tout à fait intéressant par rapport aux techniques décrites dans le chapitre 4.

Nous présentons trois variantes de ce type de schéma. La première est une correction non linéaire de schémas volumes finis centrés sur les cellules. Nous rappelons que le schéma modifié reste exact pour des fonctions affines, qu'il est coercif et qu'il supprime toutes les oscillations car la discrétisation vérifie la propriété PML. Dans [P21], sous condition de consistance de la correction, nous montrons la convergence de la méthode. La démarche est ensuite généralisée à des schémas hybrides (comme ceux développés dans [24, 25, 31, 48, 49]). Les propriétés obtenues sont similaires pour ce qui concerne la coercivité et la suppression des oscillations.

Nous présentons également une variante avec les mêmes propriétés qui, numériquement, devient d'ordre 2 en espace. Il s'agit de combiner les idées décrites dans [P15] avec celles présentées dans [70].

Enfin, nous établissons deux nouveaux résultats convergence, non publiés, avec des hypothèses moins restrictives et plus faciles à vérifier que celles décrites dans [P21].

Avant de décrire de manière plus détaillée les différentes méthodes proposées, nous signalons que nous avons résumé dans l'annexe C l'ensemble de leurs propriétés et les publications associées.



# Chapitre 1

## Schémas volumes finis symétriques centrés sur les mailles

Nous effectuons dans ce chapitre une synthèse des publications [P8, P9, P12]. Une première approche a été proposée pour la discrétisation du terme diffusif [1, 71, 72]. Il s'agit de calculer le gradient sur chaque nœud de chaque maille à l'aide de l'inconnue principale au centre des mailles et d'inconnues auxiliaires définies sur les arêtes du maillage. Ces dernières sont éliminées localement en imposant des relations de continuité sur les flux. Nous avons montré la robustesse de cette méthode puisque l'algorithme a été testé avec environ 500000 hexaèdres déformés pour les calculs préparatoires de sûreté de l'ANDRA.

Cependant, en ce qui concerne le terme diffusif, il est bien connu que les méthodes de volumes finis [1, 50, 71] peuvent devenir instables avec des tenseurs très anisotropes. Dans ce travail, nous proposons de symétriser le schéma décrit dans [1]. Nous nous intéressons à une équation parabolique qui s'écrit :

$$\begin{cases} \vec{q} = -\overline{\overline{D}}\nabla u \\ \frac{\partial u}{\partial t} = -div\vec{q} \end{cases} \quad (1.1)$$

avec  $u(x, t)$ , la solution recherchée,  $\overline{\overline{D}}$ , un tenseur symétrique défini positif. D'autre part, nous nous donnons une condition initiale :

$$u(x, 0) = u_0(x).$$

Des conditions aux limites du type Dirichlet ou Neumann sont imposées sur la frontière du domaine étudié.

### 1.1 Formulation volumes finis en 2D

#### 1.1.1 Schéma symétrique pour des triangles ou des quadrangles (VFSYM)

Soit un domaine polygonal  $\Omega$  de frontière  $\Gamma$  maillé avec des triangles ou des quadrangles. Nous notons (Figure 1.1) pour un maillage de quadrangles :



FIGURE 1.1 – Maillage de quadrangles.

- $\Omega_K$  le quadrangle  $(K_1, K_2, K_3, K_4)$ ,  $|K|$  sa surface,  $K$  son barycentre,  $M_1, M_2, M_3, M_4$  les milieux des arêtes du quadrangle  $\Omega_K$ ,  $D_i$  et  $E_i$  les milieux des arêtes du type  $K_iM_i$  et  $K_iM_{i+1}$  (par convention  $M_5 = M_1$ ),
- $\vec{n}_{D_i}$  et  $\vec{n}_{E_i}$  les vecteurs orthonormaux aux arêtes  $K_iM_i$  et  $K_iM_{i+1}$ ,  $|\sigma_{D_i}|$  et  $|\sigma_{E_i}|$  leurs longueurs,
- $\Delta_{K_i}$  le quadrangle associé à  $K_i$  du type  $(K, M_i, K_i, M_{i+1})$  de surface  $|K_i|$  et  $\partial\Delta_{K_i}$  sa frontière,
- $G_{K_i}$  et  $N_{K_i}$ , l'ensemble et le nombre d'arêtes autour du point  $K_i$  dans le maillage de  $\Omega$ ,
- $N_{ma}$  le nombre de mailles de  $\Omega$ .

**Hypothèses de calcul :**

- L'approximation de la solution  $u$  est affine à l'intérieur du quadrangle  $\Omega_K$ , sur les arêtes  $K_iM_i$  et  $K_iM_{i+1}$ .
- L'approximation du vecteur  $\vec{q}$  est constante sur  $\Delta_{K_i}$ .

Nous notons  $u_K$  (respectivement  $u_{D_i}$  et  $u_{E_i}$ ) la valeur de l'approximation de la solution  $u$  au point  $K$  (respectivement sur les segments  $K_iM_i$  et  $K_iM_{i+1}$ ),  $\vec{q}_{K_i}$  la valeur de l'approximation de  $\vec{q}$  sur  $\Delta_{K_i}$  et  $\overline{\overline{D}}_K$  la valeur du tenseur  $\overline{\overline{D}}$  au point  $K$ .

Intégrons la première équation du système (1.1) sur  $\Delta_{K_i}$  en utilisant la formule de Green. Nous écrivons :

$$\int_{\Delta_{K_i}} \overline{\overline{D}}_K^{-1} \vec{q} d\Omega = - \int_{\Delta_{K_i}} \nabla u d\Omega = - \int_{\partial\Delta_{K_i}} u \vec{n} d\Gamma$$

En utilisant les hypothèses sur  $u$ , nous approchons  $\vec{q}_{K_i}$  avec l'expression suivante :

$$\overline{\overline{D}}_K^{-1} \vec{q}_{K_i} = - \frac{1}{|K_i|} (u_{D_i} - u_K) |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} - \frac{1}{|K_i|} (u_{E_i} - u_K) |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i}. \quad (1.2)$$

Nous déduisons les flux  $F_{D_i}$  et  $F_{E_i}$  à travers les interfaces  $K_iM_i$  et  $K_iM_{i+1}$  qui vérifient :

$$\left\{ \begin{array}{l} F_{D_i} = \vec{q}_{K_i} \cdot |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} = - |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} \frac{1}{|K_i|} (u_{D_i} - u_K) - \\ \quad |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} \frac{1}{|K_i|} (u_{E_i} - u_K) \\ F_{E_i} = \vec{q}_{K_i} \cdot |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} = - |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} \frac{1}{|K_i|} (u_{D_i} - u_K) - \\ \quad |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} \frac{1}{|K_i|} (u_{E_i} - u_K). \end{array} \right. \quad (1.3)$$

En appliquant la condition de continuité du flux sur  $G_{K_i}$ , nous déduisons les valeurs aux interfaces ( $u_{E_i}$ ,  $u_{D_i}$ , etc.) en inversant une petite matrice  $M_{K_i}$  de dimension  $N_{K_i}$ . Nous reconstruisons alors tous

les flux autour du point  $K_i$ . En intégrant la seconde équation du système (1.1) sur la maille  $\Omega_K$ , nous obtenons :

$$\int_{\Omega_K} \frac{\partial u}{\partial t} d\Omega = |K| \frac{\partial u_K}{\partial t} = - \int_{\Omega_K} \operatorname{div} \vec{q} d\Omega = - \int_{\partial\Omega_K} \vec{q} \cdot \vec{n} d\Gamma = - \sum_{1 \leq i \leq 4} F_{D_i} + F_{E_i}. \quad (1.4)$$

Remarque : dans [P8], nous montrons que les conditions aux limites sont naturellement prises en compte.

### 1.1.2 Propriétés de l'algorithme

Pour chaque nœud de chaque maille, nous définissons la matrice  $M_i$  comme suit :

$$M_i = \begin{pmatrix} |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K | \sigma_{D_i} | \vec{n}_{D_i} & |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K | \sigma_{E_i} | \vec{n}_{E_i} \\ |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K | \sigma_{D_i} | \vec{n}_{D_i} & |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K | \sigma_{E_i} | \vec{n}_{E_i} \end{pmatrix}$$

Nous notons également  $A_{VF}$  la matrice de la discrétisation de  $\operatorname{div} \overline{\overline{D}} \nabla$  de dimension  $N_{ma}$ ,  $SF$  la matrice diagonale dont les coefficients sont les surfaces du maillage,  $\Delta t$  le pas de temps,  $u^n = u(n\Delta t)$  le vecteur solution de dimension  $N_{ma}$ . Nous choisissons un schéma temporel implicite. La discrétisation de l'équation (1.4) devient :

$(\frac{SF}{\Delta t} - A_{VF})u^{n+1} = \frac{SF}{\Delta t}u^n$  et nous posons  $M = \frac{SF}{\Delta t} - A_{VF}$ . Dans [P8], nous montrons les propositions suivantes :

**Proposition 1.1.1** *Pour des mailles non aplaties, la matrice  $M$  associée au schéma précédent est symétrique définie positive. Ce dernier est donc inconditionnellement stable.*

On montre que  $-A_{VF}$  a la même propriété que les matrices  $M_i$  qui sont symétriques définies positives pour des cellules non aplaties.

**Proposition 1.1.2** *Avec des triangles ou des parallélogrammes non aplatis, si  $\overline{\overline{D}}$  est constant et  $u \in C^2(\Omega)$ , les flux sont approchés de manière consistante.*

Par un calcul analytique, on montre que le gradient est exact si  $u$  est affine.

**Proposition 1.1.3** *Si toutes les matrices  $M_i$  sont des  $M$ -matrices, alors si  $0 \leq u^n \leq u_{max}$ , on obtient  $0 \leq u^{n+1} \leq u_{max}$ .*

**Remarque 1.1.4** *La technique développée dans [1] aboutit au même formalisme matriciel. C'est la non symétrie des matrices  $M_i$  qui est à l'origine d'instabilités éventuelles. En pratique, nous avons donc d'abord cherché à les rendre symétriques. A l'issue des tests numériques, nous avons essayé de comprendre pourquoi la méthode restait consistante.*

**Remarque 1.1.5** *Pour des quadrangles quelconques, les gradients ne sont plus exacts pour des fonctions affines. Cependant, en raffinant à l'aide des milieux des arêtes et des barycentres de chaque maille, on observe, sur des expériences numériques, que les flux sont consistants. Ceci est montré théoriquement dans [69].*

**Remarque 1.1.6** *Ce schéma a été repris dans [4, 5, 8, 78]. Les auteurs montrent que le schéma est coercif, ce qui implique que la plus petite valeur propre de  $-A_{VF}$  ne tend pas vers zéro lorsqu'on raffine le maillage. Ceci permet alors de prouver la convergence de la méthode.*

### 1.1.3 Résultats numériques

Pour  $\Omega = ]0, 1[ \times ]0, 1[$ , nous cherchons à retrouver numériquement la solution analytique du problème suivant :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\overline{\overline{D}}\nabla u) = f \text{ sur } \Omega \\ u = \sin(\pi x)\sin(\pi y) \text{ pour } (x, y) \in \partial\Omega \end{cases} \quad (1.5)$$

$$\text{avec } \overline{\overline{D}}(x, y) = \frac{1}{(x^2 + y^2)} \begin{pmatrix} y^2 + \alpha x^2 & -(1 - \alpha)xy \\ -(1 - \alpha)xy & x^2 + \alpha y^2 \end{pmatrix} \text{ et } \begin{cases} u_{ana} = \sin(\pi x)\sin(\pi y) \\ f = -\operatorname{div}\overline{\overline{D}}\nabla u_{ana} \end{cases} \quad (1.6)$$

Le paramètre  $\alpha$  est égal à  $10^{-1}$  (P1 : problème 1),  $10^{-2}$  (P2 : problème 2) ou  $10^{-4}$  (P3 : problème 3). Le rapport d'anisotropie varie alors de 10 à  $10^4$ . Le maillage est constitué d'environ 38000 triangles non structurés. Nous calculons dans les tableaux 1.1 et 1.2, les erreurs  $L^2$  de  $u$  et de  $\overline{\overline{D}}\nabla u$  par rapport à la solution analytique pour les EFMH [40], pour la méthode VFMPFA [1, 72], et pour le schéma VFSYM décrit dans le paragraphe 1.1.1. On constate clairement la bonne précision de ce dernier. Le schéma EFMH est très imprécis pour le problème 3 (Figure 1.2). La méthode VFMPFA devient divergente, ce qui confirme les réserves décrites dans [1]. Nous montrons également le logarithme de l'erreur  $L^2$  de la solution (EFMH et VFSYM) (Figure 1.3) en fonction du pas de discrétisation. Il est clair que les deux schémas sont au moins d'ordre 2.

	EFMH	VFMPFA	VFSYM
P1	$1.15 \times 10^{-4}$	$7.73 \times 10^{-5}$	$5.18 \times 10^{-5}$
P2	$1.40 \times 10^{-3}$	pas de convergence en espace	$8.71 \times 10^{-5}$
P3	$1.49 \times 10^{-1}$	pas de convergence en espace	$1.93 \times 10^{-3}$

TABLE 1.1 – Erreur  $L^2$  pour les 3 problèmes et les 3 discrétisations de  $u$ .

	EFMH	VFMPFA	VFSYM
P1	$7.08 \times 10^{-3}$	$7.06 \times 10^{-3}$	$7.06 \times 10^{-3}$
P2	$7.42 \times 10^{-3}$	pas de convergence en espace	$7.21 \times 10^{-3}$
P3	$2.97 \times 10^{-2}$	pas de convergence en espace	$7.27 \times 10^{-3}$

TABLE 1.2 – Erreur  $L^2$  pour les 3 problèmes et les 3 discrétisations de  $\overline{\overline{D}}\nabla u$ .

**Remarque 1.1.7 :** *A notre grande surprise, c'est à l'occasion du développement de la méthode VF-SYM que nous avons mis en évidence la forte imprécision des EFMH pour les problèmes diffusifs très anisotropes. En 2004, cela ne semblait pas connu dans la littérature. Tout ceci a été confirmé dans le benchmark [60] sur des maillages de carrés.*

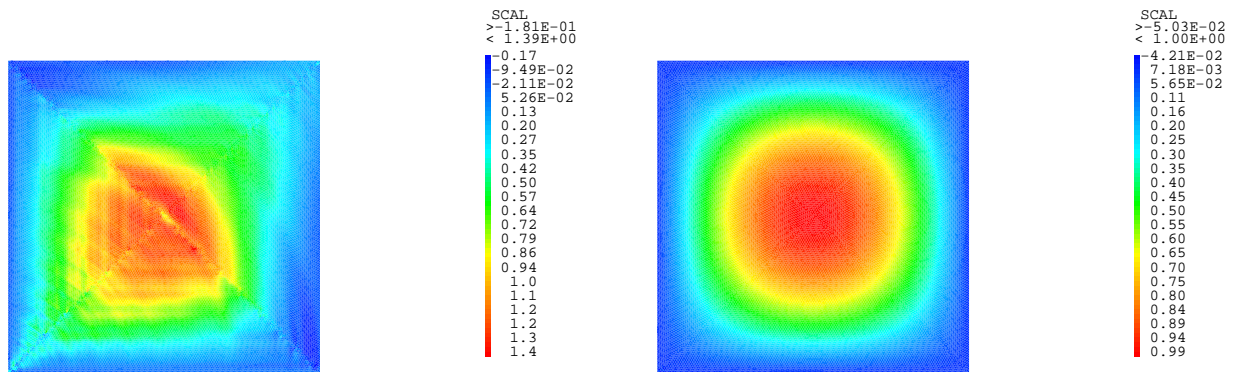


FIGURE 1.2 – Solution numérique calculée avec les EFMH (à gauche) et VFSYM (à droite) pour le problème 3 avec environ 38000 triangles.

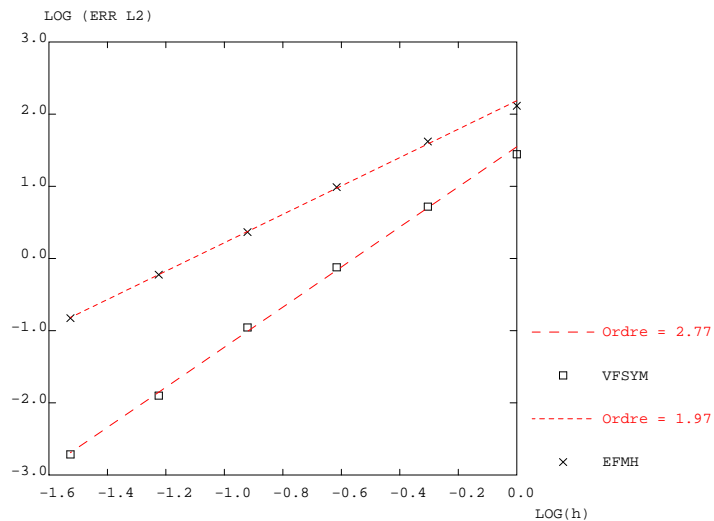


FIGURE 1.3 – Erreur  $L^2$  (EFMH et VFSYM) en fonction du pas en espace pour le problème 3.

#### 1.1.4 Un autre schéma symétrique pour des quadrilatères (VFSYM2)

Nous supposons que le mailleur construit 4 quadrilatères autour de chaque nœud intérieur du domaine de calcul. Nous présentons ici une variante du schéma (1.4) qui est exacte pour les fonctions



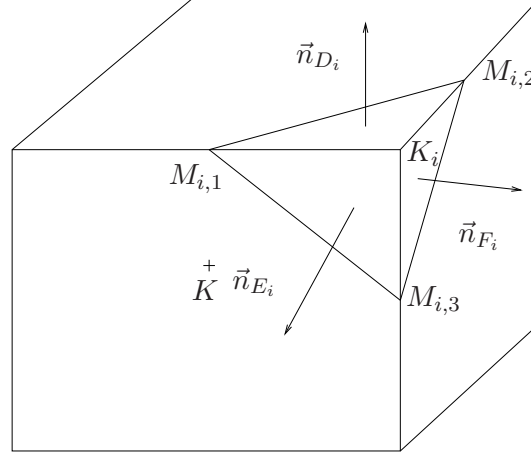


FIGURE 1.4 – Maillage de parallélépipèdes.

- $\Omega_K$  un parallélépipède,
- $NO_K$  l'ensemble des nœuds du parallélépipède  $\Omega_K$ ,
- $K$  le barycentre de  $\Omega_K$ ,
- $K_i$  un nœud du parallélépipède  $\Omega_K$ ,
- $D_i, E_i, F_i$ , les barycentres des 3 faces ayant le point  $K_i$  en commun,
- $M_{i,1}, M_{i,2}, M_{i,3}$ , les milieux des arêtes ayant  $K_i$  en commun et appartenant au parallélépipède  $\Omega_K$ ,
- $T_i$  le tétraèdre  $K_iM_{i,1}M_{i,2}M_{i,3}$  associé au point  $K_i$ ,
- $|T_i|$  le volume du tétraèdre  $T_i$ ,  $|\Omega_K|$  le volume du parallélépipède  $\Omega_K$ ,
- $\vec{n}_{D_i}$  (respectivement  $\vec{n}_{E_i}, \vec{n}_{F_i}$ ), un vecteur orthonormal à la face  $K_iM_{i,1}M_{i,2}$  (respectivement  $K_iM_{i,1}M_{i,3}, K_iM_{i,2}M_{i,3}$ ),  $|\sigma_{D_i}|$  (respectivement  $|\sigma_{E_i}|$  et  $|\sigma_{F_i}|$ ) l'aire de  $K_iM_{i,1}M_{i,2}$  (respectivement les aires de  $K_iM_{i,1}M_{i,3}$  et de  $K_iM_{i,2}M_{i,3}$ ),
- $\partial T_i$  la frontière de  $T_i$ ,
- $N_{K_i}$ , le nombre de faces autour du point  $K_i$ ,
- $N_{ma}$  le nombre de mailles.

**Hypothèses de la discrétisation :**

- L'approximation de la solution  $u$  est affine sur  $\Omega_K, T_i$  et sur les faces ayant le point  $K_i$  en commun,
- L'approximation de  $\vec{q}$  est constante sur  $T_i$ .

Nous notons  $u_K$  (respectivement  $u_{D_i}, u_{E_i}, u_{F_i}$ ) la valeur de l'approximation de  $u$  au point  $K$  (respectivement  $D_i, E_i, F_i$ ),  $\vec{q}_{K_i}$  la valeur de l'approximation de  $\vec{q}$  sur  $T_i$  et  $\overline{\overline{D}}_K$  la valeur du tenseur  $\overline{\overline{D}}$  au point  $K$ .

### 1.2.1 Discrétisation pour les faces intérieures au domaine de calcul

Intégrons la première équation du système (1.1) sur le tétraèdre  $T_i$  en utilisant la formule de Green. Nous écrivons :

$$\int_{T_i} \overline{\overline{D}}_K^{-1} \vec{q} d\Omega = - \int_{T_i} \nabla u d\Omega = - \int_{\partial T_i} u \vec{n} d\Gamma. \quad (1.9)$$

En utilisant les hypothèses sur  $u$ , nous obtenons (voir le paragraphe sur les propriétés du schéma) :

$$\overline{\overline{D}}_K^{-1} \vec{q}_{K_i} = -\frac{1}{|T_i|} \alpha(u'_{D_i} - u_K) |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} - \frac{1}{|T_i|} \alpha(u'_{E_i} - u_K) |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} - \frac{1}{|T_i|} \alpha(u'_{F_i} - u_K) |\sigma_{F_i}| \vec{n}_{F_i} \quad (1.10)$$

avec  $u_{D_i} = (1 - \alpha)u_{K_i} + \alpha u'_{D_i}$ ,  $u_{E_i} = (1 - \alpha)u_{K_i} + \alpha u'_{E_i}$ ,  $u_{F_i} = (1 - \alpha)u_{K_i} + \alpha u'_{F_i}$ , où  $u_{K_i}$  est la valeur de  $u$  au point  $K_i$ ,  $\alpha = \frac{2}{3}$  pour des tétraèdres et  $\alpha = \frac{1}{3}$  pour des parallélépipèdes. Nous déduisons les flux  $F_{D_i}, F_{E_i}$ , et  $F_{F_i}$  qui vérifient :

$$\left\{ \begin{array}{l} F_{D_i} = \vec{q}_{K_i} \cdot |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} = -|\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} \frac{1}{|T_i|} \alpha(u'_{D_i} - u_K) \\ -|\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} \frac{1}{|T_i|} \alpha(u'_{E_i} - u_K) - |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{F_i}| \vec{n}_{F_i} \frac{1}{|T_i|} \alpha(u'_{F_i} - u_K), \\ F_{E_i} = \vec{q}_{K_i} \cdot |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} = -|\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} \frac{1}{|T_i|} \alpha(u'_{D_i} - u_K) \\ -|\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} \frac{1}{|T_i|} \alpha(u'_{E_i} - u_K) - |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{F_i}| \vec{n}_{F_i} \frac{1}{|T_i|} \alpha(u'_{F_i} - u_K), \\ F_{F_i} = \vec{q}_{K_i} \cdot |\sigma_{F_i}| \vec{n}_{F_i} = -|\sigma_{F_i}| \vec{n}_{F_i} \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} \frac{1}{|T_i|} \alpha(u'_{D_i} - u_K) \\ -|\sigma_{F_i}| \vec{n}_{F_i} \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} \frac{1}{|T_i|} \alpha(u'_{E_i} - u_K) - |\sigma_{F_i}| \vec{n}_{F_i} \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{F_i}| \vec{n}_{F_i} \frac{1}{|T_i|} \alpha(u'_{F_i} - u_K). \end{array} \right. \quad (1.11)$$

En appliquant la condition de continuité du flux sur chaque face autour de  $K_i$ , nous déduisons les valeurs aux interfaces ( $u'_{D_i}$ ,  $u'_{E_i}$ ,  $u'_{F_i}$ , etc.) en inversant une petite matrice  $M_{K_i}$  de dimension  $N_{K_i}$ . Nous reconstruisons alors tous les flux autour du point  $K_i$ .

Intégrons maintenant la seconde équation du système (1.1) sur la maille  $\Omega_K$ . Nous obtenons :

$$\int_{\Omega_K} \frac{\partial u}{\partial t} d\Omega = |K| \frac{\partial u_K}{\partial t} d\Omega = - \int_{\Omega_K} \text{div} \vec{q} d\Omega = - \int_{\partial\Omega_K} \vec{q} \cdot \vec{n} d\Gamma = - \sum_{K_i \in N_{\Omega_K}} 2(F_{D_i} + F_{E_i} + F_{F_i})$$

Nous calculons donc toutes les valeurs situées au barycentre de chaque maille, ce qui définit complètement l'algorithme.

### 1.2.2 Prise en compte des conditions aux limites

Toutes les conditions aux limites (Dirichlet, Neumann) s'imposent de manière similaire au 2D [P8].

### 1.2.3 Propriétés

Nous notons  $M_{\Omega,i}$  les matrices :

$$M_{\Omega,i} = \begin{pmatrix} |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} & |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} & |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{F_i}| \vec{n}_{F_i} \\ |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} & |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} & |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{F_i}| \vec{n}_{F_i} \\ |\sigma_{F_i}| \vec{n}_{F_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{D_i}| \vec{n}_{D_i} & |\sigma_{F_i}| \vec{n}_{F_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{E_i}| \vec{n}_{E_i} & |\sigma_{F_i}| \vec{n}_{F_i} \cdot \overline{\overline{D}}_K |\sigma_{F_i}| \vec{n}_{F_i} \end{pmatrix}$$



En gardant les mêmes notations qu'en 2D, les propositions 1.1.1 et 1.1.3 restent vraies. Voici quelques précisions sur la consistance du schéma. Considérons une face intérieure et un tétraèdre  $T_i$ . Notons  $u_{G_i}$ , la valeur de  $u$  au barycentre de la face  $M_{i,1}M_{i,2}M_{i,3}$ . L'équation (1.9) devient alors :

$$\overline{\overline{D}}_K^{-1} \vec{q}_{K_i} = -\frac{1}{|T_i|}(u_{D_i} - u_{G_i})|\sigma_{D_i}|\vec{n}_{D_i} - \frac{1}{|T_i|}(u_{E_i} - u_{G_i})|\sigma_{E_i}|\vec{n}_{E_i} - \frac{1}{|T_i|}(u_{F_i} - u_{G_i})|\sigma_{F_i}|\vec{n}_{F_i}. \quad (1.12)$$

Cette approximation est exacte pour les fonctions affines car les intégrales  $\int_{\partial\Delta_{T_i}} u \vec{n} d\Gamma$  sont calculées à l'aide des valeurs de  $u$  situées au barycentre des faces du tétraèdre  $T_i$ . Or, on peut également écrire pour des fonctions affines :

$$u_{G_i} = \alpha u_K + (1 - \alpha)u_{K_i}$$

avec  $\alpha = \frac{2}{3}$  pour des tétraèdres et  $\alpha = \frac{1}{3}$  pour des parallélépipèdes. En remplaçant  $u_{G_i}$  par sa valeur dans (1.12), l'expression de  $\vec{q}$  est indépendante de  $u_{K_i}$  et nous retrouvons l'équation (1.10).

## 1.2.4 Résultats numériques

### Solution analytique dans le cas stationnaire

On résout l'équation suivante sur  $\Omega = ]0, 1[ \times ]0, 1[ \times ]0, L[$

$$-div(\overline{\overline{D}}\nabla u) = f$$

avec

$$\overline{\overline{D}}(x, y) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ et } f = (2.0 + \frac{1}{L^2})\pi^2 \sin(\pi x) \sin(\pi y) \sin(\frac{\pi}{L}z). \quad (1.13)$$

### Conditions aux limites

Nous choisissons  $u = 0$  sur  $\Gamma$ . La solution analytique s'écrit donc :  $u = \sin(\pi x) \sin(\pi y) \sin(\frac{\pi}{L}z)$ .

Nous étudions 3 problèmes ( $L = 1$ ,  $L = 0.1$  et  $L = 10$ .) avec un maillage grossier (que l'on raffine 5 fois) constitué d'environ 25 nœuds et 50 tétraèdres. Pour les problèmes 2 et 3, le maillage est déduit du maillage initial par affinité de rapport  $L$  dans la direction de l'axe des  $z$ . Les résultats obtenus dans le tableau 1.3 pour les Éléments finis mixtes hybrides (EFMH) [30, 40], pour la méthode VFMPFA développée dans [1, 2, 71, 72, P6] et pour le schéma présenté dans le paragraphe (1.2) (VFSYM3) montrent que les EFMH sont un peu plus précis pour le problème isotrope. En revanche, pour les problèmes 2 et 3, comme en dimension 2, la précision pour les EFMH se dégrade fortement. Dans ces 2 cas, le schéma VFMPFA devient divergent.

D'autre part, les ordres de convergence des deux méthodes, calculés sur les figures 1.5 et 1.6 confirment la dégradation de la précision des EFMH. Soulignons cependant qu'elle reste convergente, comme démontré dans [24, 30].

	EFMH	VFMPFA	VFSYM3
<i>Problème (1)</i>	$3.88 \times 10^{-3}$	$4.28 \times 10^{-3}$	$1.02 \times 10^{-2}$
<i>Problème (2)</i>	$3.23 \times 10^{-1}$	non convergence en espace	$3.62 \times 10^{-2}$
<i>Problème (3)</i>	$1.05 \times 10^{-1}$	non convergence en espace	$1.61 \times 10^{-2}$

TABLE 1.3 – Tableau des erreurs  $L^2$  par rapport à la solution analytique pour les 3 problèmes et les 3 discrétisations sur le maillage fin.

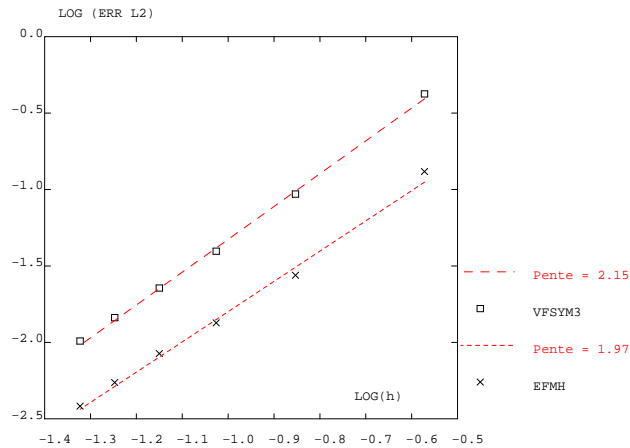


FIGURE 1.5 – Ordre du schéma avec les EFMH et VFSYM3 pour  $L = 1$  sur un maillage de tétraèdres.

### 1.2.5 Application à un scénario de sûreté sur le Site de Bure

Nous rappelons tout d'abord les équations du modèle du type hydraulique-transport.

#### Modélisation de l'écoulement

L'écoulement d'un fluide dans un milieu poreux s'écrit à l'aide de la loi de Darcy :

$$\begin{cases} \operatorname{div} \vec{U} &= 0, \\ \vec{U} &= -\overline{\overline{K}} \nabla h \end{cases} \quad (1.14)$$

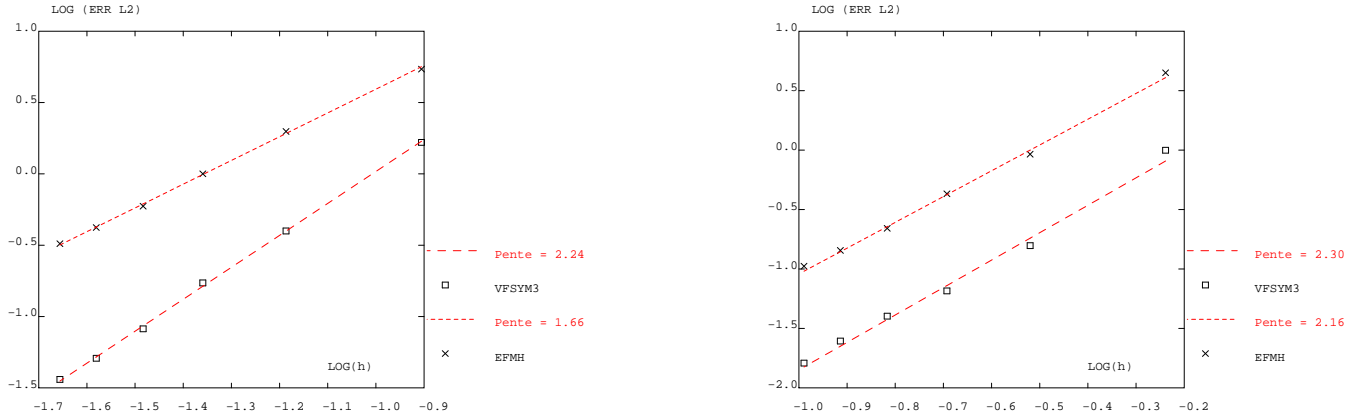


FIGURE 1.6 – Ordre du schéma avec les EFMH et VFSYM3 pour  $L = 0.1$  (à gauche) et pour  $L = 10$  (à droite) sur un maillage de tétraèdres.

où  $\overline{\overline{K}}$  désigne le tenseur de perméabilité et  $h$  la charge hydraulique.

### Modélisation de la migration de radionucléides

Le transport de radionucléides ( $RN$ ) dans un milieu poreux est simulé à l'aide d'une équation de transport par diffusion, dispersion et convection qui s'écrit :

$$\omega R \frac{\partial C}{\partial t} + \omega R \lambda C + \text{div} C \vec{U} = \text{div} \overline{\overline{DifDisp}} \nabla C + S, \quad (1.15)$$

avec :

- $\omega$ , la porosité,
- $R$ , le coefficient de retard du  $RN$  dans le milieu,
- $C$ , la concentration en  $RN$ ,
- $\lambda$ , la constante de décroissance radioactive du  $RN$ ,
- $\vec{U}$ , le champ de vitesse provenant de l'écoulement,
- $S$ , le terme source,
- $\overline{\overline{DifDisp}}$ , le tenseur de dispersion-diffusion.

Le tenseur de diffusion-diffusion a pour composantes :

$$DifDisp_{ij} = ((D_e + D_T \|\vec{U}\|) \delta_{ij}) + (D_L - D_T) \frac{U_i U_j}{\|\vec{U}\|}. \quad (1.16)$$

- $D_e$  désigne le coefficient de diffusion effective,
- $D_L$  et  $D_T$ , les coefficients de dispersion longitudinale et transverse.

L'ANDRA a pour objectif d'évaluer la faisabilité d'un stockage de déchets de haute activité et à vie longue en formation géologique profonde. Dans le cadre de cette démonstration de sûreté, l'ANDRA a défini un scénario d'évolution normale. On considère ici que les composants ne sont pas perturbés significativement par des événements internes ou externes non prévus. On s'intéresse à l'écoulement et au

Strate hydrogéologique	Epaisseur ( <i>m</i> )	Porosité (%)	Diffusion effective ( $m^2 \cdot s^{-1}$ )	Dispersivité $D_L, D_T$ ( <i>m</i> )
Tithonien	variable	10	$10^{-14}$	0., 0.
Kimméridgien	106	10	$10^{-14}$	0., 0.
Oxfordien L2a-b	165	6	$10^{-14}$	0., 0.
Oxfordien Hp1-Hp4	50	18	$10^{-12}$	1600., 1.
Oxfordien C3a-C3b	60	1	$4 \times 10^{-12}$	6., 0.6
Callovo-Oxfordien	135	1	$4 \times 10^{-12}$	6., 0.6

TABLE 1.4 – Données du modèle de transport.

transport de l'iode 129 des déchets C vitrifiés pour le compartiment "milieu géologique" comme décrit dans [80, 84] avec les caractéristiques physiques et géométriques du tableau 1.4. Il s'agit d'un milieu poreux saturé multicouches de propriétés contrastées (perméabilité, diffusion, dispersion et porosité). Nous reprenons la figure 1.7 représentée dans [80], qui est une coupe verticale du modèle géologique.

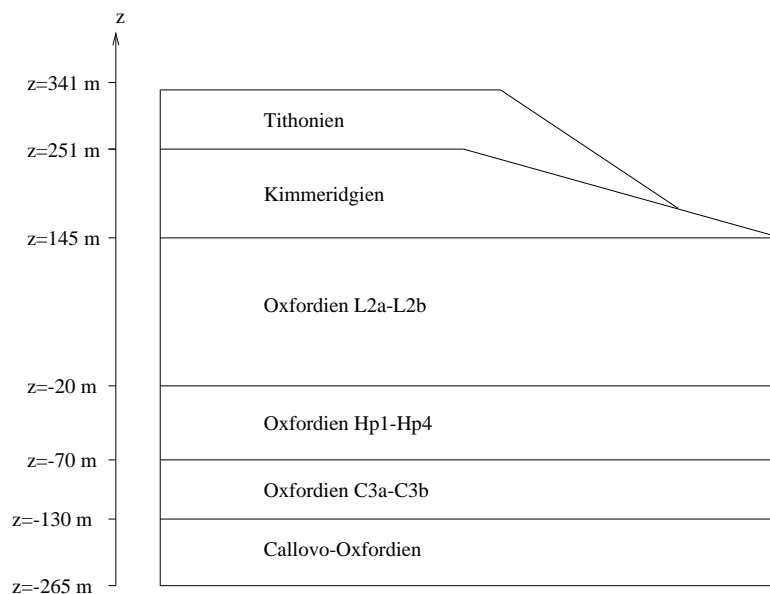


FIGURE 1.7 – Coupe schématique du modèle géologique [80].

Le maillage est constitué d'hexaèdres et de prismes (figure 1.8). Il a été déduit d'un travail effectué en 2004 [87]. Il a la propriété de suivre la frontière du domaine étudié de manière exacte pour ce qui concerne les coupes horizontales. Pour les coupes verticales, les frontières sont approchées à nouveau par des marches en escalier.

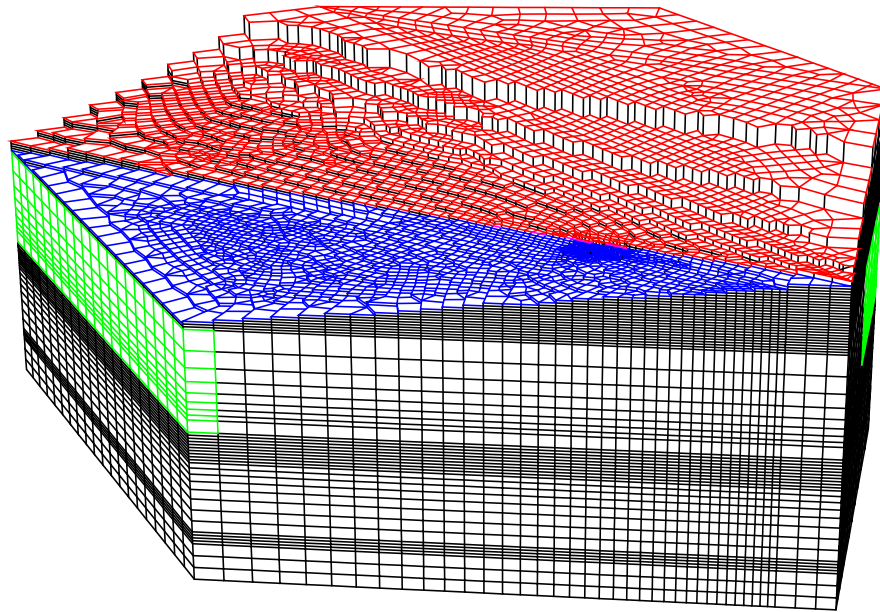


FIGURE 1.8 – Maillage d’hexaèdres et de prismes constitué de 190000 mailles d’après [87].

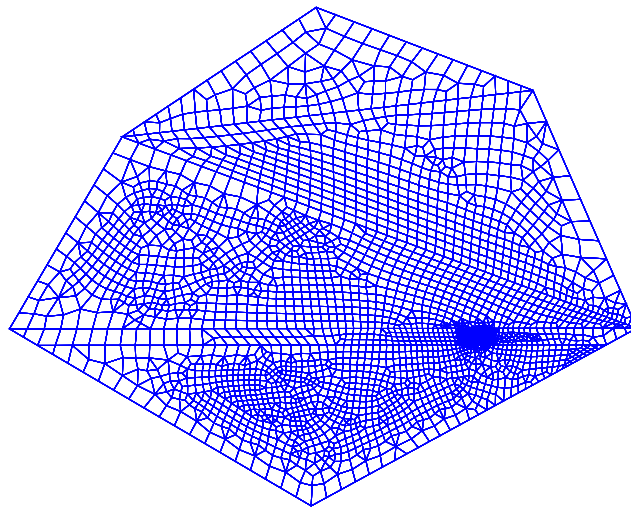


FIGURE 1.9 – Coupe horizontale dans le plan du stockage.

## Modélisation de l'écoulement

Ce type de calcul ne présente pas de difficultés particulières. Pour tous les plans de coupe considérés, nous observons des charges très proches de celles obtenues dans [71].

## Modélisation du transport

### Comparaison entre la méthode VFSYM3 et la méthode VFMPFA

Nous utilisons la liste de pas de temps suivante :

- $\Delta t = 250ans$  de 10000 ans à 100000 ans
- $\Delta t = 1000ans$  de 100000 ans à 300000 ans
- $\Delta t = 2000ans$  de 300000 ans à 500000 ans
- $\Delta t = 5000ans$  de 500000 ans à  $10^6$  ans.

Afin de valider numériquement le nouveau schéma sur un calcul de sûreté en dimension 3, nous modifions les données pour la couche géologique "Oxfordien-Hp1-4". Nous choisissons  $\alpha_L = 16$  pour que la méthode VFMPFA reste stable. Les autres caractéristiques ne sont pas changées. Ceci permet d'effectuer des comparaisons entre les deux schémas numériques. Soulignons que ce changement consiste à changer le rapport d'anisotropie qui est égal à 16 au lieu de 1600 initialement. Du point de vue de la modélisation, cette modification n'est pas anodine puisqu'elle est effectuée dans une couche géologique correspondant à un exutoire ou un aquifère.

Nous comparons les isovaleurs de concentration observées aux temps  $t = 300000$  et  $t = 10^6$  années, dans les plans suivants :

- $z = -130m$  au toit du Callovo-Oxfordien (Figure 1.10),
- $z = -197,5m$  dans le plan du stockage (Figure 1.11).

Pour tous ces plans de coupe, nous observons que les panaches sont très proches pour les deux algorithmes. Notons également que le schéma VFSYM3 se comporte mieux pour ce qui concerne les propriétés de monotonie.

Cette comparaison valide donc la nouvelle approche pour des calculs réalistes en dimension 3.

### Cas fortement anisotrope

Nous reprenons la valeurs initiale  $D_L = 1600$  de la dispersion dans la couche géologique "Oxfordien-Hp1-4". Les pas de temps sont les mêmes que dans le paragraphe précédent. Avec la méthode VFMPFA (Figure 1.12), nous observons de fortes instabilités se développer pour les coupes horizontales  $z = -30m$  et  $z = -50m$ , ce qui correspond à une zone où le rapport d'anisotropie est égal à 1600. Avec la méthode VFSYM3, pour  $z = -50m$ , nous vérifions que le schéma reste stable avec les isovaleurs de concentration observées aux temps  $t = 11000, 50000, 100000, 300000, 500000$  et  $10^6$  années (Figure 1.13). Notons néanmoins que de légères oscillations apparaissent en cours de calcul. Cette perte de monotonie vient de l'approximation du terme diffusif. Nous retrouvons le comportement habituel des schémas linéaires classiques.

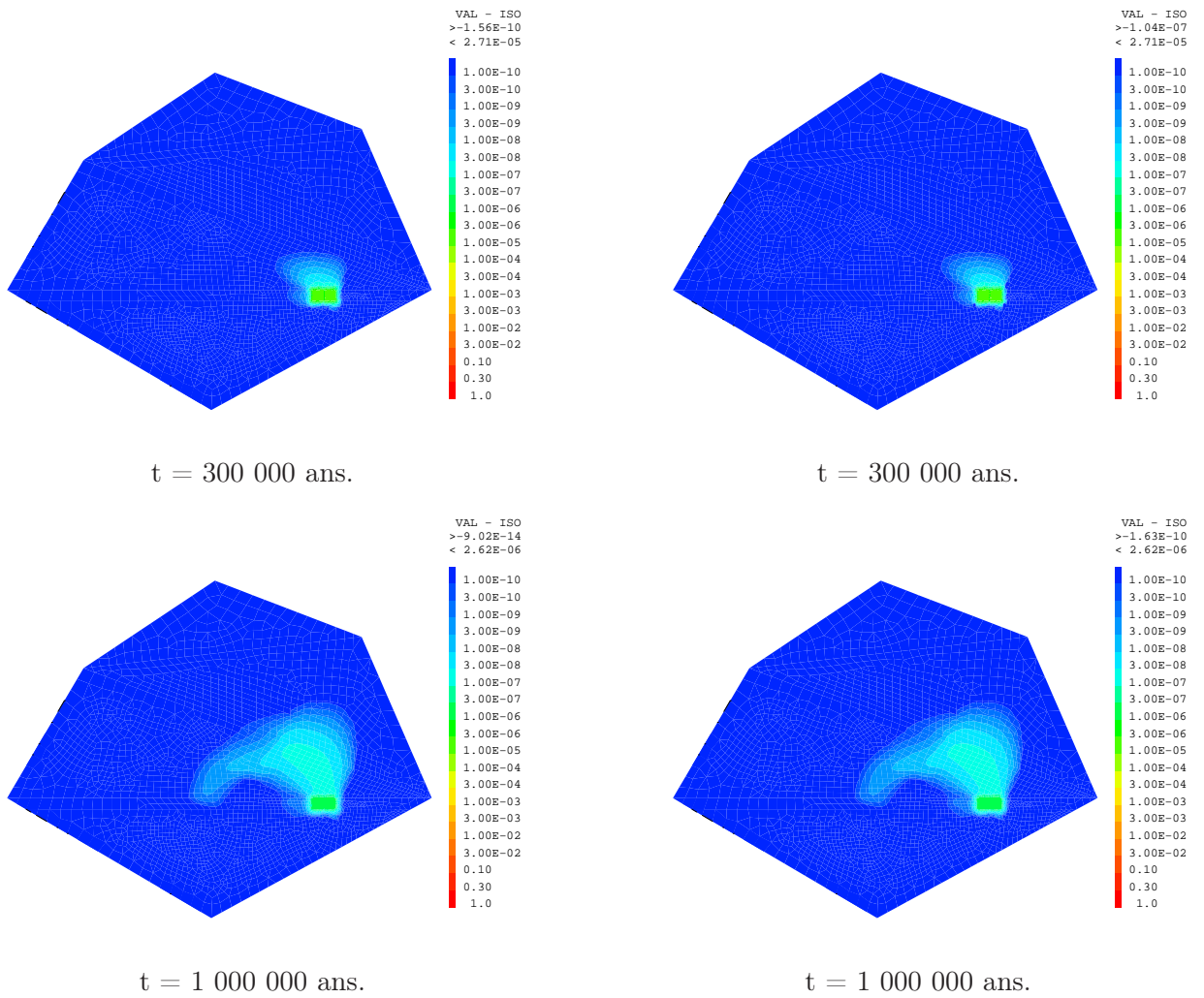


FIGURE 1.10 – Cartes de concentrations d'iode 129 dans l'Oxfordien C3a-C3b, en  $z=-130$  m, VFSYM3 (à gauche : valeur minimum  $-1.56 \times 10^{-10}$ ), VFMPFA (à droite : valeur minimum  $-1.04 \times 10^{-7}$ ), en  $mol/m^3$ , à  $t=300\,000$  et  $1\,000\,000$  ans,  $D_L = 16$  dans la couche géologique "Oxfordien-Hp1-4" .

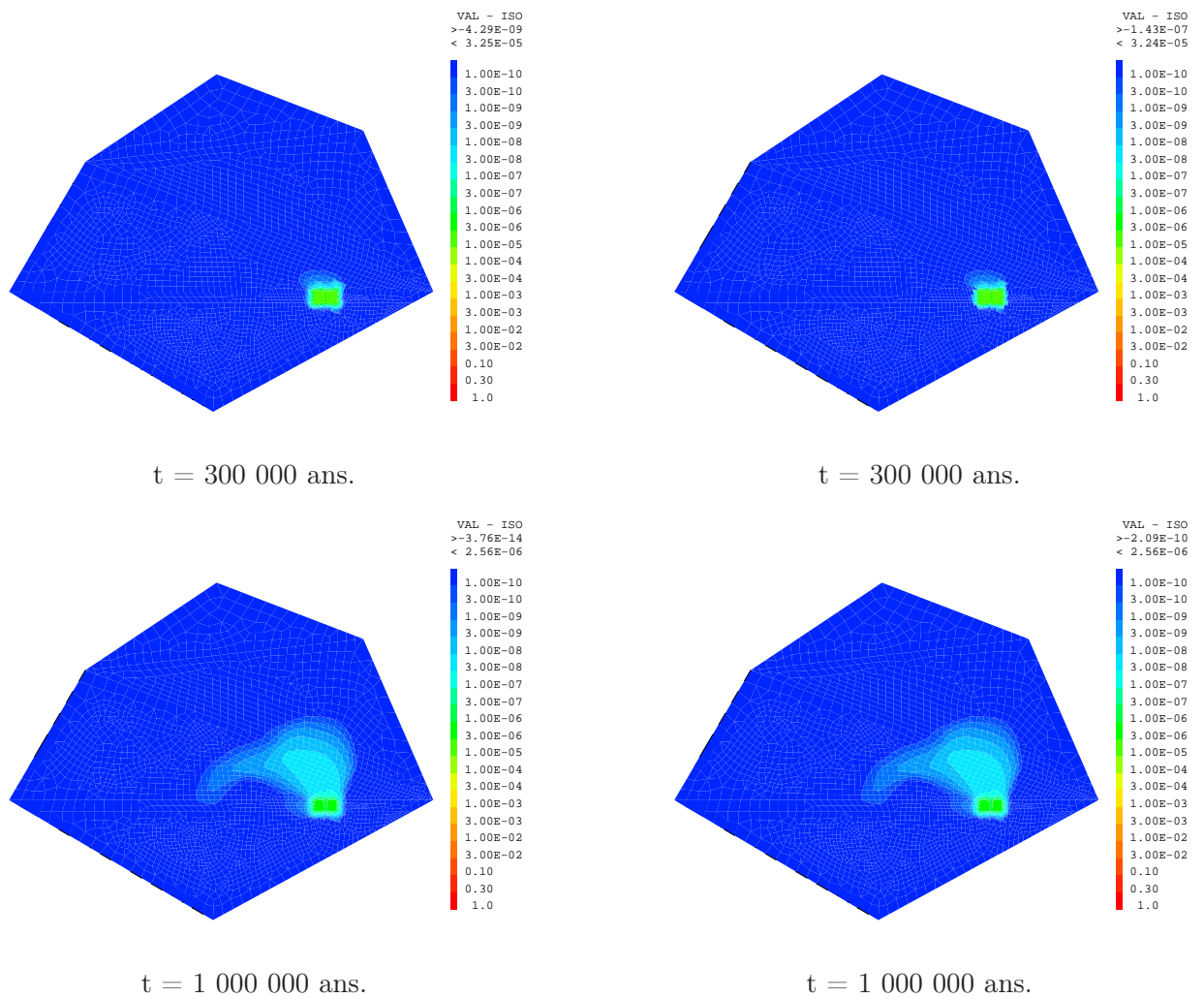


FIGURE 1.11 – Cartes de concentrations d'iode 129 dans le Callovo-Oxfordien, dans le plan du stockage, en  $z=-197.5$  m, VFSYM3 (à gauche : valeur minimum  $-4.29 \times 10^{-9}$ ), VFMPFA (à droite : valeur minimum  $-1.43 \times 10^{-7}$ ), en  $mol/m^3$ , à  $t=300\,000$  et  $1\,000\,000$  ans,  $D_L = 16$  dans la couche géologique "Oxfordien-Hp1-4".



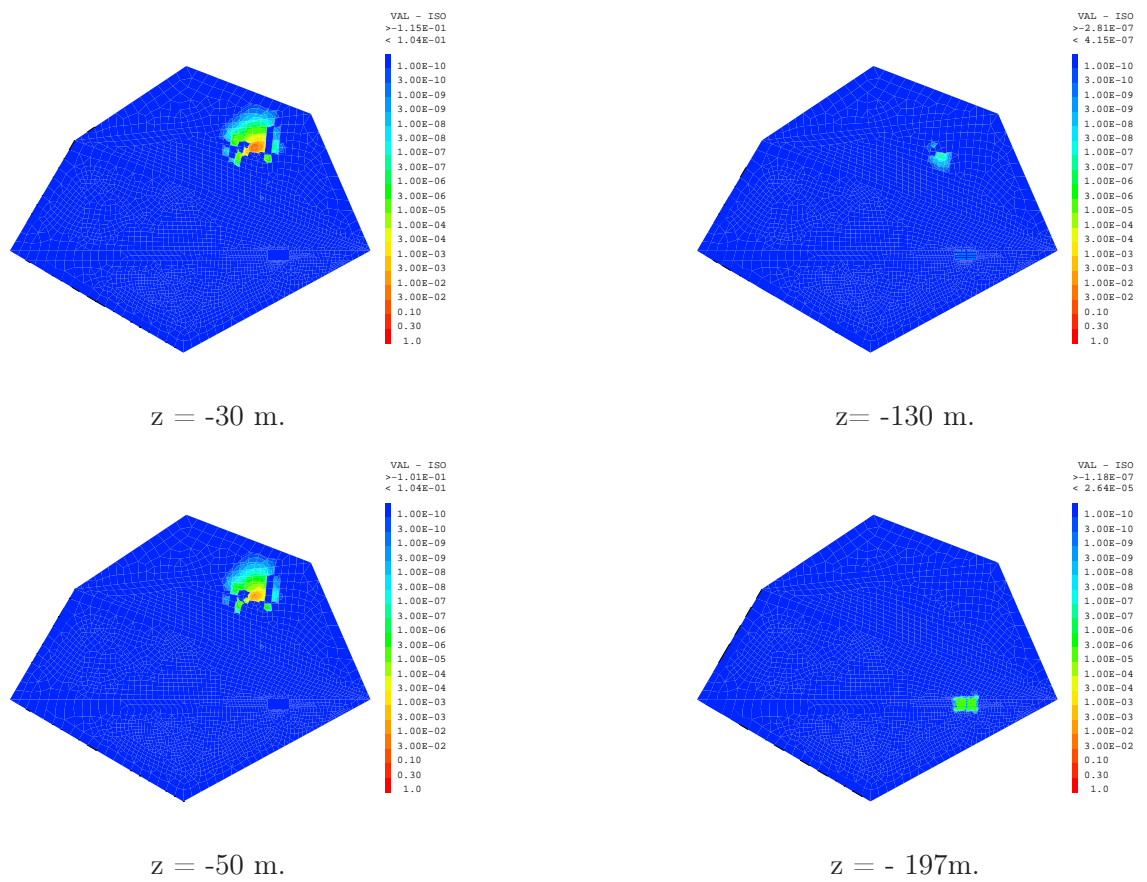


FIGURE 1.12 – Cartes de concentrations d'iode 129 calculées avec le schéma VFMPFA pour une forte anisotropie, en  $mol/m^3$ , à  $t= 21\ 000$  ans.

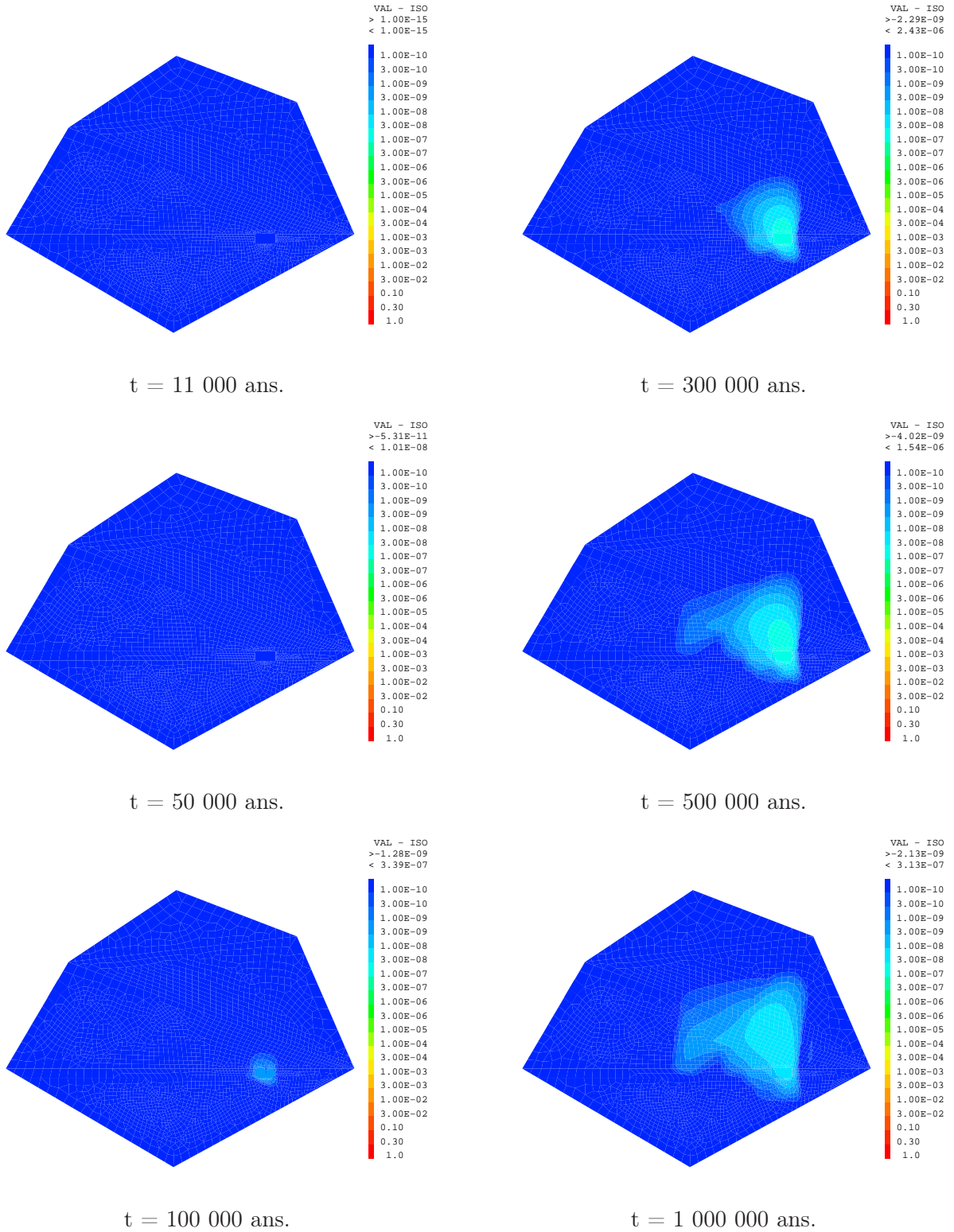


FIGURE 1.13 – Cartes de concentrations d'iode 129 dans l'Oxfordien Hp1-Hp4, en  $z=-50$  m avec le schéma VFSYM3 pour une forte anisotropie, en  $mol/m^3$ , à  $t=11\ 000$ ,  $50\ 000$ ,  $100\ 000$ ,  $300\ 000$ ,  $500\ 000$  et  $1\ 000\ 000$  ans (valeur minimum  $-4.02 \times 10^{-9}$ ).

### 1.3 Conclusion

Nous avons donc montré le bon comportement des schémas proposés dans des situations très anisotropes. De manière surprenante, nous avons mis en évidence les fortes imprécisions des EFMH. Pour ce qui concerne les oscillations, elles apparaissent pour les méthodes VFSYM comme pour l'ensemble des schémas classiques de la littérature. Par la suite, nous avons cherché à les supprimer avec des formulations linéaires (chapitre 2) ou en introduisant des expressions non linéaires (chapitres 4 et 5).

## Chapitre 2

# Un schéma linéaire vérifiant le principe du maximum pour des opérateurs de diffusion très anisotropes sur des maillages déformés

Dans les années 2008-2009, nous avons cherché à résoudre le problème suivant : existe-t-il des schémas linéaires convergents discrétisant des termes de diffusion sur des maillages déformés, ou avec des tenseurs très anisotropes, préservant le principe du maximum ? Nous montrons dans ce chapitre que la réponse est positive. Nous effectuons une synthèse de la publication [P13].

### 2.1 Introduction

Nous présentons et analysons un algorithme linéaire de type différences finies généralisées pour un opérateur de diffusion anisotrope satisfaisant le principe du maximum sur des maillages déformés.

### 2.2 Différences finies généralisées

Soit un domaine polygonal convexe  $\Omega$  de frontière  $\Gamma$  de dimension 2. Nous considérons le problème elliptique suivant :  $-div \overline{\overline{D}}(x) \nabla u = f$  avec  $u$ , la solution recherchée,  $f$ , une fonction dans  $C^0(\Omega)$  et  $\overline{\overline{D}}(x)$ , un tenseur (2,2) symétrique défini positif homogène régulier dont les composantes sont dans  $C^2(\Omega)$ . D'autre part, les conditions aux limites sont du type Dirichlet.

#### 2.2.1 Cas isotrope : $\overline{\overline{D}} = Id$

Pour un maillage de polygones quelconques de  $\Omega$  constitué de  $N_{ma}$  mailles, nous notons  $\mathcal{B} = \{X_i\}_{\{1 \leq i \leq N_{ma} + N_f\}}$ , l'ensemble constitué des  $N_{ma}$  barycentres de chaque cellule et de  $N_f$  points situés sur la frontière ;  $(x_i, y_i)$ , les coordonnées de  $X_i$ . Nous généralisons les différences finies à la manière de [57]. Pour une fonction  $g(x, y)$  de classe  $C^2$  sur

$\Omega$ , le développement en série de Taylor autour du point  $(x_i, y_i)$  s'écrit :

$$g_j = g_i + \Delta x_j \frac{\partial g_i}{\partial x} + \Delta y_j \frac{\partial g_i}{\partial y} + \frac{\Delta x_j^2}{2} \frac{\partial^2 g_i}{\partial x^2} + \frac{\Delta y_j^2}{2} \frac{\partial^2 g_i}{\partial y^2} + \Delta x_j \Delta y_j \frac{\partial^2 g_i}{\partial x \partial y} + \mathcal{O} \left( \sqrt{\Delta x_j^2 + \Delta y_j^2}^3 \right) \quad (2.1)$$

avec  $\Delta x_j = x_j - x_i$ ,  $\Delta y_j = y_j - y_i$ ,  $g_j = g(x_j, y_j)$  et  $g_i = g(x_i, y_i)$ . Nous cherchons à discrétiser l'opérateur  $\frac{\partial^2 g_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 g_i}{\partial y^2}$ . Nous considérons tout d'abord le système linéaire  $MU = B$ , avec  $U = (u_{j_{\{1 \leq j \leq J\}}})$ ,  $J$  étant le nombre de points apparaissant dans le stencil du schéma,

$$M = \begin{pmatrix} \Delta x_1 & \dots & \Delta x_J \\ \Delta y_1 & \dots & \Delta y_J \\ \Delta x_1^2 - \Delta y_1^2 & \dots & \Delta x_J^2 - \Delta y_J^2 \\ \Delta x_1 \Delta y_1 & \dots & \Delta x_J \Delta y_J \end{pmatrix} \text{ et } B = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Par la suite, nous mettons en évidence une condition géométrique suffisante pour qu'il existe une solution positive non nulle au système (2.2).

Soit un repère  $(X_i, \vec{x}, \vec{y})$  et un ensemble de 16 secteurs délimités par les droites  $\theta = \frac{\pi}{8}$ ,  $\theta = -\frac{\pi}{8}$ ,  $\theta = \frac{3\pi}{8}$ ,  $\theta = -\frac{3\pi}{8}$ ,  $\theta = \frac{\pi}{4}$ ,  $\theta = -\frac{\pi}{4}$ ,  $\theta = 0$ ,  $\theta = \frac{\pi}{2}$  (Figure 2.1).

**Hypothèse 2.2.1** Nous supposons qu'il existe au moins un point  $X_j \in \mathcal{B}$  dans chaque secteur.

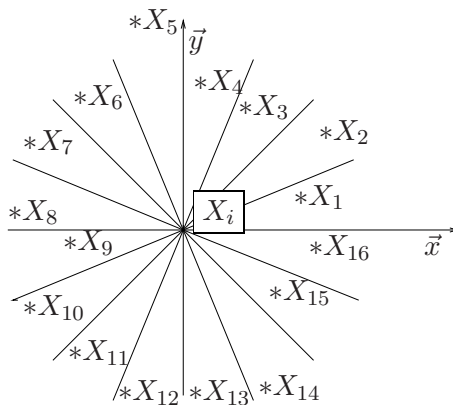


FIGURE 2.1 – 16 secteurs autour du point  $X_i$ .

Dans [P13], nous prouvons la propriété suivante :

**Proposition 2.2.2** Si l'hypothèse 2.2.1 est satisfaite, alors il existe une solution  $U$  non nulle qui est positive satisfaisant  $MU = B$ .

**Remarque 2.2.3** On pose alors  $Z = (z_{j_{\{j=1,16\}}})$  qui vérifie  $Z = \nu U$  avec

$$\nu = \frac{2}{\sum_{j=1,16} u_j \Delta x_j^2} = \frac{2}{\sum_{j=1,16} u_j \Delta y_j^2} \text{ et on approche l'expression } \frac{\partial^2 g_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 g_i}{\partial y^2} \text{ par } \sum_{j=1,16} z_j (g_j - g_i), \text{ ce qui}$$

définit le schéma nommé DFPMD (Différences finies et principe du maximum discret).

## 2.2.2 Cas anisotrope

Le tenseur  $\overline{\overline{D}}$  étant symétrique, il est diagonalisable dans une base orthogonale de vecteurs propres. Soient  $(\lambda_1, \lambda_2)$  ses 2 valeurs propres. On définit  $\theta_{\lambda_1, \lambda_2} = \arctan(\sqrt{\frac{\lambda_2}{\lambda_1}})$  et le repère  $(X_i, \vec{X}, \vec{Y})$  où  $\vec{X}$  et  $\vec{Y}$  sont les vecteurs propres normés de  $\overline{\overline{D}}$ . On construit alors 16 nouveaux secteurs à l'aide des droites  $\theta = \frac{\theta_{\lambda_1, \lambda_2}}{2}, \theta = -\frac{\theta_{\lambda_1, \lambda_2}}{2}, \theta = \frac{\pi}{4} + \frac{\theta_{\lambda_1, \lambda_2}}{2}, \theta = -\frac{\pi}{4} - \frac{\theta_{\lambda_1, \lambda_2}}{2}, \theta = \theta_{\lambda_1, \lambda_2}, \theta = -\theta_{\lambda_1, \lambda_2}, \theta = 0, \theta = \frac{\pi}{2}$ . On suppose qu'il existe  $X_j \in \mathcal{B}$  dans chaque secteur. La proposition 2.2.2 se généralise.

## 2.3 Propriétés

Pour chaque point  $X_i \in \mathcal{B}$  à l'intérieur du maillage, nous ajoutons le nombre suffisant de points sur la frontière pour que l'hypothèse 2.2.1 soit vérifiée. Ceci définit le nombre  $N_f$ .

**Définition 2.3.1** *Nous définissons  $rmin_i$ , le rayon minimum du cercle tel que les 16 points  $X_j \in \mathcal{B}$  définis dans l'hypothèse 2.2.1 soient à l'intérieur de ce cercle.*

Nous notons  $h = \max_{1 \leq i \leq N_{ma}} rmin_i$ ,  $u_h$  les valeurs de  $u$  en  $X_i$ ,  $f_h$  les valeurs de  $f$  en  $X_i$  et  $A_h$  la matrice associée au schéma tel que  $A_h u_h = f_h$ .

Dans [P13], nous montrons les propositions suivantes :

**Proposition 2.3.2** (Consistance) *Avec l'hypothèse 2.2.1, si  $h \rightarrow 0$  lorsque l'on raffine le maillage, alors  $\sum_{j=1,16} z_j (g_j - g_i) = \frac{\partial^2 g_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 g_i}{\partial y^2} + \mathcal{O}(h)$ .*

**Proposition 2.3.3** *Si l'hypothèse 2.2.1 est vérifiée et si  $A_h$  est irréductible alors le schéma est non oscillant.*

Nous utilisons que la matrice  $A_h$  est à diagonale fortement dominante.

**Proposition 2.3.4** (Stabilité) *Avec l'hypothèse 2.2.1, si  $A_h$  est irréductible, alors la matrice  $A_h$  vérifie  $\|A_h^{-1}\|_\infty \leq G$  avec  $G > 0$  indépendant de  $h$ .*

**Corollaire 2.3.5** *Avec l'hypothèse 2.2.1, si  $A_h$  est irréductible et si  $h \rightarrow 0$  lorsque l'on raffine le maillage, le schéma DFPMD est convergent car il est consistant et stable. Il est au moins d'ordre 1.*

**Remarque 2.3.6** *Dans nos applications numériques, la matrice  $A_h$  est toujours irréductible.*

## 2.4 Résultats numériques

Nous prenons les notations de l'annexe B. Nous testons ici numériquement  $f$  dans  $C^\infty(\Omega)$  et  $f$  discontinue (même si nous ne sommes plus dans les hypothèses de régularité initialement prévues) afin de mettre en évidence les oscillations des schémas classiques. Dans l'ensemble des calculs qui suivent, nous ajoutons autant de points que nécessaire sur chaque arête de la frontière pour que l'hypothèse 2.2.1 soit vérifiée.

$h$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{64}$	$\frac{1}{128}$
$Nma$	64	256	1024	4096	16384	65536
Erreur $L^2$	$9.0 \times 10^{-2}$	$2.8 \times 10^{-2}$	$8.9 \times 10^{-3}$	$4.4 \times 10^{-3}$	$1.77 \times 10^{-3}$	$8.12 \times 10^{-4}$
Ordre		1.66	1.68	1.0	1.32	1.12

TABLE 2.1 – Erreur  $L^2$  par rapport à une solution analytique pour la méthode DFPMD et ordre en fonction du pas de discrétisation, tenseur isotrope, maillage de triangles allongés.

### 2.4.1 Solution analytique avec des triangles allongés

On s'intéresse au test numérique décrit dans [27]. Le domaine de calcul  $\Omega = ]0, 1[ \times ]0, 0.3[$  est maillé en rectangles découpés en 4 triangles. Ce cas est isotrope. Les conditions aux limites de Dirichlet sont  $u = 0$  sur  $\partial\Omega$ . Nous cherchons à approcher la solution analytique  $u_{an}(x, y) = \sin(\pi x)\sin((\pi/0.3)y)$  et  $f = -\text{div}\nabla u_{an}$ . Nous vérifions dans le tableau 2.1 la convergence de la méthode DFPMD qui est ici numériquement d'ordre 1.

### 2.4.2 Triangles allongés et $f$ discontinue

Nous considérons le cas où  $f = 1$  sur  $]0, 0.5[ \times ]0, 0.075[$  et  $f = 0$  sinon. Les autres données ne sont pas changées.

Nous représentons sur les figures 2.2 et 2.3 les calculs obtenus avec les éléments finis mixtes hybrides (EFMH) [40, P6] et avec l'algorithme VFMPFA [1, 2]. D'autre part, avec le schéma DFPMD (figure 2.4), nous vérifions que toutes les valeurs obtenues sont positives.

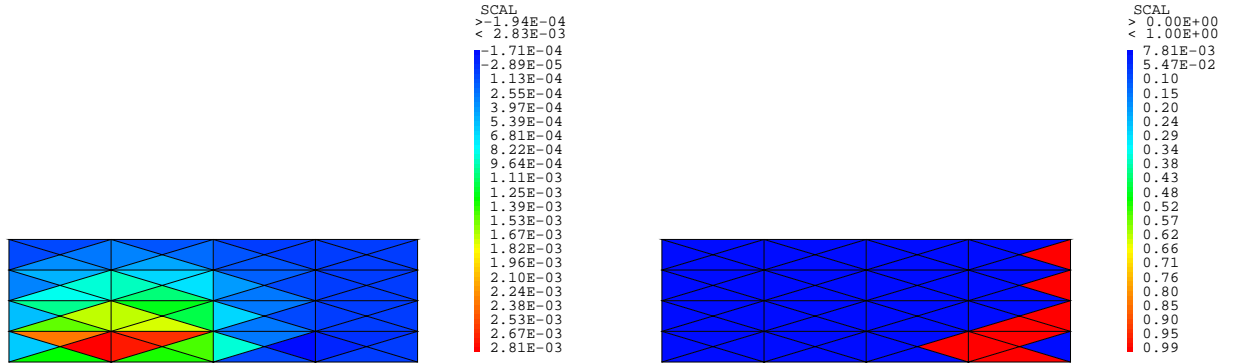


FIGURE 2.2 – EFMH (solution et lieu des valeurs négatives) 64 mailles, valeur minimum  $-1.94 \times 10^{-4}$ , 12 % d'oscillations,  $f$  discontinue, tenseur isotrope, maillage de triangles allongés.

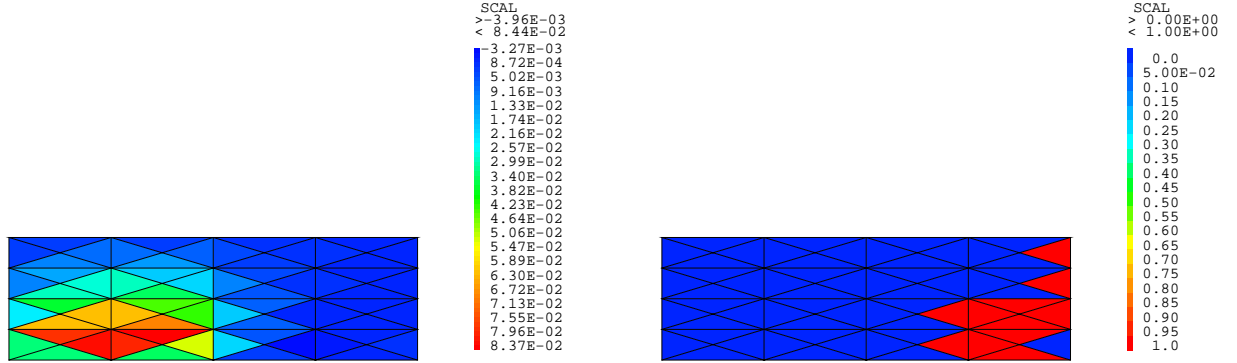


FIGURE 2.3 – VFMPFA (solution et lieu des valeurs négatives) 64 mailles, valeur minimum  $-3.96 \times 10^{-2}$ , 17 % d'oscillations,  $f$  discontinue, tenseur isotrope, maillage de triangles allongés.

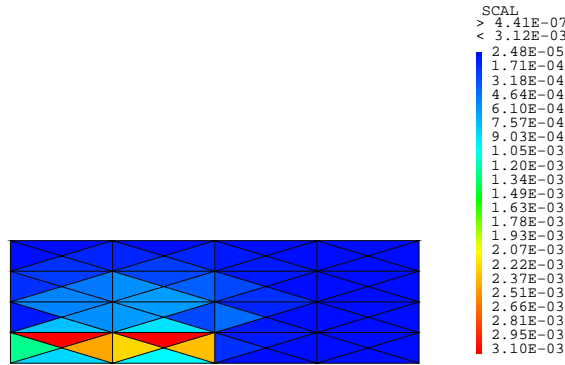


FIGURE 2.4 – DFPMD (solution numérique) 64 mailles, 0 % d'oscillations,  $f$  discontinue, tenseur isotrope, maillage de triangles allongés.

### 2.4.3 Solution analytique avec un tenseur très anisotrope

Nous reprenons ensuite un exemple inspiré par le test 9 et le test 5 dans [60]. Le domaine de calcul est défini par  $\Omega = ]0, 1[ \times ]0, 1[$  qui est maillé à l'aide de carrés. On considère la solution analytique  $u_{an}(x, y) = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$ . Le tenseur de diffusion s'écrit :  $\overline{\overline{D}} = R_\theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 10^{-3} \end{pmatrix} R_\theta^{-1}$  où  $R_\theta$  est la rotation d'angle  $\frac{3\pi}{8}$ . Le second membre satisfait  $f = -\text{div} \overline{\overline{D}} \nabla u_{an}$ . D'autre part, les conditions aux limites étant du type Dirichlet, nous imposons  $u = 0$  sur  $\partial\Omega$ . Les résultats obtenus dans le tableau 2.2 montrent que la méthode est ici numériquement d'ordre 2.



$h$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{64}$
$Nma$	16	64	256	1024	4096
Erreur $L^2$	$5.2 \times 10^{-1}$	$4.7 \times 10^{-1}$	$2.6 \times 10^{-1}$	$7.1 \times 10^{-2}$	$2.5 \times 10^{-2}$
Ordre		0.14	0.85	1.87	1.51
$h$	$\frac{1}{128}$	$\frac{1}{256}$	$\frac{1}{512}$		
$Nma$	16384	65536	262144		
Erreur $L^2$	$7.7 \times 10^{-3}$	$2.1 \times 10^{-3}$	$5.6 \times 10^{-4}$		
Ordre	1.68	1.85	1.92		

TABLE 2.2 – Erreur  $L^2$  par rapport à une solution analytique en fonction du pas en espace, méthode DFPMD, tenseur très anisotrope, maillage régulier.

#### 2.4.4 Tenseur très anisotrope et $f$ discontinue

Nous considérons le même domaine de calcul,  $f = 1$  sur le carré  $]0.25, 0.75[ \times ]0.25, 0.75[$  et  $f = 0$  ailleurs. Les conditions aux limites et le tenseur de diffusion ne sont pas modifiés. Nous présentons sur les figures 2.5 et 2.6 les solutions numériques et le lieu des valeurs négatives avec les éléments finis mixtes hybrides (EFMH) [40, P6] et avec l’algorithme VFSYM (chapitre 1). D’autre part, avec le schéma DFPMD (figure 2.7), nous vérifions que toutes les valeurs obtenues sont positives. Soulignons également que dans les zones où les schémas linéaires n’oscillent pas, les trois méthodes donnent des résultats similaires. Le schéma DFPMD semble donc encore consistant même si  $f$  est discontinue.

Schéma	EFMH	VFSYM	DFPMD
Val négatives (16 mailles)	62	37	0
Val négatives (16384 mailles)	19	7	0

TABLE 2.3 – Pourcentage de valeurs négatives,  $f$  discontinue, tenseur très anisotrope, maillage régulier.

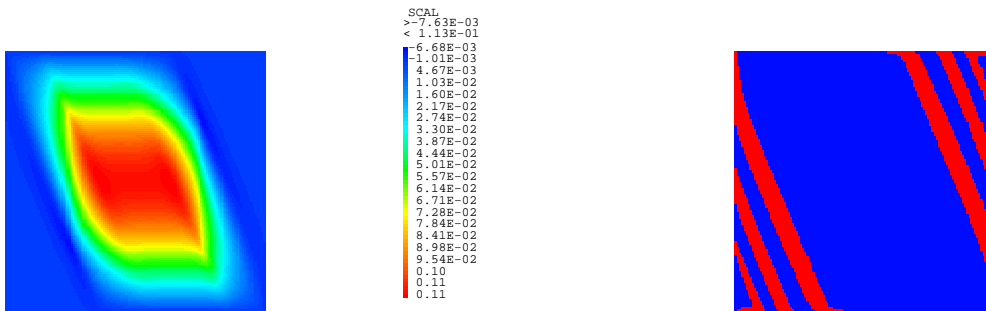


FIGURE 2.5 – EFMH (solution numérique et lieu des valeurs négatives) 16384 mailles, valeur minimum  $-7.6 \times 10^{-3}$ , 19 % d’oscillations,  $f$  discontinue, tenseur très anisotrope, maillage régulier.

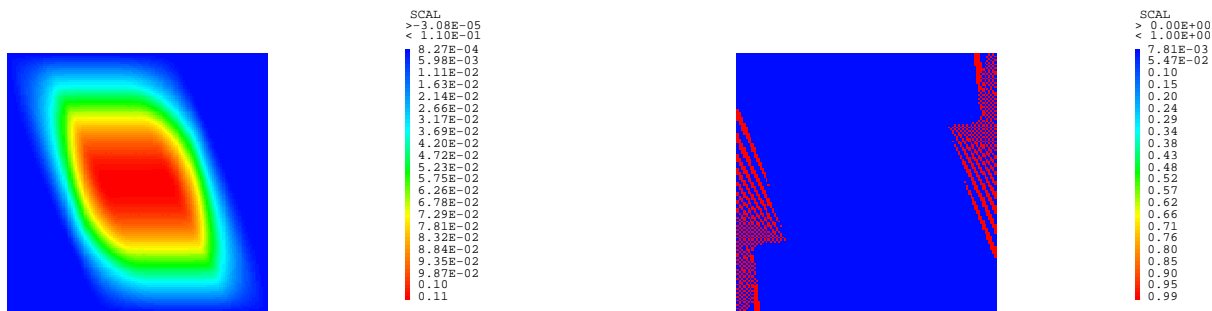


FIGURE 2.6 – VFSYM (solution numérique et lieu des valeurs négatives) 16384 mailles, valeur minimum  $-3.0 \times 10^{-5}$ , 7 % d'oscillations,  $f$  discontinue, tenseur très anisotrope, maillage régulier.

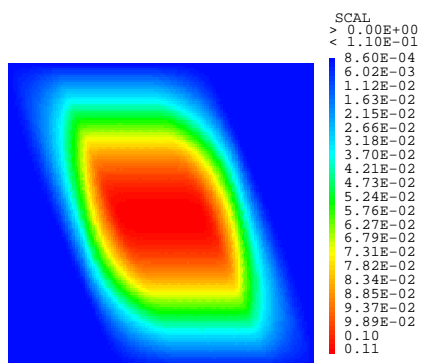


FIGURE 2.7 – DFPMD (solution numérique) 16384 mailles, 0 % d'oscillations,  $f$  discontinue, tenseur très anisotrope, maillage régulier.

## Chapitre 3

# Schéma centré sur des mailles de forme presque générale pour des opérateurs de diffusion

Après le développement de la méthode VFSYM, nous avons cherché à construire un schéma centré sur les mailles pour des cellules de forme générale avec un stencil le plus petit possible. Les techniques employées pour le schéma VFSYM n'étant pas généralisables aux maillages non conformes, nous nous sommes tournés vers les méthodes centrées de type schéma "gradient" (voir [54]).

Ce chapitre présente le résumé d'une publication dans International Journal On Finite Volumes [P20] avec T.H. Ong qui a effectué sa thèse de Novembre 2009 à Novembre 2012 au CEA à Saclay et à Paris-Est que j'ai co-encadré avec Jérôme Droniou puis avec Robert Eymard.

Nous considérons le problème elliptique du chapitre 2 dans un domaine polygonal  $\Omega$  de  $\mathcal{R}^N$  avec un tenseur  $\overline{\overline{D}}(x)$ , Lipschitz continu par morceaux pour  $x \in \Omega$  tel que ses valeurs propres appartiennent à  $[\underline{\lambda}, \overline{\lambda}]$  ( $0 < \underline{\lambda} \leq \overline{\lambda}$ ),  $f \in L^2(\Omega)$  et  $u_\partial$  définie sur  $\partial\Omega$ . Nous le réécrivons comme suit :

$$\begin{cases} \vec{q} = -\overline{\overline{D}}(x)\nabla u & \text{dans } \Omega, \\ \operatorname{div}\vec{q} = f & \text{dans } \Omega, \\ u = u_\partial & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases} \quad (3.1)$$

### 3.1 Présentation du schéma

Nous prenons les notations de l'annexe A pour le maillage primal  $\mathcal{M}$ . Nous construisons ensuite un autre maillage (dual)  $\mathcal{M}^*$  dont les sommets sont les barycentres des cellules de  $\mathcal{M}$ , qui sont reliés de part et d'autre de chaque face de  $\mathcal{M}$  (Figure 3.1). On note  $No^*$  l'ensemble des nœuds de  $\mathcal{M}^*$ .

**Hypothèse 3.1.1** *Nous supposons par la suite que le maillage  $\mathcal{M}^*$  existe et par conséquent :*  
 $\overline{\Omega} = \bigcup_{K^* \in \mathcal{M}^*} \overline{K^*}$ ,  $K^*$  étant une maille de  $\mathcal{M}^*$ .

**Remarque 3.1.2** *Cette hypothèse est la même que celle introduite dans les premières publications des méthodes dites DDFV [47, 61, 62] (Volumes finis en dualité discrète). Ce type de méthode a été par la suite étendue à des mailles de forme encore plus générale [63].*

Nous définissons également un troisième maillage  $\mathcal{M}^{**}$  qui est constitué de triangles qui divisent chaque

maille de  $\mathcal{M}^*$  (Figure 3.1). Les nœuds de  $\mathcal{M}^{**}$  sont notés  $No^{**}$ . Nous cherchons  $u_{K,K \in No^{**}}$ . Par la suite,

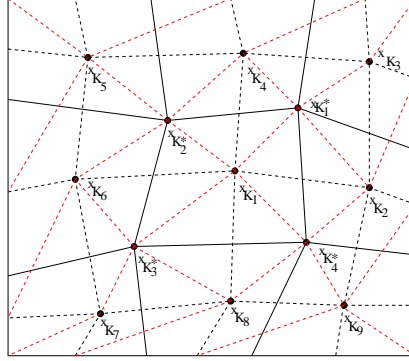


FIGURE 3.1 – Maillage primal  $\mathcal{M}$  (ligne continue), maillage dual  $\mathcal{M}^*$  (ligne pointillée en noir), troisième maillage  $\mathcal{M}^{**}$  (ligne pointillée en rouge).

nous utiliserons les fonctions de bases des éléments finis  $\mathbb{P}_1$ , nommées  $P(v)(x)$  sur le maillage  $\mathcal{M}^{**}$  qui sont continues sur  $\Omega$ . Nous définissons également un gradient discret  $\nabla_{\overline{D}}v$  à partir de  $v_{K,K \in No^{**}}$  et de  $\overline{D}$ . Les valeurs de  $u_{K,K \in No^{**}}$  sont déduites de la formulation variationnelle :

$$\int_{\Omega} \left( \overline{D}(x) \nabla_{\overline{D}} u(x) \right) \cdot \nabla_{\overline{D}} v(x) dx = \int_{\Omega} f(x) P(v)(x) dx \quad \text{pour tout } v \in No^{**}. \quad (3.2)$$

Le schéma est dénommé FECC (pour Finite Element Cell Centered scheme).

### 3.1.1 Cas isotrope homogène

La méthode coïncide avec les éléments finis  $P_1$  sur les triangles du maillage  $\mathcal{M}^{**}$ .

### 3.1.2 Cas anisotrope hétérogène

Pour simplifier la présentation, nous supposons que chaque nœud  $x_{K^*}$  du maillage est à l'intérieur des mailles duales associées. Chaque maille duale est alors divisée en triangles ayant  $x_{K^*}$  comme sommets communs (figure 3.2). Nous supposons aussi que  $\overline{D}$  est discontinu sur le triangle  $(x_K, x_L, x_{K^*})$  mais continu sur  $(x_K, x_{\sigma}, x_{K^*})$  et  $(x_L, x_{\sigma}, x_{K^*})$ .

Considérons  $T_{K,L,K^*}$ ,  $T_{K,L,L^*}$ ,  $T_{L,K,K^*}$  les triangles  $(x_K, x_{\sigma}, x_{K^*})$ ,  $(x_K, x_{\sigma}, x_{L^*})$ ,  $(x_L, x_{\sigma}, x_{K^*})$  et les vecteurs  $\vec{n}_{K,L,K^*}$ ,  $\vec{n}_{K^*}$ ,  $\vec{n}_{L,K,K^*}$ ,  $\vec{n}_{\sigma,K^*}$ ,  $\vec{n}_{\sigma,L^*}$ ,  $\vec{n}_{T_K}$  et  $\vec{n}_{T_L}$  orthonormaux aux arêtes  $[x_{K^*}x_L]$ ,  $[x_K, x_L]$ ,  $[x_{K^*}, x_K]$ ,  $[x_{K^*}, x_{\sigma}]$ ,  $[x_{L^*}, x_{\sigma}]$ ,  $[x_K, x_{\sigma}]$  et  $[x_{\sigma}, x_L]$  (figure 3.3). Les gradients sur  $T_{K,L,K^*}$  et sur  $T_{L,K,K^*}$  sont calculés à l'aide d'une formule de Green. Nous obtenons :

$$2|T_{K,L,K^*}| \nabla_{T_{K,L,K^*}} u = -(u_{K^*} - u_{\sigma}) |x_K x_{\sigma}| \vec{n}_{T_K} - (u_K - u_{\sigma}) |x_{K^*} x_{\sigma}| \vec{n}_{\sigma,K^*} \quad (3.3)$$

$$2|T_{L,K,K^*}| \nabla_{T_{L,K,K^*}} u = -(u_{K^*} - u_{\sigma}) |x_{\sigma} x_L| \vec{n}_{T_L} + (u_L - u_{\sigma}) |x_{K^*} x_{\sigma}| \vec{n}_{\sigma,K^*}. \quad (3.4)$$

**Hypothèse 3.1.3** Nous supposons que pour chaque maille telle que  $\overline{D}$  est discontinu, alors

l'expression  $Det = -\frac{|x_{K^*} x_{\sigma}| \vec{n}_{\sigma,K^*} \overline{D}_K |x_{K^*} x_K| \vec{n}_{L,K,K^*}}{|T_{K,L,K^*}|} + \frac{|x_{K^*} x_{\sigma}| \vec{n}_{\sigma,K^*} \overline{D}_L |x_{K^*} x_L| \vec{n}_{K,L,K^*}}{|T_{L,K,K^*}|}$  est différente

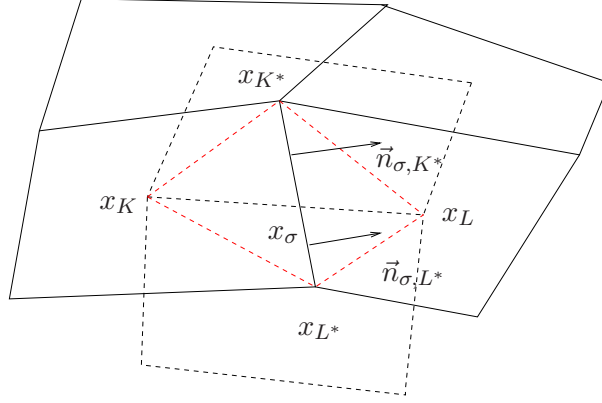


FIGURE 3.2 – Prise en compte d'un tenseur  $\overline{\overline{D}}$  discontinu.

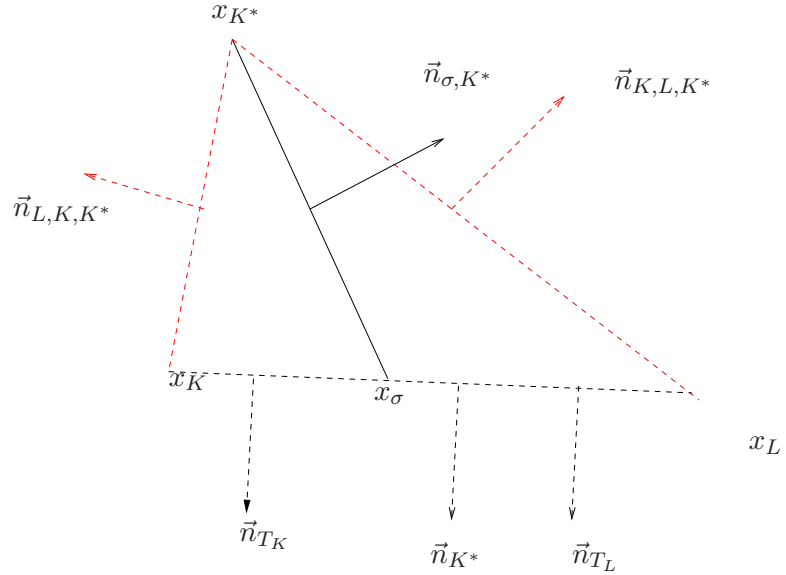


FIGURE 3.3 – Exemple d'un triangle où le tenseur  $\overline{\overline{D}}$  est discontinu.

de zéro.

Par continuité des flux sur l'interface  $[x_{K^*}, x_\sigma]$ , nous obtenons :

$$u_\sigma = \beta_K u_K + \beta_L u_L + \beta_{K^*} u_{K^*} \quad (3.5)$$

où  $\beta_K = \frac{|x_{K^*} x_\sigma| \vec{n}_{\sigma, K^*} \overline{\overline{D}}_K |x_{K^*} x_\sigma| \vec{n}_{\sigma, K^*}}{\text{Det}[T_{K, L, K^*}]}$ ,  $\beta_L = \frac{|x_{K^*} x_\sigma| \vec{n}_{\sigma, K^*} \overline{\overline{D}}_L |x_{K^*} x_\sigma| \vec{n}_{\sigma, K^*}}{\text{Det}[T_{L, K, K^*}]}$  et

$\beta_{K^*} = 1 - \beta_K - \beta_L$ . Nous déduisons  $\nabla_{\overline{\overline{D}}} u$  avec les équations (3.3) et (3.4), ce qui définit le schéma à l'aide de la formulation variationnelle (3.2).

### Variante du schéma précédent

La seule différence consiste à introduire le point  $x_\sigma$  défini dans [3] lorsqu'il existe. La valeur de  $u_\sigma$  ne dépend plus que de  $u_K$  et  $u_L$ . Nous écrivons :

$$u_\sigma = \beta_K u_K + \beta_L u_L \text{ avec } \beta_K + \beta_L = 1. \quad (3.6)$$

## 3.2 Une variante en modifiant le second membre

Le schéma consiste à modifier la formulation variationnelle en cherchant  $U = (u_{K,K \in N\sigma^{**}})$  vérifiant :

$$\int_{\Omega} \left( \overline{\overline{D}}(x) \nabla_{\overline{\overline{D}}} u(x) \right) \cdot \nabla_{\overline{\overline{D}}} v(x) dx = \int_{\Omega} f(x) P_{VF}(v)(x) dx \quad \text{pour tout } v \in N\sigma^{**}, \quad (3.7)$$

où

$$\begin{cases} \int_{\Omega} f(x) P_{VF}(v)(x) dx = \int_K f(x) dx \text{ pour } x \in K, K \in \mathcal{M} \text{ et } v \in N\sigma^*, \\ \int_{\Omega} f(x) P_{VF}(v)(x) dx = 0 \text{ pour } v \in N\sigma^{**} \text{ et } v \notin N\sigma^*. \end{cases} \quad (3.8)$$

## 3.3 Propriétés

Nous nous intéressons au vecteur  $U = (u_{K,K \in N\sigma^*})$ . Dans [P20], on montre les propriétés suivantes :

**Proposition 3.3.1** *Avec l'hypothèse 3.1.1 (et l'hypothèse 3.1.3 si  $\overline{\overline{D}}$  est discontinu), le vecteur  $U$  vérifie une égalité du type  $AU = B$  où  $A$  est une matrice symétrique définie positive creuse de dimension égale au nombre de mailles. Le schéma est donc centré sur les cellules.*

Nous montrons que l'on peut éliminer localement tous les degrés de liberté qui sont strictement à l'intérieur de chaque maille duale. La matrice obtenue a alors les mêmes propriétés que la matrice initiale issue de la formulation variationnelle (3.2).

**Proposition 3.3.2** *Avec l'hypothèse 3.1.1 (et l'hypothèse 3.1.3 si  $\overline{\overline{D}}$  est discontinu), pour des maillages de quadrilatères, le stencil du schéma est au plus égal à 9.*

Le stencil obtenu dépend directement du maillage en triangle de chaque maille duale.

**Hypothèse 3.3.3** *Nous supposons que chaque nœud  $x_{K^*}$  du maillage est à l'intérieur de la maille duale associée  $K^*$ .*

Dans le cas où  $\overline{\overline{D}}$  est discontinu sur  $[x_{K^*}, x_\sigma]$ , nous considérons les fonctions affines par morceaux associées à  $\overline{\overline{D}}$  vérifiant :

$$\overline{\overline{D}}_K \nabla_{T_{K,L,K^*}} u \cdot \vec{n}_{\sigma,K^*} = \overline{\overline{D}}_L \nabla_{T_{L,K,K^*}} u \cdot \vec{n}_{\sigma,K^*}.$$

**Proposition 3.3.4** *Avec les hypothèses 3.1.3, et 3.3.3, le schéma est exact pour les fonctions affines par morceaux associées à  $\overline{\overline{D}}$ .*

**Hypothèse 3.3.5** *Soit  $\theta$  un réel strictement positif. Nous supposons que*

$$\text{Det} \geq \theta \left( \frac{|x_{K^*} x_\sigma| \vec{n}_{\sigma,K^*} \overline{\overline{D}}_K |x_{K^*} x_\sigma| \vec{n}_{\sigma,K^*}}{|T_{K,L,K^*}|} + \frac{|x_{K^*} x_\sigma| \vec{n}_{\sigma,K^*} \overline{\overline{D}}_L |x_{K^*} x_\sigma| \vec{n}_{\sigma,K^*}}{|T_{L,K,K^*}|} \right) \text{ lorsqu'on raffine le maillage.}$$

**Proposition 3.3.6** *Avec les hypothèses 3.3.3 et 3.3.5, si la régularité du maillage (voir annexe A) est bornée lorsqu'on le raffine, le schéma est convergent.*

Voici quelques éléments de la preuve. Nous montrons tout d'abord que le schéma est coercif en utilisant la formulation variationnelle de la méthode. Pour la consistance, nous réécrivons le schéma sous forme de volumes finis. Nous montrons alors que les flux sont consistants dans les zones où  $\overline{\overline{D}}$  est continu. Dans les zones où  $\overline{\overline{D}}$  est discontinu, les flux ne sont pas consistants, mais cela n'empêche pas la convergence car le nombre de mailles impactées sur le nombre total de cellules du domaine étudié est en  $\mathcal{O}(h_{\mathcal{M}})$ . Nous avons repris le même argument que celui décrit dans [P16] et [29].

A l'occasion de la rédaction de ce document, nous proposons d'établir la propriété suivante (avec  $\overline{\overline{D}} = Id$  pour simplifier la présentation) :

**Proposition 3.3.7** *Avec l'hypothèse 3.3.3 et  $u_{\sigma}$  vérifiant (3.6), la formulation variationnelle (3.7) est équivalente au schéma volumes finis suivant :*

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{L \in N(K)} F_{K,L}(u) = |K|f_K \\ F_{K,L}(u) + F_{L,K}(u) = 0, \quad \forall L \in N(K), \quad L \notin \mathcal{E}_{ext} \\ F_{K,L}(u) = F_{K,\sigma}(u) = - \int_{\sigma} \nabla u \cdot \vec{n}_{K,\sigma} d\sigma + |\sigma| \mathcal{O}(h_{\mathcal{M}}), \quad \text{si } u \text{ est } C^2(\Omega) \text{ et } L \in N(K) \text{ (voir annexe A),} \\ \sigma \text{ étant l'interface entre la maille } K \text{ et la maille } L. \end{array} \right. \quad (3.9)$$

### Preuve

Le raisonnement est proche de celui donné dans [3] et [6]. Pour chaque maille  $K$ , on écrit la formulation variationnelle (3.7) avec  $v_K = 1$  sur la maille  $K$  et 0 ailleurs. On en déduit toutes les valeurs aux nœuds du maillage. On obtient :

$$u_{K^*} = \sum_{L \in VM(K^*)} \alpha_{L,K^*} u_L \quad \text{avec} \quad \sum_{L \in VM(K^*)} \alpha_{L,K^*} = 1.$$

En posant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall L \in N(K), \\ F_{K,L}^1(u) = \frac{|x_{K^*} x_{\sigma}| \vec{n}_{\sigma,K^*}}{T_{K,L,K^*}} \left\{ \begin{array}{l} \frac{(u_{K^*} - u_K)}{2} |x_K x_{K^*}| \vec{n}_{L,K,K^*} + \left( \frac{1}{2}(u_{K^*} + u_{\sigma}) - u_K \right) |x_{K^*} x_{\sigma}| \vec{n}_{\sigma,K^*} + \frac{1}{2}(u_{\sigma} - u_K) |x_K x_{\sigma}| \vec{n}_{T_K} \right\} \\ + \frac{|x_{L^*} x_{\sigma}| \vec{n}_{\sigma,L^*}}{T_{K,L,L^*}} \left\{ \begin{array}{l} \frac{(u_{L^*} - u_K)}{2} |x_K x_{L^*}| \vec{n}_{L,K,L^*} + \left( \frac{1}{2}(u_{L^*} + u_{\sigma}) - u_K \right) |x_{L^*} x_{\sigma}| \vec{n}_{\sigma,L^*} - \frac{1}{2}(u_{\sigma} - u_K) |x_K x_{\sigma}| \vec{n}_{T_K} \right\}, \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} R_{K,K^*}(u) &= \frac{1}{2}(\alpha_{K,K^*} - 1)(\nabla_{T_{K,L(K),K^*}} u \cdot |x_K x_{K^*}| \vec{n}_{L(K),K,K^*} + \nabla_{T_{K,M(K),K^*}} u \cdot |x_K x_{K^*}| \vec{n}_{M(K),K,K^*}) \\ &+ \frac{1}{2} \alpha_{K,K^*} \sum_{N \in VM(K^*), N \neq K} (\nabla_{T_{N,L(N),K^*}} u \cdot |x_N x_{K^*}| \vec{n}_{L(N),N,K^*} + \nabla_{T_{N,M(N),K^*}} u \cdot |x_N x_{K^*}| \vec{n}_{M(N),N,K^*}), \end{aligned} \quad (3.11)$$

( $M(K)$  et  $L(K)$  étant les 2 mailles voisines de la maille  $K$  ayant le nœud  $K^*$  en commun) et

$$R_{K,\sigma}(u) = \frac{1}{2}(\beta_K - 1)((\nabla_{T_{K,L,K^*}} u - \nabla_{T_{K,L,L^*}} u) \cdot |x_K x_\sigma| \vec{n}_{T_K}) + \beta_K \frac{1}{2}((\nabla_{T_{L,K,K^*}} u - \nabla_{T_{L,K,L^*}} u) \cdot |x_\sigma x_L| \vec{n}_{T_L})$$

( $K$  et  $L$  étant les 2 mailles de part et d'autre de l'interface  $\sigma$ ), nous écrivons :

$$- \sum_{L \in N(K)} F_{K,L}^1(u) + \sum_{K^* \in VN(K)} R_{K,K^*}(u) + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} R_{K,\sigma}(u) = |K| f_K.$$

On vérifie immédiatement que  $R_{K,K^*}(u) = 0$  et  $R_{K,\sigma}(u) = 0$  si  $u$  est affine.

Comme  $\sum_{L \in VM(K^*)} \alpha_{L,K^*} = 1$  et  $\beta_K + \beta_L = 1$  (voir (3.6)), nous déduisons  $\sum_{L \in VM(K^*)} R_{L,K^*}(u) = 0$

et  $R_{K,\sigma}(u) + R_{L,\sigma}(u) = 0$ .

Nous cherchons alors les inconnues  $R_{K^*,K,M(K)}(u)$  et  $R_{K^*,K,L(K)}(u)$  pour toutes les mailles autour du nœud  $K^*$  vérifiant :

$$\begin{cases} R_{K^*,K,M(K)}(u) + R_{K^*,K,L(K)}(u) = R_{K,K^*}(u) \\ R_{K^*,L,M(L)}(u) + R_{K^*,K,L(K)}(u) = 0 \\ R_{K^*,M,L(M)}(u) + R_{K^*,K,M(K)}(u) = 0 \end{cases} \quad (3.12)$$

Il s'agit donc d'un système à  $2Card(VM(K^*))$  inconnues avec  $2Card(VM(K^*))$  équations.

Comme  $\sum_{L \in VM(K^*)} R_{L,K^*}(u) = 0$ , ce système possède une infinité de solutions. En fixant une des

inconnues à zéro, on déduit alors les autres de proche en proche. Nous remarquons que  $F_{K,L}^1(u)$  approche exactement  $\int_\sigma \nabla u \cdot \vec{n}_{K,\sigma,K^*} d\sigma$  pour les fonctions affines. Nous posons donc :

$$F_{K,L}(u) = -F_{K,L}^1(u) + R_{K,\sigma}(u) + \sum_{K^* \in VN(K)} R_{K^*,K,L}(u) = -F_{K,L}^1(u) + R_{K,L}(u)$$

avec  $R_{K,L}(u) = R_{K,\sigma}(u) + \sum_{K^* \in VN(K)} R_{K^*,K,L}(u)$  qui vérifie  $R_{K,L}(u) = 0$  si  $u$  est affine,

$R_{K,L}(u) + R_{L,K}(u) = 0$  d'après (3.12) et  $R_{K,\sigma}(u) + R_{L,\sigma}(u) = 0$ .

D'autre part, nous avons également l'égalité :  $F_{K,L}^1(u) + F_{L,K}^1(u) = 0$  d'après la définition de  $x_\sigma$  et  $u_\sigma$  dans [3], ce qui permet de conclure.  $\blacksquare$

**Remarque 3.3.8** Les termes  $R_{K,L}(u)$  rendent la méthode coercive. Dans le cas où l'hypothèse 3.3.3 est vérifiée, ils stabilisent les méthodes volumes finis qui calculent les flux avec la formule (3.10). Cela concerne par exemple certains schémas VF développés dans [16, 36, 37, 50].

## 3.4 Résultats numériques

Nous reprenons les notations de l'annexe B.

### Test 1 : anisotropie faible

Nous choisissons  $\Omega = ]0, 1[ \times ]0, 1[$ . Le tenseur  $\overline{\overline{D}}$  vérifie :  $\overline{\overline{D}}(x, y) = \begin{pmatrix} 1.5 & 0.5 \\ 0.5 & 1.5 \end{pmatrix}$ .

Nous cherchons à comparer la solution numérique (formulation variationnelle (3.2)) avec la solution analytique décrite dans [60] qui s'écrit :

$$\begin{cases} u_{ana}(x, y) = \sin((1-x)(1-y)) + (1-x)^3(1-y)^2, \\ f(x, y) = -\nabla \cdot (\overline{\overline{D}} \nabla u_{ana}), \\ u(x, y) = u_{ana}(x, y) \text{ sur } \partial\Omega. \end{cases}$$



Nous considérons les maillages de triangles réguliers et les maillage de carrés non conformes (Figure 3.4) décrits dans [60]. Nous vérifions dans les tableaux 3.1 et 3.2 la convergence de la méthode qui est ici d'ordre 2. Nous montrons également la très bonne précision de la méthode (Figure 3.5) en comparant au schéma VFMPFA [1]. L'algorithme semble être 3 à 4 fois plus précis que les méthodes décrites dans [9, 10, 11, 32, 53, 64, 79, 81] (Figure 3.6) grâce à l'intégration particulière du second membre. En effet, la formulation choisie revient à utiliser un maillage deux fois plus fin que les autres méthodes avec le même nombre d'inconnues. En revanche, nous signalons que la précision de la variante en volumes finis (formulation variationnelle (3.7)) est proche des schémas classiques de la littérature pour ce test.

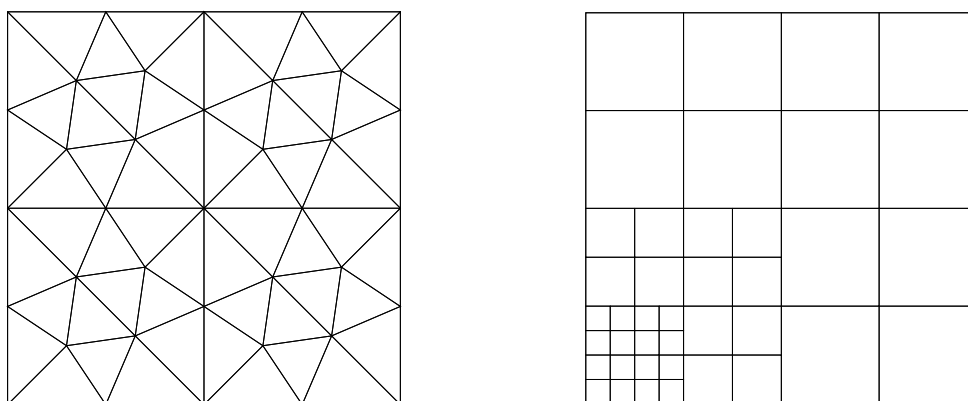


FIGURE 3.4 – Maillage de triangles réguliers et de carrés non conformes raffinés localement.

$h$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{64}$
Erreur $L^2$ (sol)	$2.25 \times 10^{-3}$	$6.03 \times 10^{-4}$	$1.55 \times 10^{-4}$	$3.92 \times 10^{-5}$	$9.84 \times 10^{-6}$
Ordre		1.90	1.96	1.98	1.99
Erreur $L^2$ (grad)	$1.56 \times 10^{-3}$	$9.52 \times 10^{-4}$	$5.44 \times 10^{-4}$	$2.93 \times 10^{-4}$	$1.53 \times 10^{-4}$
Ordre		0.72	0.81	0.89	0.94

TABLE 3.1 – Calcul de l'erreur de la solution numérique (et du gradient) par rapport à la solution analytique pour le test 1 avec un maillage de triangles réguliers.

$h$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{64}$
Erreur $L^2$ (sol)	$5.41 \times 10^{-3}$	$1.29 \times 10^{-3}$	$3.07 \times 10^{-4}$	$7.44 \times 10^{-5}$	$1.83 \times 10^{-5}$
Ordre		2.06	2.07	2.04	2.02
Erreur $L^2$ (grad)	$2.43 \times 10^{-2}$	$1.35 \times 10^{-2}$	$7.12 \times 10^{-3}$	$3.65 \times 10^{-3}$	$1.84 \times 10^{-3}$
Ordre		0.85	0.93	0.96	0.98

TABLE 3.2 – Calcul de l'erreur de la solution numérique (et du gradient) par rapport à la solution analytique pour le test 1 avec un maillage de carrés non conformes raffinés localement.

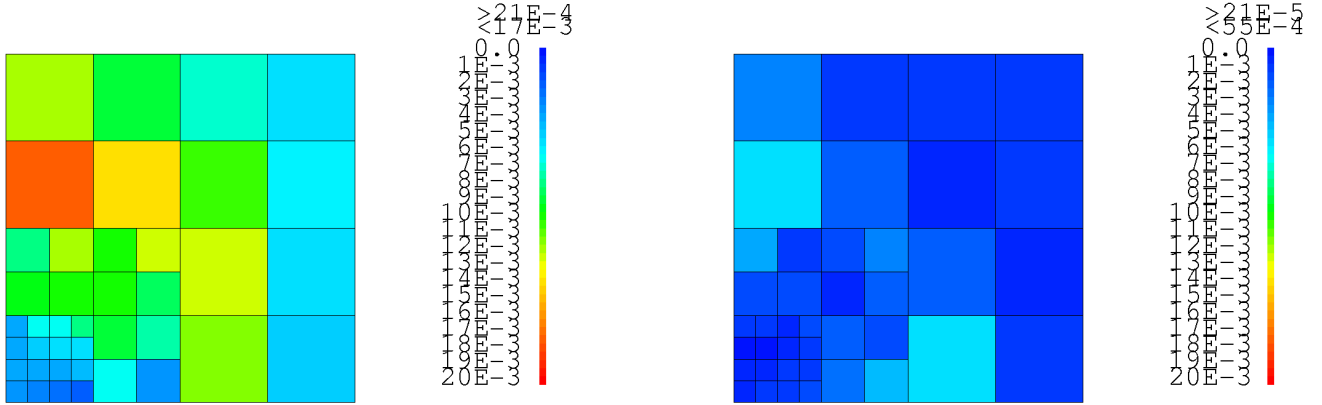


FIGURE 3.5 – Calcul de l’erreur de la solution numérique par rapport à la solution analytique. A gauche : schéma VFMPFA [1]. A droite : schéma FECC.

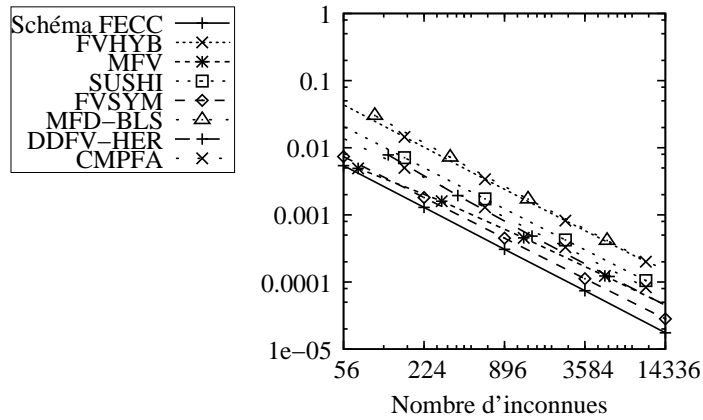


FIGURE 3.6 – Calcul de l’erreur relative de la solution numérique par rapport à la solution analytique en norme  $L^2$  pour les schémas décrits dans [9, 10, 11, 32, 53, 64, 79, 81] avec des maillages de carrés non conformes raffinés localement pour le test 1.

*Test 2 : Anisotropie forte et  $\overline{D}$  discontinu*

Nous cherchons à approcher la solution analytique suivante :

$$\begin{cases} u_{ana}(x, y) = \cos(\pi x) \sin(\pi y) & \text{si } x \leq 0.5, \\ u_{ana}(x, y) = 10^{-6} \cos(\pi x) \sin(\pi y) & \text{si } x > 0.5, \\ f(x, y) = -\nabla \cdot (\overline{D} \nabla u_{ana}). \\ u(x, y) = u_{ana}(x, y) \text{ sur } \partial\Omega. \end{cases}$$

Le tenseur  $\overline{\overline{D}}$  s'écrit :

$$\overline{\overline{D}}(x, y) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ si } x \leq 0.5, \quad \overline{\overline{D}}(x, y) = \begin{pmatrix} 10^6 & 0 \\ 0 & 0.01 \end{pmatrix} \text{ si } x > 0.5.$$

Avec la formulation (3.2), nous représentons tout d'abord les résultats numériques (tableau 3.3) avec  $u_\sigma$  vérifiant l'égalité (3.5). Nous notons le bon comportement de la méthode (avec  $\overline{\overline{D}}$  discontinu) qui reste d'ordre 2 grâce à la proposition 3.3.4. Nous testons également  $u_\sigma$  vérifiant (3.6) (tableau 3.4). Nous observons que la précision est légèrement supérieure. Dans ce cas, les points  $x_\sigma$  sont bien à l'intérieur de chaque arête  $\sigma$ .

$h$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{64}$
Erreur $L^2$ (sol)	$5.45 \times 10^{-3}$	$1.37 \times 10^{-3}$	$3.43 \times 10^{-4}$	$8.58 \times 10^{-5}$	$2.14 \times 10^{-5}$
Ordre		1.99	2.00	1.99	1.99
Erreur $L^2$ (grad)	$8.14 \times 10^{-3}$	$6.62 \times 10^{-3}$	$3.74 \times 10^{-3}$	$1.97 \times 10^{-3}$	$1.01 \times 10^{-3}$
Ordre		0.30	0.82	0.92	0.96

TABLE 3.3 – Calcul de l'erreur de la solution numérique (et du gradient) par rapport à la solution analytique pour le test 2 avec un maillage de triangles réguliers pour  $u_\sigma$  vérifiant l'égalité (3.5).

$h$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{64}$
Erreur $L^2$ (sol)	$5.03 \times 10^{-3}$	$1.29 \times 10^{-3}$	$3.32 \times 10^{-4}$	$8.44 \times 10^{-5}$	$2.13 \times 10^{-5}$
Ordre		1.95	1.96	1.97	1.99

TABLE 3.4 – Calcul de l'erreur de la solution numérique par rapport à la solution analytique pour le test 2 avec un maillage de triangles réguliers pour  $u_\sigma$  vérifiant l'égalité (3.6).

### 3.5 Conclusion

Nous avons donc montré l'efficacité de la méthode proposée qui peut être très précise en erreur  $L^2$  sur la solution par rapport à de nombreuses schémas de la littérature. En revanche, sa construction dépend de l'existence des deux hypothèses 3.3.3 et 3.3.5. D'un point de vue pratique, elles ne sont pas très restrictives, puisque nous avons testé des maillages non conformes et des tenseurs très anisotropes. Notons que pour des triangles, il devrait être possible de les supprimer en adaptant le lieu des degrés de liberté.

## Chapitre 4

# Schémas non linéaires volumes finis monotones ou positifs pour des opérateurs de diffusion fortement anisotropes

Après le développement du schéma VFSYM dans le chapitre 1, nous avons mis en évidence sur des calculs de sûreté que des oscillations pouvaient apparaître dans les zones où les tenseurs de dispersions sont très anisotropes ou dans les zones où les mailles sont très déformées. Ceci correspond au comportement habituel de l'ensemble des schémas linéaires classiques de la littérature (voir par exemple [60]). Nous avons donc cherché à supprimer ces oscillations, car il peut être crucial de préserver les bornes physiques pour des modèles de transport-chimie ou des modèles diphasiques en milieu poreux. En 2005, date du début de ce travail, une seule publication a été proposée à notre connaissance. Il s'agit du travail décrit dans [27] où est développée une correction non linéaire des éléments finis standard  $\mathbb{P}_1$ . Les résultats numériques montrent que la technique fonctionne mais on note une dégradation de l'ordre initial des éléments finis  $\mathbb{P}_1$  pour la norme  $L^2(\Omega)$ .

Nous avons donc proposé des méthodes dans un contexte volumes finis. Voici la synthèse des publications [P10, P11, P14, P16] et [P17].

### 4.1 Formulation volumes finis

Nous reprenons le problème elliptique (3.1) du chapitre précédent et les notations sur le maillage de l'annexe A. Nous cherchons les inconnues  $(u_K)_{K \in \mathcal{M}}$  et les flux  $F_{K,a}(u)$  qui approchent  $|a|\vec{q} \cdot \vec{n}_{K,a}$  sous la forme :

$$F_{K,a}(u) = \sum_{L \in \mathcal{M}} \nu_{K,L,a}(u)(u_K - u_L), \quad (4.1)$$

ou bien

$$F_{K,a}(u) = \mu_{K,L,a}(u)u_K - \mu_{L,K,a}(u)u_L \quad (4.2)$$

avec  $\nu_{K,L,a}(u) \geq 0$  pour tout  $L$  qui n'est pas un voisin de  $K$ ,  $\nu_{K,L,a}(u) > 0$ ,  $\mu_{K,L,a}(u) \geq 0$  et  $\mu_{L,K,a}(u) \geq 0$  lorsque  $L$  et  $K$  sont voisins. La formulation (4.2) correspond donc à un flux à deux points.

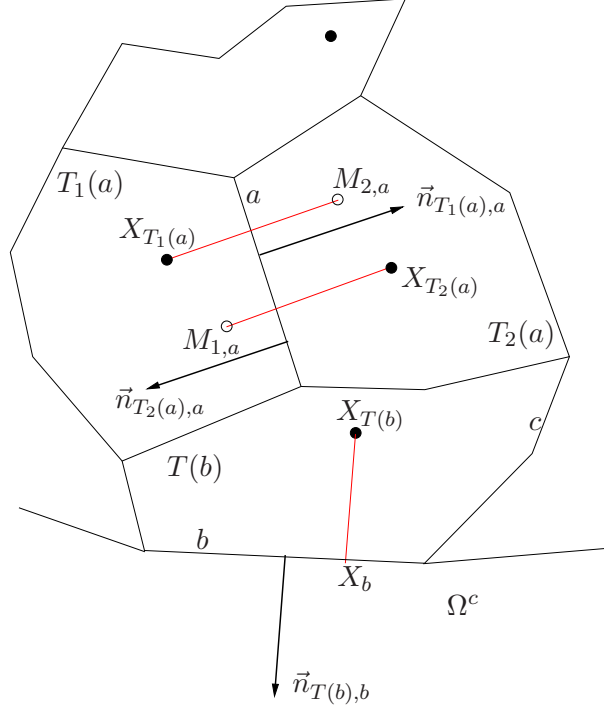


FIGURE 4.1 – Exemple de points  $M_{1,a}$  et  $M_{2,a}$  dans le cas homogène.

#### 4.1.1 Cas isotrope homogène

Pour chaque arête  $b$  de  $\mathcal{E}_{\text{ext}}$  (en notant  $T(b)$  le volume de contrôle tel que  $b \in \mathcal{E}_{T(b)}$ ), la demi-droite d'origine  $X_{T(b)}$  dans la direction  $\vec{n}_{T(b),b}$  intersecte  $\partial\Omega$  au point noté  $X_b$  (voir Figure 4.1).

Nous supposons que pour chaque arête de  $\mathcal{E}_{\text{int}}$ , il existe deux points  $M_{1,a}$  et  $M_{2,a}$  dans l'enveloppe convexe des points appartenant à  $\mathcal{P}$  et des points  $(X_b)_{b \in \mathcal{E}_{\text{ext}}}$  tels que :

- $M_{2,a}$  appartient à la demi-droite d'origine  $X_{T_1(a)}$  et de direction  $\vec{n}_{T_1(a),a}$ ,
- $M_{1,a}$  appartient à la demi-droite d'origine  $X_{T_2(a)}$  de direction  $\vec{n}_{T_2(a),a}$ .

Nous décrivons en 3 parties la construction du schéma :

*Partie 1* (interpolation de la solution pour les points  $M_{i,a}$ )

Nous écrivons :  $M_{i,a} = \alpha_{i,a} X_{T_i(a)} + \sum_{j=1}^{J_{i,a}} \lambda_{i,a}(j) X_{i,a}(j)$  (avec  $\alpha_{i,a} > 0$ ,  $\lambda_{i,a}(j) \geq 0$ ,

$\alpha_{i,a} + \sum_{j=1}^{J_{i,a}} \lambda_{i,a}(j) = 1$ , et  $X_{i,a}(j) = X_K$  ( $K \in \mathcal{M}$ ) ou  $X_{i,a}(j) = X_b$  ( $b \in \mathcal{E}_{\text{ext}}$ )).

On définit alors :

$$u_{M_{i,a}} = \alpha_{i,a} u_{T_i(a)} + \sum_{j=1}^{J_{i,a}} \lambda_{i,a}(j) u_{X_{i,a}(j)}. \quad (4.3)$$

*Partie 2* (construction des flux  $|a|\vec{q} \cdot \vec{n}_{K,a}$ )

Soit  $K \in \mathcal{M}$  et  $a \in \mathcal{E}_K$  une arête frontière. Nous approchons les flux avec l'approximation :

$$F_{K,a}(u) = |a| \frac{u_K - u_a}{d(X_K, X_a)}. \quad (4.4)$$

Pour les arêtes intérieures, on les calcule à l'aide des expressions suivantes :

$$F_{1,a}(u) = |a| \frac{u_{T_1(a)} - u_{M_{2,a}}}{d(X_{T_1(a)}, M_{2,a})} \quad \text{ou} \quad F_{2,a}(u) = |a| \frac{u_{T_2(a)} - u_{M_{1,a}}}{d(X_{T_2(a)}, M_{1,a})},$$

qui deviennent avec (4.3) :

$$F_{1,a}(u) = |a| \frac{\alpha_{2,a}(u_{T_1(a)} - u_{T_2(a)}) + \sum_{j=1}^{J_{2,a}} \lambda_{2,a}(j)(u_{T_1(a)} - u_{X_{2,a}(j)})}{d(X_{T_1(a)}, M_{2,a})} \quad (4.5)$$

et

$$F_{2,a}(u) = |a| \frac{\alpha_{1,a}(u_{T_2(a)} - u_{T_1(a)}) + \sum_{j=1}^{J_{1,a}} \lambda_{1,a}(j)(u_{T_2(a)} - u_{X_{1,a}(j)})}{d(X_{T_2(a)}, M_{1,a})}. \quad (4.6)$$

Le flux calculé est une combinaison du type :

$$F_{K,a}(u) = \gamma_{1,a}(u)\epsilon_{1,K}F_{1,a}(u) + \gamma_{2,a}(u)\epsilon_{2,K}F_{2,a}(u) \quad (4.7)$$

(avec  $\epsilon_{i,K} = +1$  si  $K = T_i(a)$  et  $\epsilon_{i,K} = -1$  sinon) telle que les formules (4.1) ou (4.2) soient vérifiées.

Avec  $0 < \beta_{1,a} \leq \frac{2\alpha_{1,a}}{d(X_{T_2(a)}, M_{1,a})}$  et  $0 < \beta_{2,a} \leq \frac{2\alpha_{2,a}}{d(X_{T_1(a)}, M_{2,a})}$ , nous posons :

$$G_{1,a}(u) = -|a|\beta_{2,a}(u_K - u_{T_2(a)}) + F_{1,a}(u) \quad \text{et} \quad G_{2,a}(u) = |a|\beta_{1,a}(u_K - u_{T_2(a)}) + F_{2,a}(u).$$

Pour obtenir une solution du type (4.1),  $\gamma_{1,a}(u)$  et  $\gamma_{2,a}(u)$  vérifient :

$$\gamma_{1,a}(u) = \frac{|G_{2,a}(u)|}{|G_{1,a}(u)| + |G_{2,a}(u)|} \quad \text{et} \quad \gamma_{2,a}(u) = \frac{|G_{1,a}(u)|}{|G_{1,a}(u)| + |G_{2,a}(u)|}$$

si ( $|G_{1,a}(u)| + |G_{2,a}(u)| \neq 0$ ) et  $\gamma_{1,a}(u) = \gamma_{2,a}(u) = \frac{1}{2}$  sinon.

En ce qui concerne les solutions du type (4.2), nous posons :

$$u_{2,a} = \sum_{j=1}^{J_{2,a}} \lambda_{2,a}(j)u_{X_{2,a}(j)}$$

et

$$u_{1,a} = \sum_{j=1}^{J_{1,a}} \lambda_{1,a}(j)u_{X_{1,a}(j)}$$

et nous choisissons  $\gamma_{1,a}(u) = 1$  et  $\gamma_{2,a}(u) = 0$  (resp.  $\gamma_{1,a}(u) = 0$  et  $\gamma_{2,a}(u) = 1$ ) si  $u_{2,a} = 0$  (resp.  $u_{1,a} = 0$ ) et si  $(\frac{|u_{1,a}|}{d(X_{T_2(a)}, M_{1,a})} + \frac{|u_{2,a}|}{d(X_{T_1(a)}, M_{2,a})}) \neq 0$ ,

$$\gamma_{1,a}(u) = \frac{\frac{u_{1,a}}{d(X_{T_2(a)}, M_{1,a})}}{\frac{|u_{1,a}|}{d(X_{T_2(a)}, M_{1,a})} + \frac{|u_{2,a}|}{d(X_{T_1(a)}, M_{2,a})}}$$

et

$$\gamma_{2,a}(u) = \frac{\frac{u_{2,a}}{d(X_{T_1(a)}, M_{2,a})}}{\frac{|u_{1,a}|}{d(X_{T_2(a)}, M_{1,a})} + \frac{|u_{2,a}|}{d(X_{T_1(a)}, M_{2,a})}}.$$

*Partie 3* (construction du schéma) : le schéma est obtenu en intégrant la seconde équation du système (3.1). Nous cherchons  $u = (u_K)_{K \in \mathcal{M}}$  vérifiant :

$$\forall K \in \mathcal{M} : \sum_{a \in \mathcal{E}_K} F_{K,a}(u) = |K|f_K. \quad (4.8)$$

#### 4.1.2 Cas anisotrope hétérogène

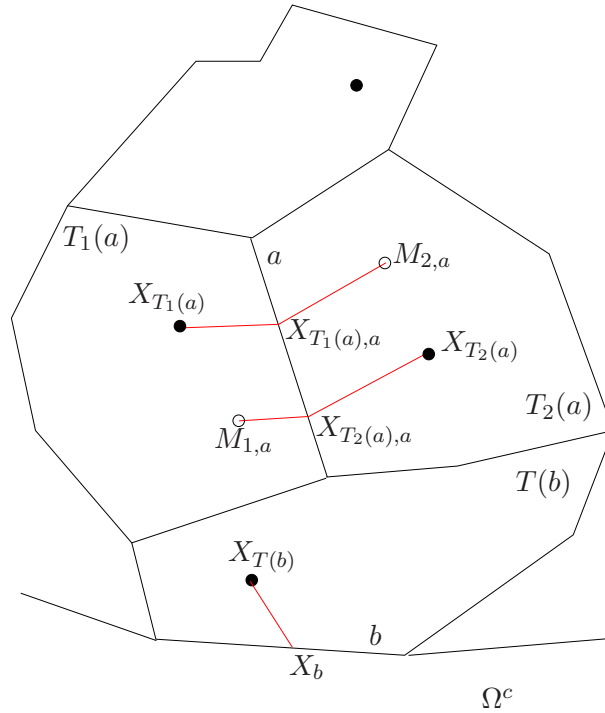


FIGURE 4.2 – Exemple de points  $M_{1,a}$  et  $M_{2,a}$  dans le cas anisotrope hétérogène.

Pour chaque arête  $b$  de  $\mathcal{E}_{\text{ext}}$  (en notant  $T(b)$  le volume de contrôle tel que  $b \in \mathcal{E}_{T(b)}$ ), la demi-droite d'origine  $X_{T(b)}$  dans la direction  $\overline{\overline{D}}_{T(b)} \vec{n}_{T(b),b}$  intersecte  $\partial\Omega$  au point noté  $X_b$  (voir Figure 4.2). Nous supposons (voir Figure 4.2) que pour chaque arête de  $\mathcal{E}_{\text{int}}$ , il existe deux points  $M_{1,a}$  et  $M_{2,a}$  dans l'enveloppe convexe des points appartenant à  $\mathcal{P}$  et des points  $(X_b)_{b \in \mathcal{E}_{\text{ext}}}$  tels que :

- $M_{2,a}$  appartient à la demi-droite d'origine  $X_{T_1(a),a}$  et de direction  $\overline{\overline{D}}_{T_2(a)} \vec{n}_{T_1(a),a}$ ,
- $M_{1,a}$  appartient à la demi-droite d'origine  $X_{T_2(a),a}$  et de direction  $\overline{\overline{D}}_{T_1(a)} \vec{n}_{T_2(a),a}$ .

Nous décrivons à nouveau en 3 parties la construction du schéma :

*Partie 1* (interpolation de la solution pour les points  $M_{i,a}$ ) : nous utilisons ici la même méthode que dans le cas homogène.

**Remarque 4.1.1** *si le tenseur  $\overline{\overline{D}}$  est continu par morceaux, on choisit les points  $X_{T_i(a)}$  dans des zones où  $\overline{\overline{D}}$  est continu pour ne pas dégrader la précision de la méthode.*

*Partie 2* (calcul des flux)

Pour les arêtes extérieures, nous utilisons l'approximation suivante :

$$F_{K,a}(u) = |a| \left| \overline{\overline{D}}_K \vec{n}_a \right| \frac{u_K - u_a}{d(X_a, X_K)}. \quad (4.9)$$

Pour les arêtes intérieures, on approche le flux à l'aide des expressions suivantes :

$$\begin{aligned} F_{1,a}^1(u) &= \left| \overline{\overline{D}}_{T_1(a)} \vec{n}_a \right| \frac{u_{T_1(a)} - u_{T_1(a),a}}{d(X_{T_1(a)}, X_{T_1(a),a})}, & F_{1,a}^2(u) &= \left| \overline{\overline{D}}_{T_2(a)} \vec{n}_a \right| \frac{u_{T_1(a),a} - u_{M_{2,a}}}{d(X_{T_1(a),a}, M_{2,a})}, \\ F_{2,a}^1(u) &= \left| \overline{\overline{D}}_{T_2(a)} \vec{n}_a \right| \frac{u_{T_2(a)} - u_{T_2(a),a}}{d(X_{T_2(a)}, X_{T_2(a),a})}, & F_{2,a}^2(u) &= \left| \overline{\overline{D}}_{T_1(a)} \vec{n}_a \right| \frac{u_{T_2(a),a} - u_{M_{1,a}}}{d(X_{T_2(a),a}, M_{1,a})}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

En imposant la continuité des flux, c'est-à-dire  $F_{1,a}^1(u) = F_{1,a}^2(u)$  et  $F_{2,a}^1(u) = F_{2,a}^2(u)$ , nous déduisons  $u_{T_1(a),a}$  et  $u_{T_2(a),a}$ . Nous aboutissons à des formulations du type :

$$\begin{aligned} F_{1,a}(u) &= |a| \frac{\alpha_{2,a}(u_{T_1(a)} - u_{T_2(a)}) + \sum_{j=1}^{J_{2,a}} \lambda_{2,a}(j)(u_{T_1(a)} - u_{X_{2,a}(j)})}{\delta_{2,a}}, \\ F_{2,a}(u) &= |a| \frac{\alpha_{1,a}(u_{T_2(a)} - u_{T_1(a)}) + \sum_{j=1}^{J_{1,a}} \lambda_{1,a}(j)(u_{T_2(a)} - u_{X_{1,a}(j)})}{\delta_{1,a}}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

avec

$$\begin{aligned} \delta_{1,a} &= \frac{d(X_{T_2(a),a}, M_{1,a})}{\left| \overline{\overline{D}}_{T_1(a)} \vec{n}_a \right|} + \frac{d(X_{T_2(a)}, X_{T_2(a),a})}{\left| \overline{\overline{D}}_{T_2(a)} \vec{n}_a \right|}, \\ \delta_{2,a} &= \frac{d(X_{T_1(a),a}, M_{2,a})}{\left| \overline{\overline{D}}_{T_2(a)} \vec{n}_a \right|} + \frac{d(X_{T_1(a)}, X_{T_1(a),a})}{\left| \overline{\overline{D}}_{T_1(a)} \vec{n}_a \right|}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Nous choisissons alors les mêmes combinaisons que dans le cas homogène :

$$F_{K,a}(u) = \gamma_{1,a}(u) \epsilon_{1,K} F_{1,a}(u) + \gamma_{2,a}(u) \epsilon_{2,K} F_{2,a}(u). \quad (4.13)$$

*Partie 3* (définition du schéma) :

Nous cherchons à nouveau  $u = (u_K)_{K \in \mathcal{M}}$  vérifiant :

$$\forall K \in \mathcal{M} : \sum_{a \in \mathcal{E}_K} F_{K,a}(u) = |K| f_K. \quad (4.14)$$



## 4.2 Propriétés du schéma

Nous notons VFPMD (Volumes Finis respectant le Principe du Maximum Discret) (resp. VFMON (Volumes Finis MONotones)) le schéma décrit dans les parties 3 des paragraphes précédents pour la formulation (4.1) (resp. (4.2)). Nous donnons tout d'abord la définition d'un schéma satisfaisant le principe du maximum local (PML).

**Définition 4.2.1** (structure PML) *Soit un maillage admissible défini dans [P16] de  $\Omega$ . Un schéma avec les inconnues  $u = (u_K)_{K \in \mathcal{M}}$  sera dit PML s'il s'écrit sous la forme :*

$$\forall K \in \mathcal{M} : \sum_{L \in \mathcal{M}} \tau_{K,L}(u)(u_K - u_L) + \sum_{a \in \mathcal{E}_{\text{ext}}} \tau_{K,a}(u)(u_K - u_a) = |K|f_K, \quad (4.15)$$

pour des fonctions  $\tau_{K,L} : \mathbb{R}^{\text{Card}(\mathcal{M})} \mapsto \mathbb{R}^+$  (pour  $(K, L) \in \mathcal{M}^2$ ) et  $\tau_{K,a} : \mathbb{R}^{\text{Card}(\mathcal{M})} \mapsto \mathbb{R}^+$  (pour  $K \in \mathcal{M}$  et  $a \in \mathcal{E}_{\text{ext}}$ ) satisfaisant, pour tout  $v \in \mathbb{R}^{\text{Card}(\mathcal{M})}$ ,

$$\begin{aligned} \forall (K, L) \in \mathcal{M}^2 \text{ such that } \mathcal{E}_K \cap \mathcal{E}_L \neq \emptyset : \tau_{K,L}(v) > 0, \\ \forall K \in \mathcal{M}, \forall a \in \mathcal{A}_K \cap \mathcal{A}_{\text{ext}} : \tau_{K,a}(v) > 0. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Dans (4.15),  $u_a$  est la valeur de  $u_\partial$  sur  $a$  que nous supposons comprise entre les valeurs minimum et maximum de  $u_\partial$ .

Dans [P16], nous montrons la propriété suivante :

**Proposition 4.2.2** *Avec les flux de la forme (4.1), le schéma (4.14) (ou (4.8)) a la structure PML.*

Nous considérons à nouveau le problème parabolique (1.1) défini sur  $]0, \infty[ \times \Omega$  avec  $u_0 = 0$  sur  $\{0\} \times \Omega$  et  $u = u_\partial = 0$  sur  $]0, \infty[ \times \partial\Omega$ . Avec un schéma explicite et un pas de temps  $\Delta t$ , nous écrivons :

$$\begin{aligned} \forall n \geq 0, \forall K \in \mathcal{M} : |K|u_K^{n+1} + \Delta t \sum_{a \in \mathcal{E}_K} F_{K,a}(u^n) &= |K|u_K^n, \\ \forall K \in \mathcal{M} : u_K^0 &= \frac{1}{|K|} \int_K u_0. \end{aligned} \quad (4.17)$$

**Proposition 4.2.3** *Dans [P10], nous montrons qu'avec les flux décrits dans (4.2) et un pas de temps suffisamment petit (qui ne s'effondre pas), la solution de (4.17) reste positive.*

**Hypothèse 4.2.4** (coercivité) : nous supposons qu'il existe  $\zeta > 0$  tel que

$$\begin{aligned} \forall v = (v_K)_{K \in \mathcal{M}} : \\ \sum_{a \in \mathcal{E}_{\text{int}}} \min [\epsilon_{1,K} F_{1,a}(v)(v_K - v_L); \epsilon_{2,K} F_{2,a}(v)(v_K - v_L)] \\ + \sum_{a \in \mathcal{E}_{\text{ext}}} F_{K,a}(v)v_K \geq \zeta \left( \sum_{a \in \mathcal{E}_{\text{int}}} \text{coef}_a (v_K - v_L)^2 + \sum_{a \in \mathcal{E}_{\text{ext}}} \text{coef}_a v_K^2 \right). \end{aligned} \quad (4.18)$$

où  $\text{coef}_a$  sont des coefficients strictement positifs (en dimension  $N$ ,  $\frac{\text{coef}_a}{h_{\mathcal{M}}^{N-2}}$  ne tend pas vers zéro lorsque  $h_{\mathcal{M}} \rightarrow 0$ ).

**Proposition 4.2.5** Dans [P16], avec les flux décrits dans (4.1), avec l'hypothèse 4.2.4 et  $\forall a \in \mathcal{E}_{\text{int}}, \beta_{1,a} = \beta_{2,a}$ , nous montrons l'existence d'au moins une solution aux équations (4.8) et (4.14).

**Proposition 4.2.6** Dans [P16], avec les flux décrits dans (4.1), nous montrons également qu'avec l'hypothèse 4.2.4 et  $\forall a \in \mathcal{E}_{\text{int}}, \beta_{1,a} = \beta_{2,a}$ , le schéma numérique converge vers la solution de (3.1), lorsque  $h_{\mathcal{M}} \rightarrow 0$ .

**Remarque 4.2.7** Pour la formulation (4.2), le calcul du flux n'est pas toujours continu en  $u$ . Cela ne pose pas de problème pour des équations paraboliques discrétisées en explicite. En revanche, pour des équations elliptiques, il n'est pas clair qu'il existe une solution. Nous n'avons pas rencontré ce problème dans nos applications numériques. Notons cependant qu'une variante continue a été proposée récemment dans [20]. Un autre choix serait d'étudier l'expression suivante :

$$\gamma_{1,a}(u) = \frac{\frac{u_{T_2(a)} + u_{M_{1,a}}}{d(X_{T_2(a)}, M_{1,a})}}{\frac{|u_{T_2(a)}| + |u_{M_{1,a}}|}{d(X_{T_2(a)}, M_{1,a})} + \frac{|u_{T_1(a)}| + |u_{M_{2,a}}|}{d(X_{T_1(a)}, M_{2,a})}}$$

et

$$\gamma_{2,a}(u) = \frac{\frac{u_{T_1(a)} + u_{M_{2,a}}}{d(X_{T_1(a)}, M_{2,a})}}{\frac{|u_{T_2(a)}| + |u_{M_{1,a}}|}{d(X_{T_2(a)}, M_{1,a})} + \frac{|u_{T_1(a)}| + |u_{M_{2,a}}|}{d(X_{T_1(a)}, M_{2,a})}}$$

si  $\frac{|u_{T_2(a)}| + |u_{M_{1,a}}|}{d(X_{T_2(a)}, M_{1,a})} + \frac{|u_{T_1(a)}| + |u_{M_{2,a}}|}{d(X_{T_1(a)}, M_{2,a})} \neq 0$  et  $\gamma_{1,a}(u) = \gamma_{2,a}(u) = \frac{1}{2}$  sinon. On montre que les flux obtenus deviennent continus en  $u$  et qu'ils sont de la forme (4.2).

## 4.3 Résultats numériques

Nous prenons les notations de l'annexe B.

### 4.3.1 Méthode VFMON

#### Solution analytique

Nous cherchons à retrouver numériquement la solution analytique du problème suivant :

$$\begin{cases} -\text{div}(\overline{\overline{D}}\nabla u) = f \text{ sur } \Omega = ]0, 0.5[ \times ]0, 0.5[ & \text{avec } \overline{\overline{D}}(x, y) = \begin{pmatrix} y_1^2 + \alpha x_1^2 & -(1-\alpha)x_1y_1 \\ -(1-\alpha)x_1y_1 & x_1^2 + \alpha y_1^2 \end{pmatrix} \\ u = \sin(\pi x)\sin(\pi y) \text{ pour } (x, y) \in \partial\Omega \end{cases} \quad (4.19)$$

et

$$\begin{cases} f = \sin(\pi x)\sin(\pi y)((1+\alpha)\pi^2(x_1^2 + y_1^2)) + \cos(\pi x)\sin(\pi y)((1-3\alpha)\pi x_1) \\ \quad + \sin(\pi x)\cos(\pi y)((1-3\alpha)\pi y_1) + \cos(\pi x)\cos(\pi y)(2\pi^2(1-\alpha)x_1y_1) \end{cases} \quad (4.20)$$

où  $x_1 = x + 10^{-3}$  et  $y_1 = y + 10^{-3}$ . Le paramètre  $\alpha$  est égal à  $10^{-3}$  ce qui donne un rapport d'anisotropie égal à  $10^3$ . La solution analytique de ce problème s'écrit :  $u = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$ . Pour traiter la non

linéarité, nous effectuons quelques itérations d'un algorithme de point fixe pour se rapprocher de la solution, puis nous accélérons la convergence à l'aide d'un algorithme de Newton. Les résultats présentés dans le tableau 4.1 pour des maillages de triangles non structurés montrent que la méthode est proche de l'ordre 2. La convergence est atteinte en une dizaine d'itérations pour le maillage le plus fin constitué d'environ 38000 triangles. Comme  $f$  est positif, le schéma respecte le principe du maximum si la solution calculée est positive. Nous vérifions que cette propriété est bien satisfaite.

$h$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{64}$	$\frac{1}{128}$	$\frac{1}{256}$
Erreur L2	$4.2 \times 10^{-2}$	$1.0 \times 10^{-2}$	$2.7 \times 10^{-3}$	$7.2 \times 10^{-4}$	$1.6 \times 10^{-4}$	$4.0 \times 10^{-5}$

TABLE 4.1 – Schéma VFMON : erreur  $L^2$  par rapport à la solution analytique en fonction du pas en espace pour les équations (4.19) et (4.20)

### Tenseur très anisotrope et $f$ discontinue

Nous considérons le même domaine de calcul avec  $f = 1$  sur le carré  $]0.125, 0.375[ \times ]0.125, 0.375[$ ,  $f = 0$  ailleurs et  $u = 0$  sur frontière de  $\Omega$ . Les autres données du problème ne sont pas changées. Nous reprenons le maillage le plus fin et présentons dans le tableau 4.2 les calculs obtenus avec les éléments finis mixtes hybrides (EFMH) [24, P6, 40], avec les volumes finis VFSYM décrits dans le chapitre 1 et avec les éléments finis de type Galerkin standard (EFG) [P6, 34, 59]. Avec le schéma VFMON, nous vérifions que toutes les valeurs calculées sont positives.

Schéma	EFMH	VFSYM	EFG	VFMON
Val. négatives	17	7	12	0

TABLE 4.2 – Pourcentage des concentrations négatives pour le maillage fin avec l'équation (4.19) et  $f$  discontinue.

### 4.3.2 Méthode VFPM

#### Solution analytique

Nous considérons à nouveau la solution analytique du paragraphe 4.3.1. Il est clair dans le tableau 4.3 que la schéma est bien d'ordre 2. D'autre part, nous vérifions que toutes les oscillations ont disparu.

$h$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{64}$	$\frac{1}{128}$	$\frac{1}{256}$
$L^2$ error	$4.6 \times 10^{-2}$	$1.4 \times 10^{-2}$	$4.14 \times 10^{-3}$	$1.13 \times 10^{-3}$	$4 \times 10^{-4}$	$1 \times 10^{-4}$

TABLE 4.3 – Schéma VFPM : erreur  $L^2$  par rapport à la solution analytique en fonction du pas en espace pour les équations (4.19) et (4.20).

### Tenseur très anisotrope et $f$ discontinue

Nous reprenons le problème du paragraphe 4.3.1. Nous représentons sur les figures 4.3 à 4.5 les solutions et le lieu des valeurs négatives calculées avec les mêmes discrétisations que le paragraphe 4.3.1. Sur la figure 4.6, pour le schéma VFMON, on observe que les oscillations sont de l'ordre de la précision machine.



FIGURE 4.3 – Schéma EFMH (solution numérique et lieu des valeurs négatives) pour l'équation (4.19) et  $f$  discontinue : 38000 mailles, 17 % d'oscillations (valeur minimum :  $-3.10 \times 10^{-2}$ ).



FIGURE 4.4 – Schéma VFSYM (solution numérique et lieu des valeurs négatives) pour l'équation (4.19) et  $f$  discontinue : 38000 mailles, 7 % d'oscillations (valeur minimum :  $-1.49 \times 10^{-3}$ ).



FIGURE 4.5 – Schéma EF (solution numérique et lieu des valeurs négatives) pour l'équation (4.19) et  $f$  discontinue : 38000 mailles, 12 % d'oscillations (valeur minimum :  $-9.44 \times 10^{-4}$ ).

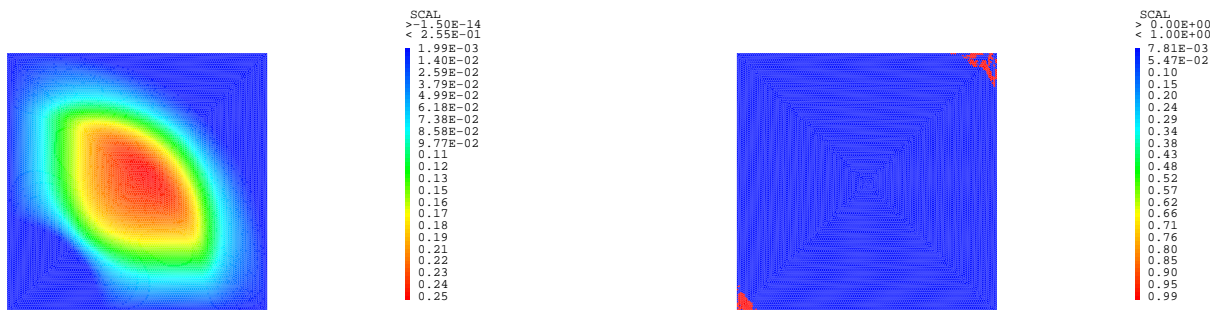


FIGURE 4.6 – Schéma VFPMD (solution numérique et lieu des valeurs négatives) pour l'équation (4.19) et  $f$  discontinue : 38000 mailles, 1 % d'oscillations (valeur minimum :  $-1.50 \times 10^{-14}$ ).

### Solution stationnaire (non analytique)

Afin de vérifier le principe du maximum, nous considérons le problème suivant :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\overline{D}\nabla u) = 0 & \text{in } \Omega = ]0, 1[ \times ]0, 1[, \\ u = x & \text{on } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.21)$$

avec

$$\overline{D}(x, y) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ si } x \leq 0.5, \quad \overline{D}(x, y) = \begin{pmatrix} 100 & 0 \\ 0 & 0.01 \end{pmatrix} \text{ si } x > 0.5. \quad (4.22)$$

Nous montrons la solution numérique sur la figure 4.7. Elle est bien comprise entre 0 et 1. La convergence de l'algorithme du point fixe est obtenue en quelques dizaines d'itérations. Nous montrons également les résultats obtenus (Figure 4.8 et tableau 4.4) sur le même problème (4.21) avec le schéma VFSYM décrit dans le chapitre 1. Nous présentons les pourcentages de valeurs supérieures à 1 et les valeurs maxima des solutions approchées. Nous présentons également la solution numérique pour  $\gamma_{1,a}(u) = \gamma_{2,a}(u) = \frac{1}{2}$  sur chaque face qui donne un schéma linéaire (Table 4.5 et Figure 4.9). Il est donc intéressant d'observer que les 2 schémas linéaires aboutissent à des oscillations sur tous les maillages qui sont fortes et nombreuses excepté pour le maillage le plus fin.

$h$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{64}$
oscillations	32%	19%	10%	4%	1.0%
$u_{max}$	1.09	1.09	1.07	1.06	1.03

TABLE 4.4 – Schéma VFSYM pour le problème (4.21) : pourcentage d'oscillations et valeurs maxima des solutions approchées.

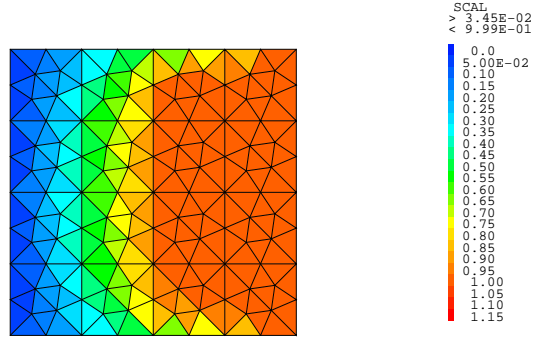


FIGURE 4.7 – solution numérique avec le schéma VFPMD, maillage composé de 224 triangles (valeur maximum 0.99, valeur minimum 0.03) pour le problème (4.21).

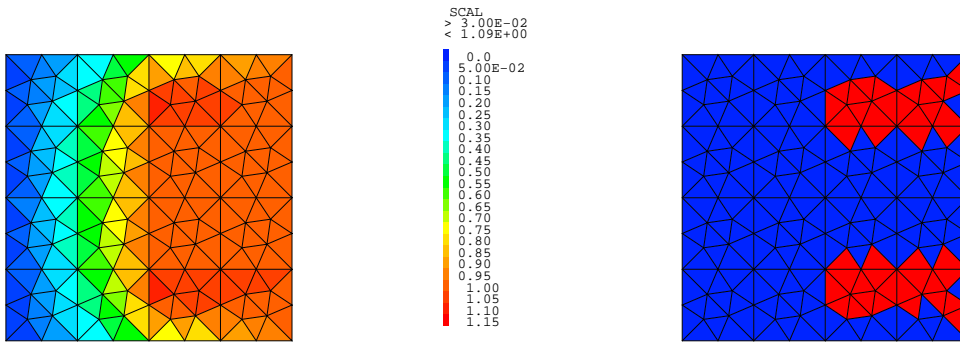


FIGURE 4.8 – Solution numérique et oscillations (en rouge) pour le schéma VFSYM pour le problème (4.21), maillage composé de 224 triangles (valeur maximum 1.09, valeur minimum 0.03).

$h$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{64}$
oscillations	35%	21%	11%	5%	0.8%
$u_{max}$	1.11	1.13	1.13	1.09	1.03

TABLE 4.5 – Schéma linéaire ( $\gamma_{1,a}(u) = \gamma_{2,a}(u) = \frac{1}{2}$ ) pour le problème (4.21) : pourcentage d’oscillations et valeurs maxima des solutions approchées.

### Le cas test COUPLEX 1 de l’ANDRA

Nous considérons ici le schéma non linéaire VFPMD pour le cas test COUPLEX 1 de l’ANDRA [21]. Comme dans le premier chapitre, paragraphe 1.2.5, nous étudions en dimension 2 le transport d’Iode 129 qui s’échappe d’un site de stockage. La concentration  $C$  vérifie l’équation de convection-diffusion (1.15). La vitesse de Darcy satisfait l’équation (1.14). Tous les coefficients sont donnés dans [21]. Le rapport d’anisotropie est majoré par 50. Le maillage de  $\Omega$  est constitué de 3600 triangles. La vitesse de Darcy est calculée en discrétisant l’équation de l’écoulement à l’aide de volumes finis

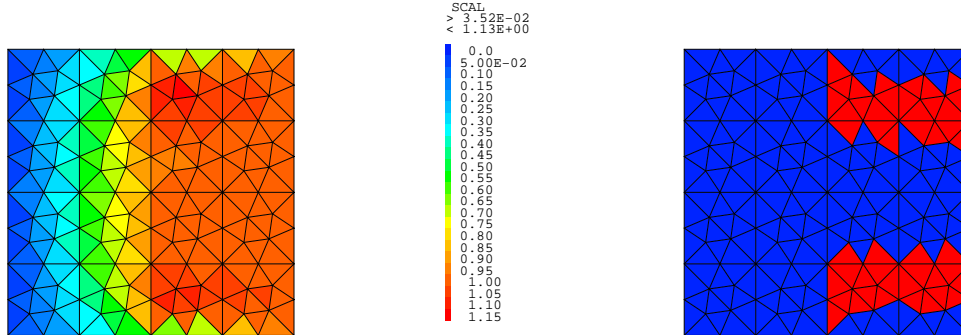


FIGURE 4.9 – Solution numérique et oscillations (en rouge) pour le schéma linéaire ( $\gamma_{1,a}(u) = \gamma_{2,a}(u) = \frac{1}{2}$ ) pour le problème (4.21), maillage composé de 224 triangles (valeur maximum 1.13, valeur minimum 0.0352).

VFPMFA décrits dans [1, 2]. Nous considérons ensuite deux discrétisations pour l'équation (1.15). Elles utilisent toutes les deux un schéma implicite en temps et un schéma décentré pour approcher le terme de convection. Pour le terme de diffusion-dispersion, la première s'appuie sur les approximations multi points (VFMPFA) [1, 2] et la seconde utilise le schéma non linéaire VFPMD. Dans les deux cas, nous utilisons des pas de temps de 200 ans de 1000 à 2000 ans, de 500 ans de 2000 à 10110 ans, de 1250 ans de 10110 ans à 50110 ans, de 5000 ans de 50110 ans à  $2 \times 10^5$  ans et de 10000 ans de  $2 \times 10^5$  ans à  $10^6$  ans (ce qui fait 165 pas de temps). Les concentrations obtenues avec les deux méthodes sont représentées sur les figures 4.10 à 4.13. Il est clair que le schéma VFPMD supprime toutes les oscillations présentes avec la méthode VFMPFA. Soulignons que dans les zones où le schéma VFMPFA n'oscille pas, les résultats obtenus sont très proches. On peut également noter que le coût calcul du schéma VFPMD est assez faible : pour chaque pas de temps, nous effectuons au plus 4 itérations de l'algorithme du point fixe. Nous montrons donc un bon comportement de la méthode non linéaire VFPMD sur un cas réaliste.

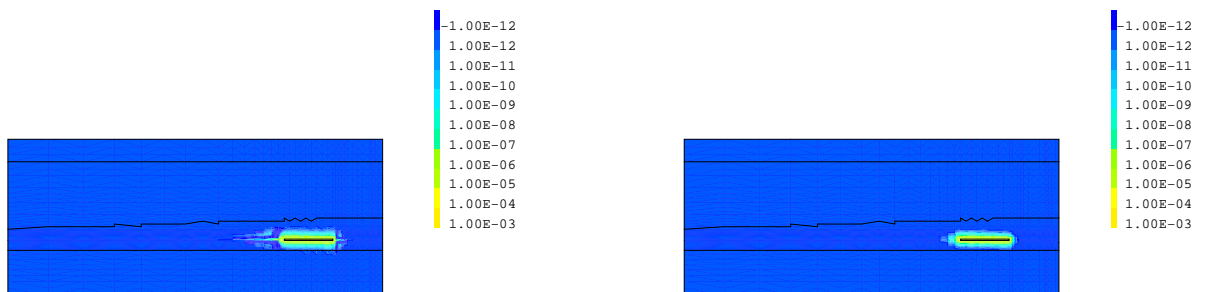


FIGURE 4.10 – Isovaleurs de la concentration d'iode à 10110 ans ; à gauche : schéma VFMPFA (valeur maximum  $1.14 \times 10^{-4}$ , valeur minimum  $-3.86 \times 10^{-6}$ ), à droite : schéma VFPMD (valeur maximum  $1.08 \times 10^{-4}$ , valeur minimum  $-5.67 \times 10^{-16}$ ).



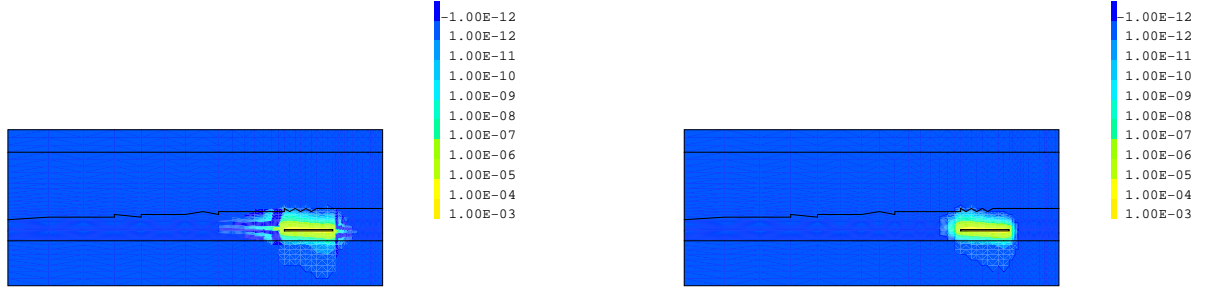


FIGURE 4.11 – Isovaleurs de la concentration d’iode à 50110 ans ; à gauche : schéma VFMPFA (valeur maximum  $1.69 \times 10^{-4}$ , valeur minimum  $-4.37 \times 10^{-6}$ ), à droite : schéma VFPMD (valeur maximum  $1.62 \times 10^{-4}$ , valeur minimum  $-3.65 \times 10^{-16}$ ).

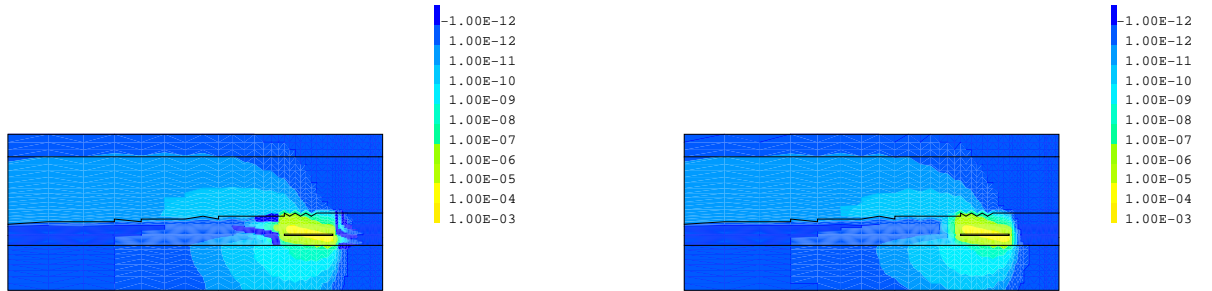


FIGURE 4.12 – Isovaleurs de la concentration d’iode à 200000 ans ; à gauche : schéma VFMPFA (valeur maximum  $1.03 \times 10^{-4}$ , valeur minimum  $-2.23 \times 10^{-6}$ ), à droite : schéma VFPMD (valeur maximum  $1.12 \times 10^{-4}$ , valeur minimum  $-2.06 \times 10^{-17}$ ).

## 4.4 Conclusion

Les deux types de méthodes ont donc montré leur efficacité. Le choix de l’une ou de l’autre dépendra du contexte applicatif. Si on ne recherche que la positivité des solutions, on utilisera la formulation (4.2). Si le principe du maximum s’écrit sous la forme de deux inégalités (par exemple  $0 \leq u \leq 1$ ), on emploiera l’expression (4.1).

Notons également que la démarche a été généralisée en dimension 3 dans [66] pour la formulation (4.2). D’autre part, dans un contexte de programmation sur machine parallèle, l’expression (4.2) pourra être très intéressante car on calcule alors des flux diffusifs à deux points.



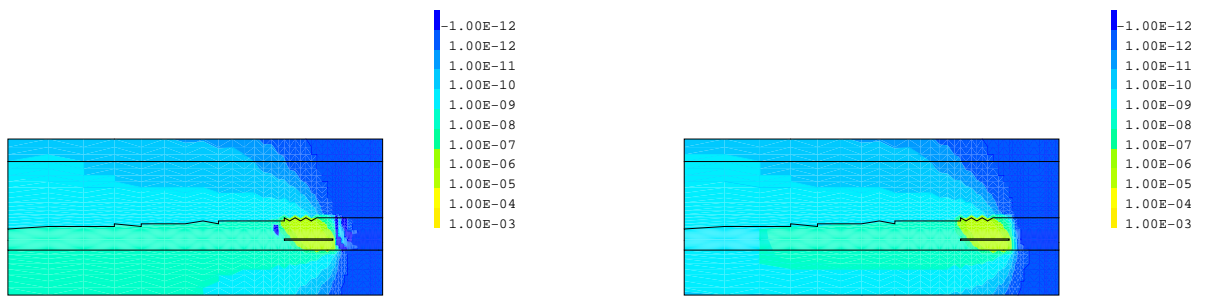


FIGURE 4.13 – Isovaleurs de la concentration d'iode à 1000000 ans ; à gauche : schéma VFMPFA (valeur maximum  $3.81 \times 10^{-5}$ , valeur minimum  $-1.86 \times 10^{-7}$ ), à droite : schéma VFPMD (valeur maximum  $4.23 \times 10^{-5}$ , valeur minimum  $1.50 \times 10^{-29}$ ).

## Chapitre 5

# Correction non linéaire et principe du maximum pour la discrétisation d'opérateurs de diffusion avec des schémas volumes finis

Il est bien connu que les schémas linéaires classiques approchant des termes de diffusion sont susceptibles d'osciller pour des mailles très déformées ou des tenseurs très anisotropes (voir par exemple [60]). Nous nous sommes donc demandés s'il ne serait pas possible de les corriger, l'un des intérêts étant de bénéficier de leurs plateformes informatiques de développement. Nous effectuons ici la synthèse des travaux [P15, P19, P21, P22, 74] et [P23]. Signalons que la correction non linéaire appliquée aux schémas hybrides [P19] a été publiée dans le cadre du travail post doctoral d'Amadou Mahamane au CEA en 2012.

Nous considérons le problème elliptique (3.1) du chapitre 3 avec  $u_{\partial} = 0$ .

### 5.1 Schéma centré sur les mailles

Nous proposons ici une correction non linéaire qui donne des solutions non oscillantes pour des schémas volumes finis centrés sur les cellules. Elle s'applique par exemple aux méthodes développées dans [1, 3, 4, 5, 7, 36, 37, 51, 78, 18, P9]. Nous reprenons les notations sur le maillage de l'annexe A. Soit un schéma convergent localement conservatif centré sur les mailles déduit du calcul du flux  $F_{K,\sigma}$  qui vérifie :

$$\begin{cases} \forall K \in \mathcal{M}, \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} F_{K,\sigma} = |K|f_K \\ \forall \sigma \in \mathcal{E}_{int}, F_{K,\sigma} + F_{L,\sigma} = 0 \\ \forall \sigma \in \mathcal{E}_{ext}, u_{\sigma} = 0 \end{cases} \quad (5.1)$$

Pour des fonctions  $u$  dans  $C^2(\Omega)$  et  $\overline{D}$  régulier, nous supposons que le flux numérique s'écrit :

$$\frac{F_{K,\sigma}}{|\sigma|} = -\frac{\int_{\sigma} \overline{D} \nabla u \cdot \vec{n}_{K,\sigma} d\sigma}{|\sigma|} + \mathcal{O}(h_{\mathcal{M}}). \text{ D'autre part, le schéma satisfait l'hypothèse de coercivité suivante :}$$

$\sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} F_{K,\sigma} u_K \geq \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int}} \mu_\sigma (u_L - u_K)^2 + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{ext}} \mu_\sigma (u_K)^2$  où les  $\mu_\sigma$  sont des réels strictement positifs (en dimension  $N$ ,  $\frac{\mu_\sigma}{h_{\mathcal{M}}^{N-2}}$  ne tend pas vers zéro lorsque  $h_{\mathcal{M}} \rightarrow 0$ ).

Nous écrivons :

$$Div_K(u) = - \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} F_{K,\sigma} = \sum_{J \in V(K)} \alpha_{J,K} (u_J - u_K)$$

$\alpha_{J,K}$  étant des réels dépendant de discrétisation choisie. Nous supposons aussi que le stencil  $V(K)$  est symétrique ( $J \in V(K) \iff K \in V(J)$ ). De plus, le nombre d'éléments des  $V(K)_{K \in \mathcal{M}}$  est borné indépendamment du maillage.

Soit  $\nu$  et  $\eta$  des paramètres positifs ou nuls. Nous proposons de modifier le schéma (5.1) de la manière suivante :

$$\begin{cases} \forall K \in \mathcal{M}, -Div_K(u) + \sum_{J \in V(K)} \beta_{K,J}(u)(u_K - u_J) = |K|f_K \\ \forall \sigma \in \mathcal{E}_{int}, F_{K,\sigma} + F_{L,\sigma} = 0 \\ \sigma \in \mathcal{E}_{ext}, u_\sigma = 0 \end{cases} \quad (5.2)$$

où  $\beta_{K,J}(u)$  vérifie :

$$\beta_{K,J}(u) = \nu \beta_{K,J}^1(u) + \eta \min \left( |K| + |J|, \frac{|K|}{\sum_{Y \in V(K)} |u_Y - u_K|} + \frac{|J|}{\sum_{Y \in V(J)} |u_Y - u_J|} \right) \quad (5.3)$$

(avec la convention  $|J| = 0$  si  $J \in \mathcal{E}_{ext}$ ) où  $\beta_{K,J}^1(u)$  est une fonction positive telle que  $\sum_{J \in V(K)} \beta_{K,J}^1(u)(u_K - u_J)$  est continue en  $u$ .

### 5.1.1 Propriétés de l'algorithme

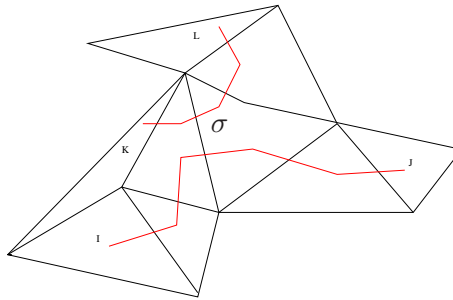


FIGURE 5.1 – Chemins  $IJ$  et  $KL$  intersectant l'arête  $\sigma$ ,  $I \in V(J)$ ,  $K \in V(L)$ .

Pour des mailles  $I$  et  $J$  telles que  $I \in V(J)$  (ou  $J \in V(I)$ ), nous notons  $\mathcal{E}_{I,J}$ , l'ensemble des faces intersectées par un chemin polygonal  $IJ$  qui ne passe pas par les points du maillage. Pour  $\sigma \in \mathcal{E}$ , nous notons  $ch(\sigma)$ , l'ensemble des chemins polygonaux qui intersectent  $\sigma$  (Figure 5.1). Pour  $\sigma \in \mathcal{E}$ , nous

définissons un flux modifié comme suit :

$$\begin{aligned}
F'_{K,\sigma} &= F_{K,\sigma} + \sum_{IJ \in ch(\sigma), I \leq J} \text{sign}(\vec{n}_{K,\sigma,IJ}) \nu \beta_{I,J}^1(u) \\
&+ \sum_{IJ \in ch(\sigma), I \leq J} \text{sign}(\vec{n}_{K,\sigma,IJ}) \eta \min \left( |I| + |J|, \frac{|I|}{\sum_{Y \in V(I)} |u_Y - u_I|} + \frac{|J|}{\sum_{Y \in V(J)} |u_Y - u_J|} \right) (u_I - u_J) \quad (5.4)
\end{aligned}$$

où  $\text{sign}(\vec{n}_{K,\sigma,IJ}) = 1$  si  $\vec{n}_{K,\sigma}$  est dans le même sens que le chemin  $IJ$  et  $\text{sign}(\vec{n}_{K,\sigma,IJ}) = -1$  sinon. Dans [P15] et [P21], nous montrons les propriétés suivantes :

**Proposition 5.1.1** *Le schéma modifié est équivalent à résoudre le système d'équations suivant :*

$$\begin{cases} \forall K \in \mathcal{M}, \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} F'_{K,\sigma} = |K| f_K \\ \forall \sigma \in \mathcal{E}_{int}, F'_{K,\sigma} + F'_{L,\sigma} = 0 \\ \forall \sigma \in \mathcal{E}_{ext}, u_\sigma = 0 \end{cases} \quad (5.5)$$

**Proposition 5.1.2** *Avec des maillages admissibles définis dans [P21], il existe au moins une solution au système (5.2).*

**Proposition 5.1.3** *Pour  $\overline{\overline{D}}$  régulier, avec des fonctions  $u$  dans  $C^2(\Omega)$ , le flux  $\frac{F'_{K,\sigma}}{|\sigma|}$  est consistant.*

**Proposition 5.1.4** *Le schéma modifié est coercif.*

Soit  $(\gamma_{K,J}(u))_{K \in \mathcal{M}, J \in V(K)} \geq 0$  tel que  $\sum_{J \in V(K)} \gamma_{K,J}(u) |u_K - u_J| = 1$ , pour  $\sum_{J \in V(K)} |u_K - u_J| \neq 0$ .

**Proposition 5.1.5** *Avec  $\nu \geq 1$ ,  $\eta > 0$  et  $\forall K \in \mathcal{M}$ ,  $\beta_{K,J}^1(u) \geq \gamma_{K,J}(u) |Div_K(u)|$ , le schéma modifié est PML (voir (4.15)).*

**Hypothèse 5.1.6** : *Nous supposons que  $\sup_{J \in V(K)} |\beta_{K,J}^1(u)| \frac{h_K}{|K|}$  tend vers zéro lorsque  $h_{\mathcal{M}} \rightarrow 0$ .*

**Proposition 5.1.7** *Avec l'hypothèse 5.1.6 et des maillages  $\mathcal{M}$  admissibles définis dans [P21] tels que  $\text{reg} \mathcal{M}$  soit bornée, les solutions du système (5.2) convergent vers la solution de (3.1) lorsque  $h_{\mathcal{M}} \rightarrow 0$ .*

## 5.1.2 Résultats numériques

Nous reprenons les notations de l'annexe B. Nous choisissons  $\nu = 1$  et  $\eta = 0$  car cela s'avère suffisant pour supprimer toutes les oscillations dans nos applications numériques.

## Solution analytique sur un maillage de carrés

Nous considérons à nouveau le problème (1.5) avec  $\Omega = ]0, 0.5[ \times ]0, 0.5[$ . Le paramètre  $\alpha$  est égal à  $10^{-6}$  ce qui donne un rapport d'anisotropie égal à  $10^6$ . Nous vérifions que  $f \geq 0$ . D'autre part, nous utilisons des maillages de carrés de surface  $h^2$ ,  $h$  variant de  $\frac{1}{4}$  à  $\frac{1}{64}$ . Nous choisissons :

$$\forall K \in \mathcal{M}, \forall J \in V(K), \beta_{K,J}^1(u) = \frac{|Div_K(u)|}{\sum_{Y \in V(K)} |u_Y - u_K|} + \frac{|Div_J(u)|}{\sum_{Y \in V(J)} |u_Y - u_J|} \quad (5.6)$$

avec la convention  $Div_J(u) = 0$  si  $J \in \mathcal{E}_{ext}$  et  $\frac{|Div_K(u)|}{\sum_{Y \in V(K)} |u_Y - u_K|} = 0$  si  $\sum_{Y \in V(K)} |u_Y - u_K| = 0$ . La

solution du problème est calculée à l'aide d'un algorithme de point fixe. Notons  $u^i$ , la valeur de la solution à l'itéré  $i$  et  $A(u^i)$  la matrice discrétisant l'opérateur de diffusion. Le schéma itératif s'écrit  $-A(u^i)u^{i+1} = f$ .

Nous montrons dans le tableau 5.1 les résultats calculés avec le schéma développé dans le chapitre 1 (VFSYM), avec la méthode du paragraphe 5.1 et l'égalité (5.6) (VFSYM<sub>cor1</sub>) et une autre correction non linéaire (VFSYM<sub>cor1,p</sub>) où le terme  $\beta_{K,J}^1(u)$  satisfait l'égalité suivante :

$$\forall K \in \mathcal{M}, \forall J \in V(K), \beta_{K,J}^1(u) = \max \left\{ \frac{|Div_K(u)|}{\sum_{L \in V(K)} \frac{1}{2}(|u_L| + |u_J|)}, \frac{|Div_J(u)|}{\sum_{L \in V(J)} \frac{1}{2}(|u_L| + |u_J|)} \right\} \quad (5.7)$$

On montre en effet que pour le problème (1.1) et la discrétisation (4.17), pour un pas de temps suffisamment petit, la solution reste alors positive. Il nous est donc apparu intéressant de tester cette variante sur un problème stationnaire.

Nous observons que le schéma VFSYM<sub>cor1</sub> n'oscille plus et qu'il est d'ordre 1. Quant à la méthode VFSYM<sub>cor1,p</sub>, elle tend vers l'ordre 2, reste positive et améliore de manière significative la précision du schéma initial. Pour les deux approches, le nombre d'itérations *nit* reste inférieur à 15.

$h$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{64}$
Erreur $L^2$ (VFSYM)	$5.21 \times 10^{-1}$	$1.96 \times 10^{-1}$	$7.14 \times 10^{-2}$	$1.65 \times 10^{-2}$	$2.14 \times 10^{-3}$
Ordre (VFSYM)		1.41	1.46	2.11	2.95
Val négatives (VFSYM)	12.5	9.38	5.46	2.14	0.53
$u_{min}$ (VFSYM)	$-2.9 \times 10^{-1}$	$-2.4 \times 10^{-1}$	$-1.4 \times 10^{-1}$	$-5.26 \times 10^{-2}$	$-1.33 \times 10^{-2}$
Erreur $L^2$ (VFSYM <sub>cor1</sub> )	$1.52 \times 10^{-1}$	$8.51 \times 10^{-2}$	$4.46 \times 10^{-2}$	$2.33 \times 10^{-2}$	$1.21 \times 10^{-2}$
Ordre (VFSYM <sub>cor1</sub> )		0.84	0.93	0.94	0.94
<i>nit</i>	3	11	8	12	15
Erreur $L^2$ (VFSYM <sub>cor1,p</sub> )	$9.06 \times 10^{-2}$	$2.46 \times 10^{-2}$	$6.18 \times 10^{-3}$	$1.57 \times 10^{-3}$	$4.04 \times 10^{-4}$
Ordre (VFSYM <sub>cor1,p</sub> )		1.88	1.99	1.98	1.96
<i>nit</i>	7	8	10	10	11

TABLE 5.1 – Résultats calculés avec les schémas VFSYM, VFSYM<sub>cor1</sub> et VFSYM<sub>cor1,p</sub> en fonction du pas en espace pour le problème (1.5).

## Solution analytique sur des maillages de triangles

Ce cas test nous a paru particulièrement intéressant car les schémas linéaires sont fortement oscillants. Nous proposons ici un nouveau choix pour  $\beta_{K,J}^1(u)$ . Pour  $\epsilon$  donné strictement positif, nous posons :

$$\text{Card}_\epsilon V(K) = \sum_{J \in V(K)} \frac{|u_K - u_J|}{|u_K - u_J| + \epsilon}.$$

et

$$\forall K \in \mathcal{M}, \forall J \in V(K), \beta_{K,J}^1(u) = \frac{\max\left(\frac{|Div_K(u)|}{\text{Card}_\epsilon V(K)}, \frac{|Div_J(u)|}{\text{Card}_\epsilon V(J)}\right)}{|u_K - u_J| + \epsilon} \quad (5.8)$$

Nous reprenons la même solution analytique que dans le paragraphe précédent avec  $\alpha = 10^{-4}$ . Nous utilisons les maillages de triangles du test 1 dans le benchmark [60]. Les résultats obtenus dans les figures 5.2 et 5.3 ainsi que dans le tableau 5.2 montrent que le schéma VFSYM est d'ordre 2 avec de très fortes oscillations. Soulignons qu'elles sont également très importantes avec les méthodes DDFV [33, 13, 23, 38, 39, 47, 61, 62, 63, 75] et SUSHI [53, 74]. Pour chaque maillage, nous prenons  $\epsilon = 50 \min_{K \in \mathcal{M}} |K|$ . Pour le maillage grossier, on observe que la correction non linéaire VFSYM<sub>cor1,b</sub> donne des calculs 130 fois plus précis que le schéma linéaire. D'autre part, nous vérifions que la méthode VFSYM<sub>cor1,b</sub> est bien positive. Elle converge en quelques dizaines d'itérations.

$h$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{64}$
Erreur $L^2$ (VFSYM)	$8.13 \times 10^0$	$1.31 \times 10^0$	$2.07 \times 10^{-1}$	$3.51 \times 10^{-2}$	$7.09 \times 10^{-3}$
Ordre (VFSYM)		2.64	2.66	2.56	2.30
Val négatives (VFSYM)	37.5 %	23 %	8 %	2 %	0.5 %
$u_{min}$ (VFSYM)	$-6.93 \times 10^0$	$-1.71 \times 10^0$	$-4.26 \times 10^{-1}$	$-1.07 \times 10^{-1}$	$-2.68 \times 10^{-2}$
Erreur $L^2$ (VFSYM <sub>cor1,b</sub> )	$6.05 \times 10^{-2}$	$3.22 \times 10^{-2}$	$1.65 \times 10^{-2}$	$8.57 \times 10^{-3}$	$4.39 \times 10^{-3}$
Ordre (VFSYM <sub>cor1,b</sub> )		0.91	0.96	0.95	0.96
<i>nit</i>	13	17	20	22	22

TABLE 5.2 – Résultats numériques pour le problème (1.5) avec le schéma VFSYM et le schéma VFSYM<sub>cor1,b</sub> en fonction du pas en espace.

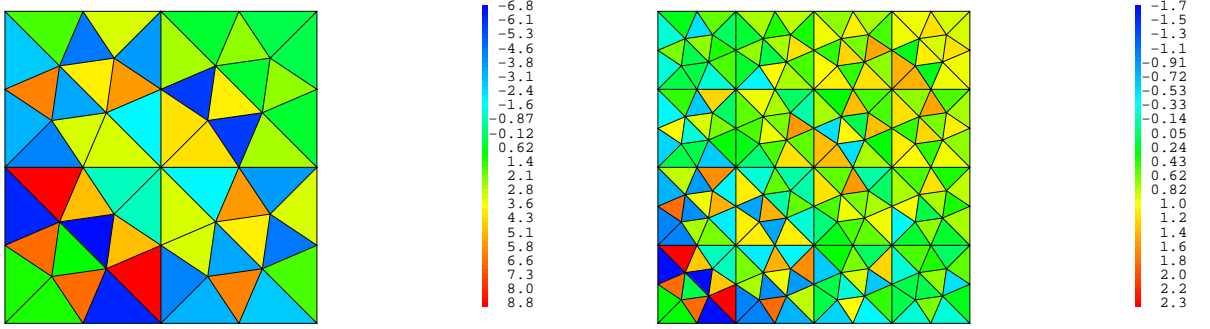


FIGURE 5.2 – Solution numérique avec le schéma VFSYM pour des maillages composés de 56 et 224 triangles ( $h = \frac{1}{4}$  et  $h = \frac{1}{8}$ ) pour le problème (1.5).

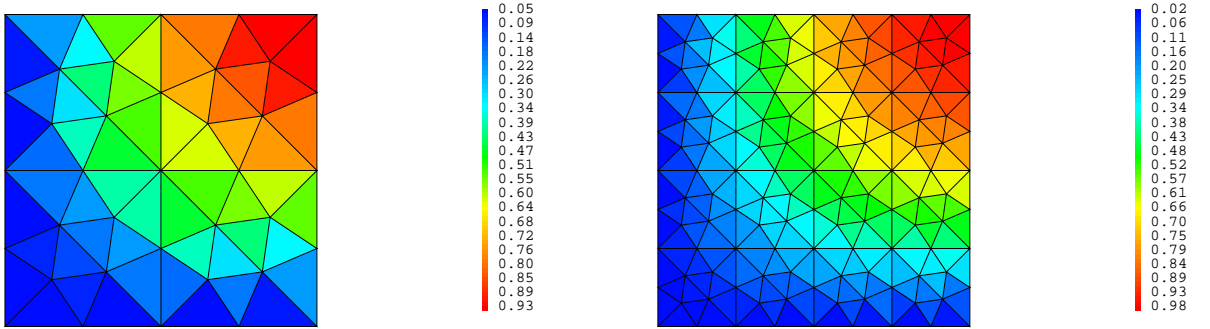


FIGURE 5.3 – Solution numérique avec le schéma  $VFSYM_{cor1,b}$  pour des maillages composés de 56 et 224 triangles ( $h = \frac{1}{4}$  et  $h = \frac{1}{8}$ ) pour le problème (1.5).

## 5.2 Schémas hybrides

Les notations sont les mêmes que dans le paragraphe 5.1. Soit un schéma hybride convergent décrit par exemple dans [24, 25, 31, 48, 49], localement conservatif déduit du calcul des flux  $F_{K,\sigma}$  qui s'écrit :

$$\begin{cases} \forall K \in \mathcal{M}, \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} F_{K,\sigma} = |K|f_K \\ \forall \sigma \in \mathcal{E}_{int}, F_{K,\sigma} + F_{L,\sigma} = 0 \\ \forall \sigma \in \mathcal{E}_{ext}, u_\sigma = 0 \end{cases} \quad (5.9)$$

Notons  $V(K,\sigma)$  et  $\alpha_{\sigma,J,J \in V(K,\sigma)}$  le stencil et les coefficients relatifs au calcul de  $F_{K,\sigma}$  tels que  $F_{K,\sigma} = - \sum_{J \in V(K,\sigma)} \alpha_{\sigma,J}(u_\sigma - u_J)$ . Nous supposons que le schéma (5.9) satisfait les hypothèses de

consistance suivante :

$$\forall u \in C^2(\Omega), \forall \bar{D} \text{ régulier}, \sum_{J \in V(K, \sigma)} \alpha_{\sigma, J}(u(x_\sigma) - u(x_J)) = \int_{\sigma} \bar{D} \nabla u \cdot \bar{n}_{K, \sigma} d\sigma + \mathcal{O}(|\sigma| h_{\mathcal{M}}) \quad (5.10)$$

D'autre part, le schéma vérifie l'hypothèse de coercivité suivante :

$$\sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} -F_{K, \sigma}(u_\sigma - u_K) \geq \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mu_\sigma (u_\sigma - u_K)^2 + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{ext}} \mu_\sigma u_K^2$$

où les  $\mu_{\sigma, \sigma \in \mathcal{E}}$  sont des réels strictement positifs (en dimension  $N$ ,  $\frac{\mu_\sigma}{h_{\mathcal{M}}^{N-2}}$  ne tend pas vers zéro lorsque  $h_{\mathcal{M}} \rightarrow 0$ ).

Notons  $V(\sigma) = V(K, \sigma) \cup V(L, \sigma)$  le stencil du schéma pour la face  $\sigma \in \mathcal{E}_{int}$ . Nous écrivons l'équation de continuité du flux sur  $\sigma$  sous la forme :

$$-Div_\sigma(u) = -F_{K, \sigma} - F_{L, \sigma} = \sum_{J \in V(\sigma)} \alpha_{\sigma, J}(u_\sigma - u_J) = 0.$$

L'équation de conservation devient :

$$-Div_K(u) = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} F_{K, \sigma} = \sum_{\sigma \in V(K)} \alpha_{\sigma, K}(u_K - u_\sigma) = |K| f_K.$$

Notons que les stencils  $V(K)$  et  $V(\sigma)$  seront considérés symétriques. D'autre part, le nombre d'éléments des  $V(K)_{K \in \mathcal{M}}$  et  $V(\sigma)_{\sigma \in \mathcal{E}_{int}}$  est supposé borné, indépendamment du maillage. Pour  $J$  indice de maille ou de face, nous posons :

$$\Delta_J = \begin{cases} \frac{|Div_J(u)|}{\sum_{L \in V(J)} |u_L - u_J|} & \text{si } \sum_{L \in V(J)} |u_L - u_J| \neq 0, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Pour  $\nu \geq 0$ , le schéma initial est modifié de la manière suivante :

$$\begin{cases} \forall \sigma \in \mathcal{E}_{int}, -Div_\sigma(u) + \nu \sum_{J \in V(\sigma)} \{\Delta_\sigma + \Delta_J\} (u_\sigma - u_J) = 0 \\ \forall K \in \mathcal{M}, -Div_K(u) + \nu \sum_{\sigma \in V(K)} \{\Delta_K + \Delta_\sigma\} (u_K - u_\sigma) = |K| f_K \\ \forall \sigma \in \mathcal{E}_{ext}, u_\sigma = 0 \end{cases} \quad (5.11)$$

### 5.2.1 Propriétés du schéma modifié

Pour  $\sigma \in \mathcal{E}_{int}$  et  $K \in \mathcal{M}$ , nous définissons le flux modifié  $F'_{K, \sigma}$  :

$$F'_{K, \sigma} = F_{K, \sigma} - \nu \sum_{J \in V(K, \sigma)} \{\Delta_\sigma + \Delta_J\} (u_\sigma - u_J) \quad (5.12)$$



Dans [P19], nous montrons que les propositions 5.1.1, 5.1.3 et 5.1.4 sont encore vérifiées. D'autre part, dans [P19], nous prouvons la propriété suivante :

**Proposition 5.2.1** *Si  $\nu \geq 1$ , le schéma s'écrit sous la forme :*

$$\begin{aligned} \forall \sigma \in \mathcal{E}_{int}, \quad & \sum_{J \in V(\sigma)} \tau_{\sigma,J}^1(u)(u_\sigma - u_J) = 0. \\ \forall K \in \mathcal{M}, \quad & \sum_{\sigma \in V(K)} \tau_{\sigma,K}^2(u)(u_K - u_\sigma) = |K|f_K \end{aligned} \quad (5.13)$$

avec  $\tau_{\sigma,J}^1(u) \geq 0$  et  $\tau_{\sigma,K}^2(u) \geq 0$ .

**Remarque 5.2.2** : *Si les coefficients  $\tau_{\sigma,J}^1$  et  $\tau_{\sigma,K}^2$  sont strictement positifs, on montre alors que la solution vérifie le principe du maximum.*

### 5.3 Correction non linéaire d'ordre 2

Nous proposons ici une autre correction non linéaire qui donne des solutions non oscillantes pour des schémas volumes finis centrés sur les mailles. Elle se généralise aux méthodes hybrides [53] ou aux schémas DDFV [33, 13, 23, 38, 39, 47, 61, 62, 63] en suivant la méthode décrite dans [P19]. En pratique, elle est d'ordre 2 et s'avère donc très précise comparée à celle développée dans [P15] et dans le paragraphe 5.1.

Nous reprenons les notations de l'annexe A. Soit un schéma linéaire vérifiant les mêmes hypothèses que celles du paragraphe 5.1.

Pour chaque maille  $K$  et pour chaque maille ou face  $Z$  ( $Z \in V(K)$ ), nous supposons qu'il existe deux ensembles constitués de mailles ou de faces notées  $V'(K, Z)$  et  $(V'(Z, K)$  si  $Z \in V(K) \cap \mathcal{M}$ ) et des réels positifs notés  $(C_{K,L}, L \in V'(K, Z))$  et  $(C_{L,Z}, L \in V'(Z, K)$  si  $Z \in V(K) \cap \mathcal{M}$ ) tels que, si  $u$  est affine et  $u_K = u(x_K)$  (pour toute maille  $K$ ) et  $u_\sigma = u(x_\sigma)$  (pour tout  $\sigma \in \mathcal{E}_{ext}$ )

$$(u_K - u_Z) = - \sum_{L \in V'(K,Z)} C_{K,L}(u_K - u_L)$$

et si  $Z \in V(K) \cap \mathcal{M}$  :

$$(u_Z - u_K) = - \sum_{L \in V'(Z,K)} C_{L,Z}(u_Z - u_L).$$

Nous notons  $\gamma_{KZ} = \sum_{L \in V'(K,Z)} C_{K,L}$ . En suivant les notations de [70], nous définissons le gradient de la fonction  $u$  sur chaque maille  $K \in \mathcal{M}$ , ce qui donne :

$$g_K = \frac{1}{|m_K|} \sum_{L \in V(K)} b_{LK}(u_K - u_L),$$

$m_K$  et  $b_{LK}$  étant un volume et des vecteurs tels que  $g_K$  soit exact lorsque  $u$  est affine et  $u_K = u(x_K)$ . Pour  $Z \in V(K) \cap \mathcal{M}$ , nous notons :

$$v_{K,Z} = \frac{g_K \cdot (x_K - x_Z) |g_Z \cdot (x_K - x_Z)| + |g_K \cdot (x_K - x_Z)| g_Z \cdot (x_K - x_Z)}{|g_K \cdot (x_K - x_Z)| + |g_Z \cdot (x_K - x_Z)|}$$

si  $|g_K \cdot (x_K - x_Z)| + |g_Z \cdot (x_K - x_Z)| \neq 0$  et  $v_{K,Z} = 0$  sinon. Pour  $Z \in V(K) \cap \mathcal{E}_{ext}$ ,  $v_{K,Z}$  satisfait :  $v_{K,Z} = g_K \cdot (x_K - x_Z)$ . D'autre part, nous notons :

$$t_{K,Z}(u) = \frac{v_{K,Z}|u_K - u_Z| + |v_{K,Z}|(u_K - u_Z)}{|u_K - u_Z| + |v_{K,Z}|}$$

si  $|u_K - u_Z| + |v_{K,Z}| \neq 0$  et  $t_{K,Z} = 0$  sinon. De plus, nous définissons :

$$u_{\{KZ\}^{max}} = u_K + (\max_{L \in V'(K,Z)}(u_L - u_K), 0) \text{ et } u_{\{KZ\}^{min}} = u_K + (\min_{L \in V'(K,Z)}(u_L - u_K), 0).$$

Dans l'esprit de la formule (59) dans [70], nous définissons  $\forall K \in \mathcal{M}$  et  $\forall Z \in V(K) \cap \mathcal{M}$ ,  $\Theta_{K,Z}(u)$  satisfaisant :

$$\Theta_{K,Z}(u) = \begin{cases} \frac{(u_K - u_Z) - \min \{ \gamma_{KZ}(u_{\{KZ\}^{max}} - u_K), t_{K,Z}(u), u_K - u_Z, \gamma_{ZK}(u_Z - u_{\{ZK\}^{min}}) \}}{(u_K - u_Z)} & \text{si } u_K > u_Z \\ \frac{(u_K - u_Z) - \max \{ \gamma_{KZ}(u_{\{KZ\}^{min}} - u_K), t_{K,Z}(u), u_K - u_Z, \gamma_{ZK}(u_Z - u_{\{ZK\}^{max}}) \}}{(u_K - u_Z)} & \text{si } u_K < u_Z \\ 0 & \text{si } u_K = u_Z \end{cases} \quad (5.14)$$

Si  $Z \in V(K) \cap \mathcal{E}_{ext}$ ,  $\Theta_{K,Z}(u)$  devient :

$$\Theta_{K,Z}(u) = \begin{cases} \frac{(u_K - u_Z) - \min \{ \gamma_{KZ}(u_{\{KZ\}^{max}} - u_K), t_{K,Z}(u), u_K - u_Z \}}{(u_K - u_Z)} & \text{si } u_K > u_Z \\ \frac{(u_K - u_Z) - \max \{ \gamma_{KZ}(u_{\{KZ\}^{min}} - u_K), t_{K,Z}(u), u_K - u_Z \}}{(u_K - u_Z)} & \text{si } u_K < u_Z \\ 0 & \text{si } u_K = u_Z \end{cases} \quad (5.15)$$

La formule (59) de [70] a été modifiée avec l'introduction des termes  $t_{K,Z}(u)$  qui permettent en pratique d'accélérer les algorithmes de point fixe dans les applications numériques.

Soit  $\mu \geq 0$  et  $\nu \geq 0$ . Nous notons :  $\forall K \in \mathcal{M}$ ,  $\forall Z \in V(K)$ ,  $\tilde{\Theta}_{K,Z}(u) = \mu(|K| + |Z|) + \Theta_{K,Z}(u)$ , avec la convention  $|Z| = 0$  si  $Z \in \mathcal{E}_{ext}$ .

Nous proposons de modifier la méthode initiale de la manière suivante :

$$\begin{cases} \forall K \in \mathcal{M}, -Div_K(u) + \sum_{Z \in V(K)} \beta_{K,Z}(u) \tilde{\Theta}_{K,Z}(u)(u_K - u_Z) = |K|f_K \\ \sigma \in \mathcal{E}_{ext}, u_\sigma = 0 \end{cases} \quad (5.16)$$

où  $\beta_{K,Z}(u)$  vérifie l'égalité (5.3).

### 5.3.1 Propriétés de l'algorithme

Dans [P23], nous montrons que la propriété 5.1.2 est encore vraie pour le système (5.16) et que les propriétés 5.1.4 , 5.1.5 et 5.1.7 sont également vérifiées.

Considérons maintenant la discrétisation classique centrée du laplacien en dimension 1, avec une taille de maille constante  $\Delta x$ . Nous obtenons  $Div_j(u) = \frac{(u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}))}{\Delta x}$ . Nous supprimons tous les termes  $t_{K,Z}(u)$  dans la définition de  $\tilde{\Theta}_{K,Z}(u)$  qui ont été ajoutés pour améliorer les temps de calcul dans les applications numériques.

**Proposition 5.3.1** *Dans [P23], nous établissons qu'en dimension 1, pour un maillage à pas constant, avec la discrétisation centrée du laplacien, la correction non linéaire appliquée à des fonctions régulières à dérivées non nulles est d'ordre 2.*

**Remarque 5.3.2** : *Cette proposition reste vraie si on prend en compte les  $t_{K,Z}(u)$ .*

### 5.3.2 Résultats numériques

Nous considérons à nouveau le problème (1.5) avec  $\Omega = ]0, 0.5[ \times ]0, 0.5[$  et avec le même maillage. Nous choisissons à nouveau  $\beta_{K,J}^1$  vérifiant (5.6) avec  $\nu = 1$ ,  $\mu = 0$  et  $\eta = 0$  car cela s'avère suffisant pour supprimer toutes les oscillations. Pour chaque maille  $K$  du domaine, l'ensemble  $V'(K, Z)$  et les coefficients  $C_{K,L}$ ,  $L \in V'(K, Z)$  sont déduits de l'égalité  $\sum_{L \in V(K)} d_{K,L}(u_K - u_L) = 0$  pour des fonctions

linéaires, avec  $d_{K,L} = 1$  si  $L$  est une maille intérieure et  $d_{K,L} = 2$  si  $L \in \partial\Omega$ . Nous calculons à nouveau la solution du problème à l'aide d'un algorithme de point fixe (voir paragraphe 5.1.2 pour la définition de  $u^i$  et  $A(u^i)$ ). La méthode itérative s'écrit  $-B(u^i)(u^{i+1} - u^i) = A(u^i)u^i - f$ . Nous choisissons pour  $B$  la matrice du schéma non linéaire développé dans [P21] et dans le paragraphe 5.1 car nous constatons que cela accélère les calculs.

Nous montrons les résultats obtenus dans le tableau 5.3 avec la méthode linéaire présentée dans [78] et dans le chapitre 1 (VFSYM), avec la technique non linéaire du paragraphe 5.3 (VFSYM<sub>cor2</sub>) ( $\mu = 0, \eta = 0$ ), (VFSYM<sub>cor2,b</sub>) ( $\mu = 0, \eta = 0$  où les  $\tau_{K,Z}(u)$  sont supprimés dans (5.14) et (5.15)) et la méthode non linéaire développée dans [P15] et le paragraphe 5.1 (VFSYM<sub>cor1</sub>).

Nous observons que les algorithmes VFSYM<sub>cor2</sub>, VFSYM<sub>cor2,b</sub> et VFSYM<sub>cor1</sub> n'oscillent plus. Les schémas VFSYM<sub>cor2</sub> et VFSYM<sub>cor2,b</sub> semblent tendre vers l'ordre 2 alors que la méthode VFSYM<sub>cor1</sub> reste d'ordre 1 comme déjà montré dans [P15]. Pour les méthodes VFSYM<sub>cor2</sub> et VFSYM<sub>cor1</sub>, le nombre d'itérations *nit* reste inférieur à 50 alors que les temps de calcul sont plus importants pour le schéma VFSYM<sub>cor2,b</sub>.

$h$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{64}$	$\frac{1}{128}$
Erreur $L^2$ (VFSYM)	$5.21 \times 10^{-1}$	$1.96 \times 10^{-1}$	$7.14 \times 10^{-2}$	$1.65 \times 10^{-2}$	$2.14 \times 10^{-3}$
Ordre (VFSYM)		1.41	1.46	2.11	2.95
Val négatives (VFSYM)	12.5 %	9.38 %	5.46 %	2.14 %	0.53 %
$u_{min}$ (VFSYM)	$-2.9 \times 10^{-1}$	$-2.4 \times 10^{-1}$	$-1.4 \times 10^{-1}$	$-5.26 \times 10^{-2}$	$-1.33 \times 10^{-2}$
Erreur $L^2$ (VFSYM <sub>cor2</sub> )	$6.54 \times 10^{-2}$	$1.05 \times 10^{-2}$	$3.27 \times 10^{-3}$	$1.06 \times 10^{-3}$	$3.06 \times 10^{-4}$
Ordre (VFSYM <sub>cor2</sub> )		2.63	1.68	1.62	1.80
<i>nit</i>	48	19	20	27	44
Erreur $L^2$ (VFSYM <sub>cor2,b</sub> )	$2.02 \times 10^{-1}$	$3.76 \times 10^{-2}$	$7.14 \times 10^{-3}$	$1.60 \times 10^{-3}$	$3.65 \times 10^{-4}$
Ordre (VFSYM <sub>cor2,b</sub> )		2.42	2.40	2.16	2.14
<i>nit</i>	25	80	21	35	76
Erreur $L^2$ (VFSYM <sub>cor1</sub> )	$1.52 \times 10^{-1}$	$8.51 \times 10^{-2}$	$4.46 \times 10^{-2}$	$2.33 \times 10^{-2}$	$1.21 \times 10^{-2}$
Ordre (VFSYM <sub>cor1</sub> )		0.84	0.93	0.94	0.94
<i>nit</i>	3	11	8	12	15

TABLE 5.3 – Résultats obtenus avec les schémas VFSYM, VFSYM<sub>cor2</sub>, VFSYM<sub>cor2,b</sub> et VFSYM<sub>cor1</sub> en fonction du pas en espace pour le problème (1.5).

## 5.4 Convergence théorique

Nous notons  $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$  l'ensemble des fonctions constantes sur chaque maille de  $\mathcal{M}$ .

### 5.4.1 Une correction dépendant d'un paramètre $\epsilon$ (VFSYM<sub>cor1, $\epsilon$</sub> )

Nous proposons ici une variante de la technique non linéaire du paragraphe 5.1 afin d'établir un nouveau résultat de convergence de la méthode. Les hypothèses dépendent encore de la solution numérique calculée, mais elles sont bien plus faciles à vérifier et moins restrictives que celles données dans [P21]. Soit  $\epsilon > 0$  et  $\nu \geq 0$ . Nous supposons que pour tout  $K \in \mathcal{M}$ ,  $f_K \geq 0$ . Il est alors possible de changer légèrement les valeurs de  $f_K$  telles que pour tout  $K \in \mathcal{M}$ ,  $f_K > 0$  et telles que le schéma reste consistant. Nous définissons l'expression :

$$\rho_{K,J}(u) = \frac{1}{2} \min\left(\frac{|K|f_K}{\text{Card } V(K)}, \frac{|J|f_J}{\text{Card } V(J)}\right)$$

avec la convention  $\rho_{K,J}(u) = \rho_{K,K}(u)$  si  $J = \sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext}}$ . Posons :

$$\text{sgn}_{\epsilon}(u_K - u_J) = \frac{(u_K - u_J)}{|u_K - u_J| + \epsilon},$$

$$|K|f_K^2 = |K|f_K - \sum_{J \in V(K)} \rho_{K,J} \text{sgn}_{\epsilon}(u_K - u_J),$$

$$\theta_K(u) = \sum_{J \in V(K)} \frac{\text{sgn}_{\epsilon}(u_K - u_J)}{\text{Card}_{\epsilon} V(K)},$$

(Voir paragraphe 5.1.2 pour la définition de  $\text{Card}_{\epsilon} V(K)$ )

$$-\text{Div}_K^+(u) = \frac{-\text{Div}_K(u) + |\text{Div}_K(u)|}{2},$$

$$Exp_K(u) = \max \left( 2 - \frac{2|K|f_K^2}{\max(|Div_K(u)|, |K|f_K^2)}, 1 \right) \frac{-Div_K^+(u)}{Card_\epsilon V(K)}$$

et

$$\beta_{K,J}^\epsilon(u) = \nu \max(Exp_K(u), Exp_J(u)) \frac{1}{|u_K - u_J| + \epsilon} + \frac{\rho_{K,J}(u)}{|u_K - u_J| + \epsilon} \quad (5.17)$$

avec la convention  $Exp_J = 0$  si  $J = \sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext}}$  et  $-Div_K^+(u) = 0$  si  $Card_\epsilon V(K) = 0$ . La correction non linéaire s'écrit :

$$\begin{cases} \forall K \in \mathcal{M}, -Div_K(u) + \sum_{J \in V(K)} \beta_{K,J}^\epsilon(u)(u_K - u_J) = |K|f_K \\ \forall \sigma \in \mathcal{E}_{\text{int}}, F_{K,\sigma} + F_{L,\sigma} = 0 \\ \forall \sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext}}, u_\sigma = 0 \end{cases} \quad (5.18)$$

La proposition 5.1.2 est encore vraie par continuité du terme  $\mathcal{R}_K(u) = \sum_{J \in V(K)} \beta_{K,J}^\epsilon(u)(u_K - u_J)$  de  $\mathcal{H}_M$  dans  $\mathcal{H}_M$  et par coercivité de la méthode (voir proposition 6 dans [P21]).

**Proposition 5.4.1** *Pour  $\nu = 1$ , toutes les oscillations sont supprimées.*

**Preuve** Pour  $\nu = 1$ , si  $-Div_K \geq 0$ , le schéma s'écrit sous la forme (4.15) (voir proposition 3 dans [P21]) car  $\beta_{K,J}^\epsilon(u) > 0$  et car

$$\sum_{J \in V(K)} \max \left( 2 - \frac{2|K|f_K^2}{\max(|Div_K(u)|, |K|f_K^2)}, 1 \right) \frac{|\text{sgn}_\epsilon(u_K - u_J)|}{Card_\epsilon V(K)} \geq 1.$$

D'autre part, si  $-Div_K(u) < 0$ , nous obtenons :

$$\sum_{J \in V(K)} \beta_{K,J}^\epsilon(u)(u_K - u_J) = f_K + Div_K. \quad (5.19)$$

Cette formulation, comme décrit dans [P16], est suffisante pour supprimer toutes les oscillations car le second membre de (5.19) est positif et car  $\beta_{K,J}^\epsilon(u) > 0$ . ■

**Proposition 5.4.2** *Nous choisissons  $\nu = 1$ . Soit  $\epsilon$  vérifiant :*

$$\epsilon = \frac{1}{6} \min_{K \in \mathcal{M}} \frac{|K|f_K}{\sum_{Z \in V(K)} |\alpha_{K,Z}|}$$

et  $K_0 \in \mathcal{M}$  tel que :

$$\max \left( 2 - \frac{2|K_0|f_{K_0}^2}{\max(|Div_{K_0}(u)|, |K_0|f_{K_0}^2)}, 1 \right) \frac{-Div_{K_0}^+(u)}{Card_\epsilon V(K_0)} = \max_{K \in \mathcal{M}} \max \left( 2 - \frac{2|K|f_K^2}{\max(|Div_K(u)|, |K|f_K^2)}, 1 \right) \frac{-Div_K^+(u)}{Card_\epsilon V(K)}. \quad (5.20)$$

Si  $\theta_{K_0}(u) \neq -\frac{1}{2}$ , alors il existe une constante  $C_1$  telle que pour tout  $K \in \mathcal{M}$  :

$$\frac{|Div_K(u)|}{Card_\epsilon V(K)} \leq C_1 K_0 f_{K_0}. \quad (5.21)$$

**Preuve**

En  $K_0$ , l'équation (5.18) devient :

$$- \operatorname{Div}_{K_0}(u) + \sum_{J \in V(K_0)} \max \left( 2 - \frac{2|K_0|f_{K_0}^2}{\max(|\operatorname{Div}_{K_0}(u)|, |K_0|f_{K_0}^2)}, 1 \right) \frac{(-\operatorname{Div}_{K_0}^+)(u)}{\operatorname{Card}_\epsilon V(K_0)} \operatorname{sgn}_\epsilon(u_{K_0} - u_J) = |K_0|f_{K_0}^2 \quad (5.22)$$

Soulignons que  $-\operatorname{Div}_{K_0}(u) \geq 0$ . En effet, dans le cas contraire, la correction s'annule et nous obtenons :  $-\operatorname{Div}_{K_0}(u) = |K_0|f_{K_0}^2$ , ce qui est contradictoire avec  $-\operatorname{Div}_{K_0}(u) < 0$ .

- Cas a) :  $2 - \frac{2|K_0|f_{K_0}^2}{\max(|\operatorname{Div}_{K_0}(u)|, |K_0|f_{K_0}^2)} \leq 1$

Cela signifie que  $|\operatorname{Div}_{K_0}(u)| \leq 2|K_0|f_{K_0}^2$ . D'autre part, on peut déduire de (5.22) que :

$$3|\operatorname{Div}_{K_0}(u)| \geq \frac{1}{2}|K_0|f_{K_0} \text{ car}$$

$$\sum_{J \in V(K_0)} \max \left( 2 - \frac{2|K_0|f_{K_0}^2}{\max(|\operatorname{Div}_{K_0}(u)|, |K_0|f_{K_0}^2)}, 1 \right) \frac{\operatorname{sgn}_\epsilon(u_{K_0} - u_J)}{\operatorname{Card}_\epsilon V(K_0)} \leq 2$$

et car  $|K_0|f_{K_0}^2 \geq \frac{1}{2}|K_0|f_{K_0}$ . Comme  $-\operatorname{Div}_{K_0}(u) \leq \sum_{J \in V(K_0)} |\alpha_{K_0, J}| |u_{K_0} - u_J|$ , nous déduisons qu'il

existe  $J \in V(K_0)$  tel que  $|u_{K_0} - u_J| \geq \frac{\frac{1}{6}|K_0|f_{K_0}}{\sum_{J \in V(K_0)} |\alpha_{K_0, J}|}$ .

Avec l'hypothèse sur  $\epsilon$ , nous obtenons,  $\operatorname{Card}_\epsilon V(K_0) \geq \frac{1}{2}$ . Nous déduisons finalement :

$$\frac{|\operatorname{Div}_{K_0}(u)|}{\operatorname{Card}_\epsilon V(K_0)} \leq 4|K_0|f_{K_0}^2. \quad (5.23)$$

- Cas b) :  $2 - \frac{2|K_0|f_{K_0}^2}{\max(|\operatorname{Div}_{K_0}(u)|, |K_0|f_{K_0}^2)} > 1$

Si  $|\operatorname{Div}_{K_0}(u)| \leq |K_0|f_{K_0}^2$ , le cas b) ne peut être satisfait. Avec  $|\operatorname{Div}_{K_0}(u)| > |K_0|f_{K_0}^2$ , l'équation (5.22) devient :

$$-\operatorname{Div}_{K_0}(u)(1 + 2\theta_{K_0}(u)) = |K_0|f_{K_0}^2(1 + 2\theta_{K_0}(u)) \quad (5.24)$$

Si  $\theta_{K_0}(u) \neq -\frac{1}{2}$ , on déduit que  $-\operatorname{Div}_{K_0}(u) = |K_0|f_{K_0}^2$  ce qui est en contradiction avec le cas b). ■

La majoration obtenue (5.23) est du même type que celle calculée dans la proposition 3 de [P22]. Tous les termes de la correction non linéaire sont donc contrôlés. La proposition 4 de [P22] nous permet de déduire la convergence du schéma avec des maillages admissibles satisfaisant  $\theta_{K_0}(u) \neq -\frac{1}{2}$ .

**Remarque 5.4.3** *C'est bien sûr la condition  $\theta_{K_0}(u) \neq -\frac{1}{2}$  qui sera facile à vérifier a posteriori dans un calcul numérique.*

### 5.4.2 Une autre correction sans ajout de paramètres ( $\text{VFSYM}_{cor1,\nu}^+$ )

Nous proposons de montrer un autre résultat de convergence non publié sur un schéma proche de celui défini avec les égalités (5.3) et (5.6). Il ne dépend plus de la solution numérique et du signe de  $f_K$ , mais de la valeur de  $\nu$  que l'on choisira proche de 1. La preuve n'est donc pas complète mais le résultat nous a paru intéressant dans le cadre d'un développement logiciel pour la recherche d'éventuelles erreurs informatiques. Par exemple, si la technique ne converge pas numériquement pour  $\nu < 1$  (avec  $\nu$  indépendant de  $h_{\mathcal{M}}$ ), cela viendra sûrement d'une erreur de programmation.

La méthode vérifie à nouveau le système (5.2) avec  $\beta_{K,J}(u)$  qui s'écrit ici (pour  $\nu \geq 0$ ) :

$$\beta_{K,J}(u) = \nu \left( \frac{(-Div_K^+(u))}{\sum_{Y \in V(K)} |u_Y - u_K|} + \frac{(-Div_J^+(u))}{\sum_{Y \in V(J)} |u_Y - u_J|} \right) + \min \left( |K| + |J|, \min \left( \frac{|K|}{\sum_{Y \in V(K)} |u_Y - u_K|}, \frac{|J|}{\sum_{Y \in V(J)} |u_Y - u_J|} \right) \right) \quad (5.25)$$

avec la convention  $Div_J^+(u) = 0$  et  $|J| = 0$  si  $J \in \mathcal{E}_{ext}$  et  $\frac{-Div_K^+(u)}{\sum_{Y \in V(K)} |u_Y - u_K|} = 0$  si  $\sum_{Y \in V(K)} |u_Y - u_K| = 0$ .

Nous posons :

$$\beta_{K,J}^2(u) = \min \left( |K| + |J|, \min \left( \frac{|K|}{\sum_{Y \in V(K)} |u_Y - u_K|}, \frac{|J|}{\sum_{Y \in V(J)} |u_Y - u_J|} \right) \right) \quad \text{et} \quad \Xi_K = \sum_{Y \in V(K)} |u_Y - u_K|. \quad (5.26)$$

La proposition 5.1.2 est encore vraie par continuité du terme  $\mathcal{R}_K(u) = \sum_{J \in V(K)} \beta_{K,J}(u_K - u_J)$  de  $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$  dans  $\mathcal{H}_{\mathcal{M}}$  et par coercivité de la méthode (voir proposition 6 dans [P21]).

**Proposition 5.4.4** Prenons  $\nu = 1$ . Si,  $\forall K \in \mathcal{M}$ ,  $f_K \geq 0$ , alors toutes les oscillations sont supprimées.

**Preuve** Comme dans le paragraphe 5.4.1, si  $-Div_K \geq 0$ , le schéma s'écrit sous la forme (4.15) (voir proposition 3 dans [P21]) car  $\forall K \in \mathcal{M}$  et  $J \in V(K)$   $\beta_{K,J} > 0$  et car

$$\sum_{J \in V(K)} \beta_{K,J}(u) |u_K - u_J| \geq |Div_K|.$$

D'autre part, si  $-Div_K(u) < 0$ , nous obtenons :

$$\sum_{J \in V(K)} \beta_{K,J}(u) (u_K - u_J) = f_K + Div_K. \quad (5.27)$$

Cette formulation, comme décrit dans [P16], est suffisante pour supprimer toutes les oscillations car le second membre de (5.27) est positif et car  $\beta_{K,J}(u) > 0$ . ■

**Proposition 5.4.5** Soit  $\nu < 1$ . Il existe une constante  $C_3$  telle que le schéma vérifie :

$$\sum_{K \in \mathcal{M}} |Div_K| \leq \frac{C_3}{1-\nu} \sum_{K \in \mathcal{M}} |K|(f_K + 1).$$

**Preuve**

Notons  $\mathcal{P}$ , l'ensemble des mailles telles que  $-Div_K \geq 0$  et  $\mathcal{N}$ , l'ensemble des mailles telles que  $-Div_K < 0$ . Nous écrivons :

$$\sum_{K \in \mathcal{P}} -Div_K + \sum_{K \in \mathcal{P}, J \in V(K)} \beta_{K,J}(u)(u_K - u_J) = \sum_{K \in \mathcal{P}} |K|f_K.$$

Nous déduisons :

$$\begin{aligned} \sum_{K \in \mathcal{P}} -Div_K + \nu \sum_{K \in \mathcal{P}, J \in V(K), -Div_J < 0} -\frac{Div_K}{\Xi_K}(u_K - u_J) + \nu \sum_{K \in \mathcal{P}, J \in V(K), J \in \mathcal{E}_{ext}} \left(-\frac{Div_K}{\Xi_K}\right)u_K = \\ \sum_{K \in \mathcal{P}} |K|f_K - \sum_{K \in \mathcal{P}, J \in V(K)} \beta_{K,J}^2(u)(u_K - u_J). \end{aligned} \quad (5.28)$$

En sommant sur l'ensemble des cellules les équations du système (5.2), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \sum_{K \in \mathcal{P}} (-Div_K) + \sum_{K \in \mathcal{N}} (-Div_K) + \nu \sum_{K \in \mathcal{P}, J \in V(K), J \in \mathcal{E}_{ext}} \left(-\frac{Div_K^+}{\Xi_K}\right)u_K = \sum_{K \in \mathcal{M}} |K|f_K \\ - \sum_{K \in \mathcal{M}, J \in V(K), J \in \mathcal{E}_{ext}} \beta_{K,J}^2(u)u_K. \end{aligned} \quad (5.29)$$

- Cas a) :  $\sum_{K \in \mathcal{P}} -Div_K = 0$ .

Avec l'équation (5.29), nous écrivons :

$$\sum_{K \in \mathcal{N}} |Div_K| \leq \sum_{K \in \mathcal{M}} |K| \leq \sum_{K \in \mathcal{M}} |K|(f_K + 1).$$

C'est-à-dire :

$$\sum_{K \in \mathcal{M}} |Div_K| \leq \sum_{K \in \mathcal{M}} |K|(f_K + 1).$$

- Cas b) :  $\sum_{K \in \mathcal{P}} -Div_K > 0$ .

En reprenant l'équation (5.28), nous obtenons finalement :

$$\sum_{K \in \mathcal{P}} -Div_K(1 + \nu\zeta) = \sum_{K \in \mathcal{P}} |K|f_K - \sum_{K \in \mathcal{P}, J \in V(K)} \beta_{K,J}^2(u)(u_K - u_J),$$



$$\text{avec } \zeta = \frac{\sum_{K \in \mathcal{P}, J \in V(K), -Div_J < 0} -\frac{Div_K}{\Xi_K}(u_K - u_J) + \sum_{K \in \mathcal{P}, J \in V(K), J \in \mathcal{E}_{ext}} \left(-\frac{Div_K}{\Xi_K}\right)u_K}{\sum_{K \in \mathcal{P}} -Div_K}.$$

Comme  $\zeta \leq 1$ , nous déduisons :

$$\sum_{K \in \mathcal{P}} |Div_K| \leq \sum_{K \in \mathcal{P}} |K|(f_K + 1) \frac{1}{1-\nu} \leq \sum_{K \in \mathcal{M}} |K|(f_K + 1) \frac{1}{1-\nu}. \quad (5.30)$$

Or, d'après (5.29)

$$\sum_{K \in \mathcal{N}} |Div_K| \leq 2 \sum_{K \in \mathcal{P}} |Div_K| + \sum_{K \in \mathcal{M}} |K| \leq 2 \sum_{K \in \mathcal{P}} |Div_K| + \frac{1}{1-\nu} \sum_{K \in \mathcal{M}} |K|(f_K + 1).$$

Nous déduisons d'après (5.30) :

$$\sum_{K \in \mathcal{N}} |Div_K| \leq 3 \sum_{K \in \mathcal{M}} |K|(f_K + 1) \frac{1}{1-\nu}$$

et donc :

$$\sum_{K \in \mathcal{M}} |Div_K| \leq 4 \sum_{K \in \mathcal{M}} |K|(f_K + 1) \frac{1}{1-\nu}.$$

Nous choisissons  $C_3 = 4$ . ■

**Proposition 5.4.6** *Si  $\nu \leq \xi < 1$ , (avec  $\frac{h_{\mathcal{M}}}{1-\xi} \rightarrow 0$  lorsque  $h_{\mathcal{M}} \rightarrow 0$ ), avec des maillages  $\mathcal{M}$  admissibles définis dans [P21] tels que  $\text{reg} \mathcal{M}$  soit bornée, les solutions des équations (5.2) et (5.25) convergent vers la solution de 3.1 lorsque  $h_{\mathcal{M}} \rightarrow 0$ .*

**Preuve**

D'après la proposition 5.4.5, comme le nombre d'éléments des  $V(K)_{K \in \mathcal{M}}$  est borné, il existe une constante  $C_4$  indépendante de  $h_{\mathcal{M}}$  telle que :

$$h_{\mathcal{M}} \sum_{K \in \mathcal{M}} \sum_{J \in V(K)} \beta_{K,J}(u) |u_K - u_J| \leq \frac{C_4}{1-\nu} h_{\mathcal{M}} \sum_{K \in \mathcal{M}} |K|(f_K + 1). \quad (5.31)$$

Comme  $f \in L^2(\Omega)$  et  $\frac{h_{\mathcal{M}}}{1-\nu} \rightarrow 0$ , nous déduisons que :

$$\sum_{K \in \mathcal{M}} h_{\mathcal{M}} \sum_{J \in V(K)} \beta_{K,J}(u) |u_K - u_J| \rightarrow 0 \text{ lorsque } h_{\mathcal{M}} \rightarrow 0.$$

Ce qui donne :

$$\sum_{K \in \mathcal{M}} h_K \sum_{J \in V(K)} \beta_{K,J}(u) |u_K - u_J| \rightarrow 0 \text{ lorsque } h_{\mathcal{M}} \rightarrow 0.$$

Nous concluons en utilisant la proposition 7 décrite dans [P21]. ■

**Remarque 5.4.7** *On peut choisir par exemple  $\nu = 0.9$  ou si c'est nécessaire  $\nu \leq |1 - h_{\mathcal{M}}^\tau|$  avec  $\tau < 1$ . Dans ce dernier cas, la proposition précédente reste vraie car il existe  $C_5$  telle que :*

$$\sum_{K \in \mathcal{M}} h_{\mathcal{M}} \sum_{J \in V(K)} \beta_{K,J}(u) |u_K - u_J| \leq C_5 h_{\mathcal{M}}^{1-\tau}.$$

**Remarque 5.4.8** *Pour  $\nu = 1$ , s'il existe une constante  $C_6$  indépendante de  $h_{\mathcal{M}}$  telle que*

$$\sum_{K \in \mathcal{M}} |Div_K| \leq \frac{C_6}{h_{\mathcal{M}}^\tau} \sum_{K \in \mathcal{M}} |K|(f_K + 1) \text{ avec } \tau < 1,$$

*alors les solutions des équations (5.2) et (5.25) (ou (5.3) et (5.6)) convergent vers la solution de (3.1) lorsque  $h_{\mathcal{M}} \rightarrow 0$ . La preuve est la même que celle donnée dans la proposition 5.4.6.*

**Remarque 5.4.9** *La proposition 5.4.6 se généralise au schéma d'ordre 2 défini par les équations (5.16) et (5.25). En effet, la proposition 5.4.5 reste vraie car  $\Theta_{K,Z}(u)$  défini dans (5.14) et (5.15) est inférieur à 1.*

**Remarque 5.4.10** *Nous imposons une condition sur  $\nu$  pour obtenir un résultat théorique de convergence. En pratique, dans nos tests numériques, nous obtenons toujours une solution convergente pour  $\nu = 1$ .*

# Perspectives

Nous avons donc construit des schémas linéaires et non linéaires pour des problèmes elliptiques ou paraboliques.

Voici un certain nombre de pistes qui pourraient être explorées dans le futur :

- Application sur les équations de Maxwell de nos méthodes linéaires en dimension 2. Il existe en effet un lien direct entre les schémas discrétisant les opérateurs de diffusion et ceux approchant les opérateurs de rotation [P1, 14, 65]. Par exemple, il sera intéressant de stabiliser les méthodes développées dans [P1] sur des maillages de triangles allongés.
- Pour un maillage de triangles : développement d'une variante de la discrétisation du chapitre 3 en adaptant le lieu des degrés de liberté en fonction du tenseur de diffusion ou de la déformation de la maille. Cette approche devrait permettre de supprimer les hypothèses d'existence de maillage dual et les hypothèses 3.3.3 et 3.3.5. Soulignons que cette variante pourra également être appliquée sur le travail proposé dans [3] de manière à toujours définir le point à moyenne harmonique sur des triangles déformés ou des tenseurs très anisotropes.
- Développement de schémas linéaires qui vérifient le principe du maximum sur certains maillages déformés. On pense ici à des variantes des éléments finis et des techniques VFMPFA (Multi Point Flux Approximations). Bien sûr, cela ne concerne que des maillages de forme particulière.
- Application de nos techniques linéaires sur les codes développés dans le service STMF du CEA [17, 35, 55, 86], approchant le modèle de Navier-Stokes pour des maillages non conformes.
- Construction d'un schéma linéaire de type volumes finis approchant des opérateurs de diffusion sur des maillages généraux qui aboutit à une méthode de type VF5 pour des rectangles, à un stencil à 9 points pour des maillages de quadrangles déformés raisonnablement et à un stencil de 25 points pour les quadrilatères très déformés.
- Il est envisagé dans la feuille de route du département DM2S [45] de monter en ordre les méthodes de type Galerkin discontinu [12, 46]. L'idée serait d'appliquer sur ces schémas les corrections non linéaires présentées dans le chapitre 5. En effet, il est bien connu que la montée en ordre d'un schéma peut être à l'origine d'oscillations comme cela est montré dans [41].
- Application de la correction du paragraphe 5.3 au schéma d'ordre 4 proposé dans [41]. On espère que la méthode restera d'ordre 4 et qu'il sera possible de le prouver théoriquement en utilisant les mêmes techniques que dans [41].
- Applications des corrections non linéaires présentées dans le chapitre 5 sur des équations convectives ou des systèmes d'équations hyperboliques [22, 43, 76]. Il sera intéressant de les étudier d'un point de vue théorique et applicatif et de les comparer aux méthodes existantes dans la littérature [42, 44, 58].

# Références

- [1] I. Aavatsmark, T. Barkve, O. Boe, T. Mannseth. Discretization on unstructured grids for inhomogeneous, anisotropic media. Part I : Derivation of the methods, *Siam J. Sci. Comput.*, Vol. 19,  $n^{\circ}5$ , pp. 1700-1716, September 1998.
- [2] I. Aavatsmark , T. Barkve, O. Boe, Mannseth. Discretization on unstructured grids for inhomogeneous, anisotropic media. Part II : Discussion and numerical results, *Siam J. Sci. Comput.*, Vol. 19,  $n^{\circ}5$ , pp. 1717-1736, September 1998.
- [3] L. Agélas, R. Eymard, R. Herbin. A nine-point finite volume scheme for the simulation of diffusion in heterogeneous media, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00350139/fr/>, *Comptes Rendus Mathématique*, Volume 347, Issues 11-12, June 2009, Pages 673-676.
- [4] L. Agélas, R. Masson. Convergence of the finite volume MPFA O scheme for heterogeneous anisotropic diffusion problems on general meshes, *Comptes Rendus Mathématique*, Volume 346, Issues 17-18, September 2008, Pages 1007-1012.
- [5] L. Agelas, C. Guichard, R. Masson. Convergence of finite volume MPFA O type schemes for heterogeneous anisotropic diffusion problems on general meshes, *International Journal on Finite Volume* volume 7,2, 2010.
- [6] L. Agélas, R. Eymard. A symmetric volume scheme for the approximation of the diffusion equation on general meshes, (communication personnelle), 2008.
- [7] L. Agélas, D. Di Pietro and J. Droniou. The G method for heterogeneous anisotropic diffusion on general meshes, *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 44(4) : 597-625, 2010. DOI:10.1051/m2an/2010021.
- [8] L. Agélas, C. Guichard and R. Masson. Convergence of Finite Volume MPFA O type Schemes for Heterogeneous Anisotropic Diffusion Problems on General Meshes. *International Journal on Finite Volumes*, 7, 2 (2010), 1-33.
- [9] L. Agelas, D. Di Pietro, R. Masson. A symmetric and coercive finite volume scheme for multiphase porous media flow problems with applications in the oil industry, *Finite Volumes for Complex Applications V*, 35-51, 2008.
- [10] L. Agélas, D.A. Di Pietro. A Symmetric Finite Volume Scheme for Anisotropic Heterogeneous Second-order Elliptic Problems, *Finite Volumes for Complex Applications V* (R. Eymard and J.M. Hérard, eds.), John Wiley & Sons, 2008, pp. 705-716.
- [11] G. Ansanay-Alex, B. Piar and D. Vola. A Galerkin Finite Element Solution, *Finite Volumes for Complex Applications V* (R. Eymard and J.M. Hérard, eds.), John Wiley & Sons, 2008, pp. 717-733.
- [12] J.-B. Apoung Kamga, B. Després. CFL condition and boundary conditions for DGM approximation of convection-diffusion, *SIAM J. Numer. Anal.* 44 (2006) 2245-2269.

- [13] B. Andreianov, F. Boyer, F. Hubert. Discrete duality finite volume schemes for Leray-Lions type elliptic problems on general 2D meshes, *Numerical Methods for PDEs Vol. 23, n<sup>o</sup>1*, pp 145–195, (2007).
- [14] F. Assous, P. Degond, E. Heintzé, P.A. Raviart, J. Segré. On a finite element method for solving the three-dimensional Maxwell equations, *J. Comput. Phys.* 109 (1993) 222-237.
- [15] J. Baranger, J.F. Maître and F. Oudin. Connection between finite volume and mixed finite element methods. *RAIRO - Modél. Math. Anal. Numér.* 30 (1996) 445-465.
- [16] A. Beccantini, S. Gounand. Evaluation of the diffusive Terms of the Navier-Stokes Equations via a Cell-Centered Finite Volume Approach, *Rapport DM2S, SFME/LTMF/RT/02-024/A*.
- [17] A. Bergeron, Ph. Fillion, D. Gallo, E. Royer. FLICA4 v1.8, Modèles physiques, *Rapport CEA, SFME/LETR/RT/02-005/A*.
- [18] E. Bertolazzi, G. Manzini. A second-order maximum principle preserving volume method for steady convection-diffusion problems, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 43(5) : 2172-2199 (2005)
- [19] F. Blachère R. Turpault. An admissibility and asymptotic-preserving scheme for systems of conservation laws with source term on 2D unstructured meshes, *Journal of Computational Physics*. A paraître.
- [20] X. Blanc, E. Labourasse, A positive scheme for diffusion problems on deformed meshes, *Journal of Applied Mathematics and Mechanics (ZAMM)*, pp 1-21, 2015.
- [21] A. Bourgeat, M. Kern, S. Schumacher, J. Talandier. Nuclear Waste Disposal Far Field Simulation, 2001, GDR Momas, [www.gdrmomas.org](http://www.gdrmomas.org).
- [22] F. Bouchut. Nonlinear stability of finite volume methods for hyperbolic conservation laws, and well-balanced schemes for sources, *Frontiers in Mathematics series*, Birkhäuser, 2004, ISBN 3-7643-6665-6.
- [23] F. Boyer, F. Hubert : Finite volume method for 2D linear and nonlinear elliptic problems with discontinuities, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. 46, n<sup>o</sup> 6, pp. 3032–3070, (2008).
- [24] F. Brezzi F., M. Fortin. *Mixed and Hybrid Finite Methods*, Springer-Verlag, New York, 1991.
- [25] F. Brezzi, A. Buffa, K. Lipnikov. Mimetic finite differences for elliptic problems. *M2AN : Math. Model. Numer. Anal.* V.43, 2009, pp.277-295.
- [26] C. Buet, S. Cordier. On the non existence of monotone linear schema for some linear parabolic equations, *C.R. Acad. Sci. Paris, Ser. I* 340, 2005, pp. 399–404.
- [27] E. Burman, A. Ern. Discrete maximum principle for Galerkin approximations of the Laplace operator on arbitrary meshes, *Comptes Rendus Mathématique*, Volume 338, Issue 8, 15 April 2004, Pages 641-646.
- [28] C. Cancès, C. Guichard. Convergence of a nonlinear entropy diminishing Control Volume Finite Element scheme for solving anisotropic degenerate parabolic equations. *Mathematics of Computation*, 2014.
- [29] R. Cautrès, R. Herbin, F. Hubert. The Lions domain decomposition algorithm on non matching cell-centered finite volume meshes, *IMA J. Numer. Anal.* **24**, 2004, pp. 465–490.
- [30] G. Chavent, J.E. Roberts. A Unified Physical Presentation of Mixed, Mixed Hybrid Finite Elements and Standard Finite Difference Approximations for the Determination of Velocities in Waterflow Problems, *Advance in Water Resources*, Vol 14, n<sup>o</sup> 6, pp. 329-348, 1991.

- [31] C. Chainais-Hillairet, J. Droniou. Convergence analysis of a mixed finite volume scheme for an elliptic-parabolic system modeling miscible fluid flows in porous media. *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 45, No 5, 2007, p. 2228-2258.
- [32] C. Chainais-Hillairet, J. Droniou, R. Eymard. Use of Mixed Finite Volume Method. *Finite Volumes for Complex Applications V* (R. Eymard and J.M. Hérard, eds.), John Wiley & Sons, 2008, pp. 751-760.
- [33] C. Chainais-Hillairet, S. Krell, A. Mouton. Convergence analysis of a DDFV scheme for a system describing miscible fluid flows in porous media. *Num. Methods for PDE*, 2014.
- [34] P.G. Ciarlet, P.A. Raviart. Maximum principle and uniform convergence for the finite element method, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 2 (1973) 17-31.
- [35] S. Clerc, Ph. Fillion. FLICA4 v1.8 : Méthode numérique, Rapport CEA, SFME/LETR/RT/01-020/A.
- [36] Y. Coudière. Analyse de schémas volumes finis sur maillage non structurés pour des problèmes linéaires hyperboliques et elliptiques. Thèse de l'université Paul Sabatier de Toulouse, 1999.
- [37] Y. Coudière, J.P. Vila and P. Villedieu. Convergence Rate of a Finite Volume Scheme for a Two Dimensional Convection Diffusion Problem. *M2AN*, 33 (3) pp 493-516, 1999.
- [38] Y. Coudière, C. Pierre, O. Rousseau, R. Turpault. A 2D/3D Discrete Duality Finite Volume Scheme. Application to ECG simulation, *International Journal on Finite Volumes*, Episciences.org, 2009, 6 (1), pp.1-24.
- [39] Y. Coudière, F. Hubert. A 3D discrete duality finite volume method for nonlinear elliptic equations, *Siam Journal on Scientific Computing*, 2011, 33 (4), pp.1739-1764.
- [40] F. Dabbène. Schémas de diffusion-convection en éléments finis mixtes hybrides, Rapport CEA-DMT/95/613(1995).
- [41] B. Després. Non linear finite volume schemes for the heat equation in 1D, *M2AN* 48 (01), 2014, pp. 107-134.
- [42] B. Després, F. Lagoutière. Un schéma non linéaire anti-dissipatif pour l'équation d'advection linéaire, *C. R. Acad. Sci. Paris*, t. 328, Série I, p. 939-944, 1999.
- [43] B. Després and F. Dubois. Systèmes hyperboliques de lois de conservation. Application à la dynamique des gaz. Les Editions de l'Ecole Polytechnique, 2005.
- [44] B. Després. Finite volume transport schemes. *Numer Math* 2008;108 : 529-556.
- [45] Département de modélisation des systèmes et structures. Feuille de route à paraître, rapport interne CEA, 2017.
- [46] D.A. Di Pietro and A. Ern. *Mathematical Aspects of Discontinuous Galerkin Methods*, vol. 69, SMAI Mathématiques et Applications, Springer, 2012.
- [47] K. Domelevo, P. Omnes. A Finite Volume Method for the Laplace Equation on almost Arbitrary Two-Dimensional Grids, *M2AN*, 39, 6 (2005) 1203-1249.
- [48] J. Droniou, R. Eymard, T. Gallouët and R. Herbin. A unified approach to mimetic finite difference, hybrid finite volume and mixed finite volume methods, *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 20(2) (2010) 265–295.
- [49] J. Droniou. Finite volume schemes for diffusion equations : introduction to and review of modern methods, *Math. Models Methods Appl. Sci. (M3AS)* 24 (8), 1575-1619, 2014 (special issue on Recent Techniques for PDE Discretizations on Polyhedral Meshes).

- [50] F. Dubois. Quels schémas numériques pour les volumes finis ? Neuvième séminaire sur les fluides compressibles, CEA Saclay, 1999.
- [51] R. Eymard, T. Gallouët, R. Herbin. Finite Volume Method, Handbook of Numerical Analysis, Vol VII, 2000. Editors : P.G. Ciarlet and J.L. Lions (1999).
- [52] R. Eymard, T. Gallouët, R. Herbin. A finite volume scheme for anisotropic diffusion problems, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 339, 2004.
- [53] R. Eymard, T. Gallouët, R. Herbin. Discretization of heterogeneous and anisotropic diffusion problems on general non-conforming meshes. Sushi : A Scheme Using Stabilization and Hybrid Interfaces, IMA Journal of Numerical Analysis, 30(4) : 1009-1034, 2010.
- [54] R. Eymard, C. Guichard, and R. Herbin. Small-stencil 3D schemes for diffusive flows in porous media. M2AN, 46 :265-290, 2012.
- [55] G. Fauchet, A. Gerschenfeld, Y. Gorsse. PolyMAC : un schéma décalé sur polyèdres quelconques, exposé interne au CEA du 22/11/2016.
- [56] I. Faille, T. Gallouët, R. Herbin. Des mathématiciens découvrent les volumes finis, S.M.A.I., Matapli, Bulletin de liaison 28 (1991).
- [57] L. Gavete, M.L. Gavete, J.J. Benito. Improvements of generalized finite difference method and comparison with other meshless method, Applied Mathematical Modelling, Volume 27, Issue 10, October 2003, Pages 831-847.
- [58] E. Godlewski, P.A Raviart "Hyperbolic systems of conservation laws", Ellipses, 1991.
- [59] S. Gounand. Communication personnelle, 2005.
- [60] R. Herbin, F. Hubert. Benchmark on discretization schemes for anisotropic diffusion problems on general grids, 5th International Symposium on Finite Volumes for Complex Applications, June 08-13, <http://www.latp.univ-mrs.fr/fvca5>, 2008.
- [61] F. Hermeline. Une méthode de volumes finis pour des équations elliptiques du second ordre, C. R. Acad. Sci. Paris 326, 1433-1436, 1998.
- [62] F. Hermeline. A finite Volume Method for the approximation of Diffusion Operators on Distorted Meshes, Journal of Computational Physics 160, 481-499, 2000.
- [63] F. Hermeline. Approximation of diffusion operators with discontinuous tensor coefficients on distorted meshes, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg, 192(2003) 1939-1959.
- [64] F. Hermeline. Numerical experiments with the DDFV method, Finite Volumes for Complex Applications V (R. Eymard and J.M. Hérard, eds.), John Wiley & Sons, 2008, pp. 851-864.
- [65] F. Hermeline, S. Layouni, P. Omnes. A finite volume method for the approximation of Maxwell's equations in two space dimensions on arbitrary meshes. Journal of Computational Physics 227 (22), 9365-9388, 2008.
- [66] I. Kapyrin. A family of monotone methods for the numerical of three-dimensional diffusion problems on unstructured tetrahedral meshes, Dokl. Math. 2007, Vol. 76, n<sup>o</sup> 2, pp. 734-738.
- [67] E. Keilegavlen, J. M. Nordbotten, I. Aavatsmark. Sufficient criteria are necessary for monotone control volume methods, Applied Mathematics Letters 22, 2009, pp. 1178-1180.
- [68] D. S. Kershaw. Differencing of the diffusion equation in Lagrangian hydrodynamic codes, J. Comput. Phys. 39, 1981, pp. 375-395.
- [69] R.A. Klausen, R. Winther. Convergence of Multi-Point Approximations on Quadrilateral Grids, Num. Met. PDEs, Vol 22, n<sup>o</sup> 6, pp. 1438-1454, 2006.



- [70] D. Kuzmin, M.J. Shashkov, D. Svyatskiy. A constrained finite element method satisfying the discrete maximum principle for anisotropic diffusion problems. *Journal of Computational Physics* 228 (2009) 3448-3463.
- [71] C. Le Potier. Méthode de volumes finis pour une équation de transport. Application à Couplex1, au site du Mont-Terri et au site Est. Rapport SFME/MTMS/RT/03-46/A.
- [72] C. Le Potier. Finite volume in 2 or 3 dimensions for a diffusion convection equation applied to porous media with Cast3m. Vol  $n^0$  2, 1015-1026, Proceedings of the  $XV^{th}$  International Conference on Computational methods in Water Resources 2004, Elsevier.
- [73] C. Le Potier. Une nouvelle formulation volumes finis en 3 dimensions pour une équation de transport avec des tenseurs fortement anisotropes. Application à des calculs de sûreté sur le site de l'Est, Rapport SFME/MTMS/RT/05-26/A.
- [74] C. Le Potier, A. Mahamane. Correction non linéaire et principe du maximum avec des schémas hybrides pour la discrétisation d'opérateurs de diffusion, Rapport interne CEA, 2012.
- [75] C. Le Potier, A. Mahamane, P. Omnes. Correction non linéaire d'un schéma volumes finis en dualité discrète (DDFV) respectant le principe du maximum pour la discrétisation d'opérateurs de diffusion. Rapport interne CEA, 2012.
- [76] R. LeVeque. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*, by Randall J. LeVeque, Cambridge University Press, 2002.
- [77] K. Lipnikov, D. Svyatskiy, Yu. Vassilevski. Interpolation-free monotone finite volume method for diffusion equations on polygonal meshes, *Journal of Computational Physics* 228 (2009) 703-716.
- [78] K. Lipnikov, M. Shashkov and I. Yotov. Local flux mimetic finite difference methods *Numer. Math.* (2009) 112 :115-152.
- [79] K. Lipnikov. Mimetic finite difference method. *Finite Volumes for Complex Applications V* (R. Eymard and J.M. Hérard, eds.), John Wiley & Sons, 2008, pp. 801-814.
- [80] C. Mugler, M. Lamoureux. Calculs de transport de radionucléides avec le code Castem2000 appliqués à un scénario de sûreté du site Est, Rapport DM2S/SFME/MTMS/RT/02-003/A.
- [81] S. Mundal, D.A. Di Pietro and I. Aavatsmark. Compact-Stencil MPFA Method for Heterogeneous Highly Anisotropic Second-Order Elliptic Problems. *Finite Volumes for Complex Applications V* (R. Eymard and J.M. Hérard, eds.), John Wiley & Sons, 2008, pp. 905-918.
- [82] K.D. Nikitin, K.M. Terekhov, Y.V. Vassilevski. A monotone nonlinear finite volume method for diffusion equations and multiphase flows, *Computational Geosciences* : Vol. 18, No 3 (2014), pp 311-324, DOI:10.1007/s10596-013-9387-6.
- [83] J.M. Nordbotten, I. Aavatsmark, G.T. Eigestad. Monotonicity of control volume methods, *Numerische Mathematik*, 106 :255-288, 2007.
- [84] G. Pepin. Projet HAVL. Cahier des charges relatif à la réalisation de calculs de transport de radionucléides avec le code Castem, Rapport ANDRA-CCC ACSS 01-004, 2001.
- [85] P.A. Raviart, J.M. Thomas. A Mixed Hybrid Finite Element Method for the Second Order Elliptic Problems, in *Mathematical Aspects of the Finite Element Method*, Lect. Notes in Math., Springer-Verlag, New York, 1977.
- [86] I. Touni, A. Bergeron, D. Gallo, D. Caruge. FLICA-4 : A three-dimensional two-phase flow computer code with advanced numerical methods for nuclear applications, *Nuclear Engineering and Design* 200(1) :139-155, 2000.



- [87] S. Vandenberghe, G. Bernard-Michel. Validation du module de transport de Cast3m. Calcul de sûreté ANDRA 2001 : Site de l'Est. Rapport SFME/MTMS/RT/04/006/A.
- [88] D. Vidović, M. Dimkić, M. Pušić. Accelerated non-linear finite volume method for diffusion, J. Comput. Physics, volume 230, Issue 7, April 2011, p. 2722-2735.
- [89] M. Vohralik. Méthodes numériques pour des équations elliptiques et paraboliques non linéaires. Thèse de l'université Paris-Sud, 2004.
- [90] Z. Sheng, G. Yuan. The finite volume scheme preserving extremum principle for diffusion equations on polygonal meshes, J. Comput. Physics 230, 2011, *n*<sup>o</sup> 7, 2588–2604.
- [91] G. Yuan, Z. Sheng. Monotone finite volume schemes for diffusion equations on polygonal meshes, J. Comput. Physics 227, 2008, pp. 6288–6312.

# Annexe A

## Notations sur le maillage

On considère un maillage de  $\Omega$  (ouvert de  $\mathcal{R}^N$ ) admissible au sens défini dans [P16] caractérisé par l'ensemble de ses mailles  $\mathcal{M}$ , de ses faces  $\mathcal{E}$  (arêtes en 2 dimensions) et de ses points  $\mathcal{P}$ , notés  $(x_K)_{K \in \mathcal{M}}$  et  $(x_\sigma)_{\sigma \in \mathcal{E}}$ . Nous définissons :

- $\mathcal{E}_{int}$  l'ensemble des faces intérieures,
- $\mathcal{E}_{ext}$  l'ensemble des faces appartenant à  $\partial\Omega$ ,
- $|K|$ , le volume de la maille  $K \in \mathcal{M}$ ,
- $|\sigma|$ , la surface d'une face  $\sigma \in \mathcal{E}$ ,
- $\mathcal{E}_K$ , l'ensemble des faces de  $K$ ,
- $\vec{n}_{K,\sigma}$ , les normales orientées vers l'extérieur de  $K$  pour  $\sigma \in \mathcal{E}_K$ ,
- $h_K$ , le diamètre de chaque maille  $K$ ,
- $h_{\mathcal{M}} = \max_{K \in \mathcal{M}} h_K$ ,
- $N(K)$ , l'ensemble des mailles voisines de la maille  $K$  et des faces  $\sigma$  de  $K$  appartenant à  $\mathcal{E}_{ext}$ ,
- $\forall \sigma \in \mathcal{E}_{int}$ ,  $K$  et  $L$  sont les mailles de part et d'autre de cette face  $\sigma$ ,
- $\forall K \in \mathcal{M}$ ,  $u_K$  la valeur de  $u$  dans la maille  $K$ ,
- $V(K)$ , le stencil du schéma pour le calcul de  $u_K$ ,
- $VM(K^*)$ , l'ensemble des mailles autour du nœud  $K^*$ ,
- $VN(K)$ , l'ensemble des nœuds de la maille  $K$ ,
- $\forall \sigma \in \mathcal{E}$ ,  $u_\sigma$  la valeur de  $u$  sur la face  $\sigma$ ,
- $f_K = \frac{\int_K f dx}{|K|}$ , la valeur moyenne de  $f$  sur la maille  $K$ ,
- $\overline{\overline{D}}_K = \frac{\int_K \overline{\overline{D}} dx}{|K|}$ , la valeur moyenne du tenseur  $\overline{\overline{D}}$  sur la maille  $K$ ,
- $reg\mathcal{M}$ , la régularité du maillage  $\mathcal{M}$  définie dans [P21].

## Annexe B

# Notations pour les résultats numériques

Nous notons :

- $h$  : la longueur de l'arête la plus grande sur la frontière du domaine étudié,
- Erreur  $L^2$  : erreur  $L^2$  de  $u$  par rapport à la solution analytique,
- Erreur  $L^2$  (grad) : erreur  $L^2$  du gradient de  $u$  par rapport au gradient de la solution analytique,
- Val négatives : pourcentage de valeurs négatives,
- $u_{min} = \min_{K \in \mathcal{M}} u_K$ ,
- $u_{max} = \max_{K \in \mathcal{M}} u_K$ ,
- Ordre : ordre de convergence de la méthode pour la norme  $L^2$ ,
- nit : le nombre d'itérations effectuées dans l'algorithme du point fixe pour atteindre la convergence.

## Annexe C

# Tableau des méthodes proposées

Voici un tableau qui résume les méthodes présentées dans ce document.

	co	cs	cci ou stab	PML	$\geq 0$	O	TH	type de mailles	références
VFSYM	oui	oui	oui	non	non	2	oui	t et p	[P8, P9]
VFSYM2	oui	oui	oui	non	non	2	non <sub>1</sub>	q g	[P12]
VFSYM3	oui	oui	oui	non	non	2	oui	té et pa	[73]
DFPMD	non	o s c	oui	oui	oui	1 <sub>1</sub>	oui	m f g	[P13]
FECC	oui	oui	o s c 2	non	non	2	oui	m f p g	[P20]
VFPMD	oui	oui	o s c 3	oui	oui	2	oui	m f g	[P14, P16, P17]
VFMON	oui	oui	o s c 3	non	oui	2	non <sub>2</sub>	m f g	[P10]
VFSYM <sub>cor1</sub>	oui	o s c 4	oui	oui	oui	1	oui	t et p	[P15, P21]
VFSYM <sub>cor1,b</sub>	oui	o s c 4	oui	oui	oui	1	oui	t et p	[P21, P22]
VFSYM <sub>cor1,p</sub>	oui	o s c 4	oui	non	oui <sub>1</sub>	2	oui	t et p	[P15]
VFSYM <sub>cor2</sub>	oui	o s c 4	oui	oui	oui	2	oui	t et p	[P23]
VFSYM <sub>cor1,<math>\epsilon</math></sub>	oui	o s c 5	oui	oui	oui	1	oui	t et p	ce document
VFSYM <sup>+</sup> <sub>cor1,<math>\nu</math></sub>	oui	o s c 6	oui	oui	oui	1	oui	t et p	ce document

- co : conservatif.
- cs : consistant.
- cci ou stb : coercif ou stable.
- PML : voir (4.15).
- $\geq 0$  : positivité.
- O : Ordre sur les tests numériques.
- TH : existence d'une preuve théorique de convergence.
- t et p : triangles et parallélogrammes. Convergence sur des quadrangles avec une hypothèse sur la manière de raffiner.
- non<sub>1</sub> : la preuve n'existe pas mais sera très proche de celle écrite pour VFSYM [4, 8, 78].
- q g : quadrangles généraux.
- té et pa : tétraèdres et parallélépipèdes. Convergence sur des hexaèdres avec une hypothèse sur la manière de raffiner.
- o s c : oui sous condition (second membre et tenseur régulier).
- 1<sub>1</sub> : 1 en général, et 2 dans certains tests numériques.
- m f g : maillage de forme générale.

- o s c 2 : oui sous condition (dans le cas de tenseurs discontinus).
- m f p g : maillage de forme presque générale.
- o s c 3 : oui sous condition comme pour la plupart des schémas "diamant".
- non<sub>2</sub> : la preuve décrite dans [P16] devrait s'appliquer sur les variantes continues de VFMON.
- oui<sub>1</sub> : oui pour les équations paraboliques.
- o s c 4 : oui sous condition. Hypothèse de consistance sur la correction non linéaire.
- o s c 5 : oui sous condition. Hypothèse de consistance sur la correction non linéaire peu contraignante et facile à vérifier.
- o s c 6 : oui sous condition. Hypothèse de consistance sur la correction non linéaire si  $\nu = 1$ . Consistant si  $\nu < 1$  et  $\nu$  indépendant de  $h_{\mathcal{M}}$ .