Quantification a posteriori de la diffusion numérique

Nina Aguillon, Emmanuel Audusse, Vivien Desveaux
LSLL SU LAGA Paris 13 LAMFA U Picardie

suite à des discussions avec

Julie Deshayes
Guerwan Madec
Sibylle Téchiné

LOCEAN, SU

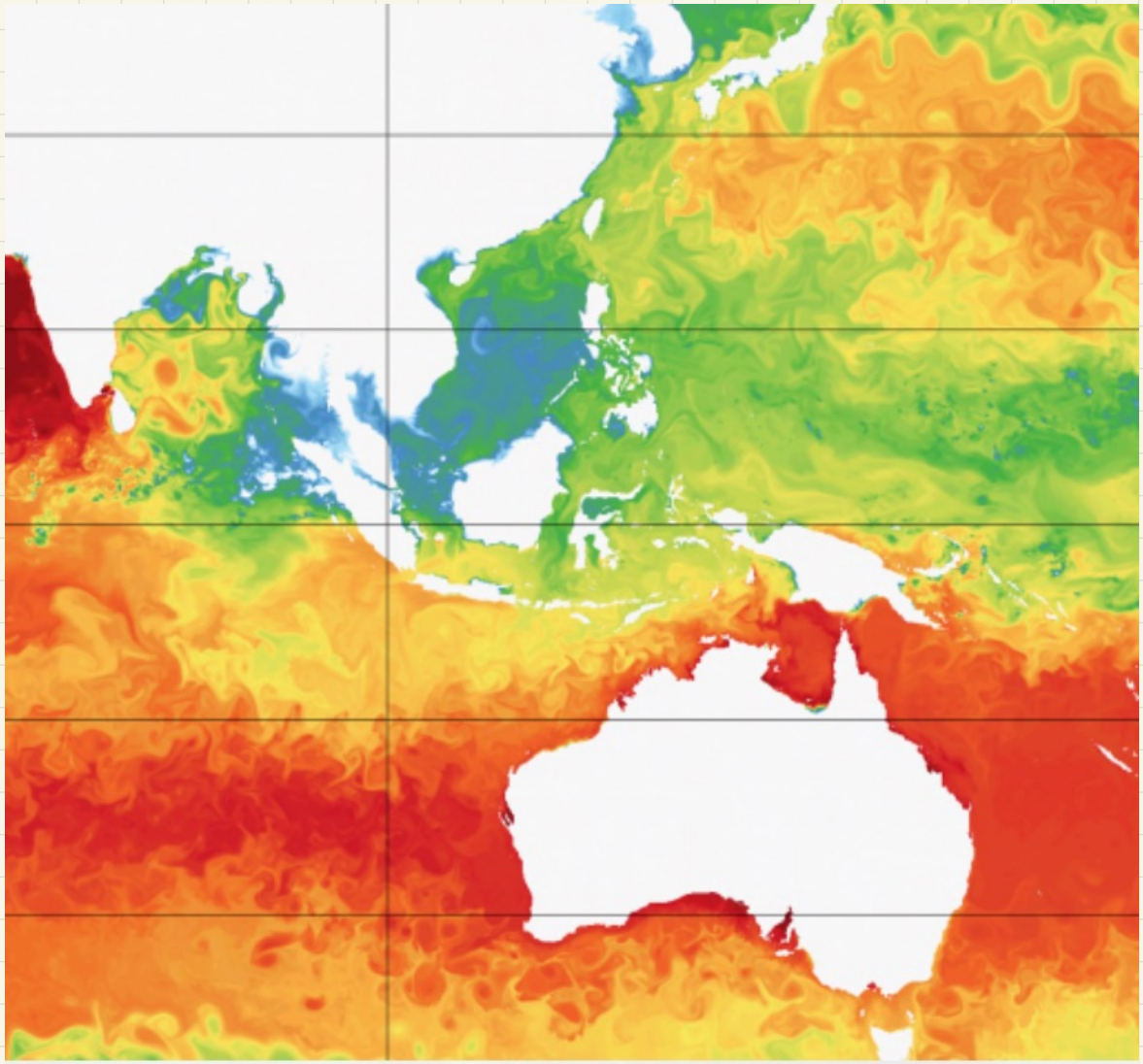
- Brève présentation de NEMO et de la motivation de ce travail

- Obtention de "cartes de diffusion numérique" par une procédure de minimisation a posteriori

- Votre schéma est-il entropique ?

- Perspectives

Nucleus for European Modelling of the Ocean



Pour les applications climatiques :

centaines de simulations planétaires

sur des siècles

$\Delta x \approx$ 100 km (au mieux 10 km)

Code complexe :

- paramétrisations sous maille
- nombreux splitting
- ordre élevé

Importance de la diffusion numérique

« A persistent characteristics of oceanic water masses at all scales is that they are advected over long distances without much transformation »

(Burchard Rennau 12)

« turbulent mixing has been observed to be very weak in much of the ocean »

(Ilicak 12)

- L'océan stocke très bien la chaleur
- La circulation océanique la répartit de l'équateur vers les pôles

. Réaction au changement climatique ?

$$\partial_t E_{tot} + \partial_x F^E = D_{phys} - D_{num}(\Delta x)$$

a un signe perturbe le bilan

petite, mais cruciale en temps long

Cadre mathématique : EDP hyperbolique et schéma volumes finis

système hyperbolique

$$\partial_t U + \partial_x f(U) = 0$$

$U \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$, $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$

schéma de volumes finis

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} + \frac{f_{j+\frac{1}{2}}^n - f_{j-\frac{1}{2}}^n}{\Delta x} = 0$$

$$f_{j+\frac{1}{2}}^n = \mathcal{F}\left(U_{j-s_L+1}, \dots, U_j, U_{j+1}, \dots, U_{j+s_R}\right)$$

$$U_j^n \approx \frac{1}{\Delta x} \int_{C_j} U(t^n, x)\, dx$$

$$f_{j+\frac{1}{2}}^n \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f\left(U(s, x_{j+\frac{1}{2}})\right) ds$$

consistance

$$\mathcal{F}(U, U, \dots, U) = f(U)$$

« le schéma est exact (localement) sur les constantes

Cadre mathématique : inégalités d'entropie discrète

Inégalité d'entropie continue

$$\partial_t U + \partial_x f(U) = 0 \quad \oplus \quad \partial_t \eta(U) + \partial_x G(U) \leq 0$$

avec $\eta : \Omega \to \mathbb{R}$ convexe, $G : \Omega \to \mathbb{R}$, $D\eta \, Df = DG$

égalité si U est $\mathcal{C}^1$. Critère de sélection des chocs.

Inégalité d'entropie discrète

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} + \frac{f_{j+\frac{1}{2}}^n - f_{j-\frac{1}{2}}^n}{\Delta x} = 0 \quad \overset{???}{\oplus} \quad \frac{\eta(U_j^{n+1}) - \eta(U_j^n)}{\Delta t} + \frac{G_{j+\frac{1}{2}}^n - G_{j-\frac{1}{2}}^n}{\Delta x} = D_j^n \leq 0$$

C'est IMPORTANT et DIFFICILE

convergence vers une solution physique

stabilité

ordre 1 essentiellement

pire avec un terme source

Trouver $G_{j+\frac{1}{2}}$ et D_j^n via une minimisation

déterminés par le schéma numérique

ce qu'on cherche (le choix des $G_{j+\frac{1}{2}}$ impose D_j^n)

$$\frac{\eta(U_j^{n+1}) - \eta(U_j^n)}{\Delta t} + \frac{G_{j+\frac{1}{2}} - G_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta x} = D_j^n$$

On aimerait de plus : $D_j^n \leq 0$

- Des flux numériques d'entropie consistants

$$G_{j+\frac{1}{2}} = \mathcal{G}(U_{j-s_L+1}, \dots, U_j, U_{j+1}, \dots, U_{j+s_R}) \quad \text{avec} \quad \mathcal{G}(U, U, \dots, U) = G(U)$$

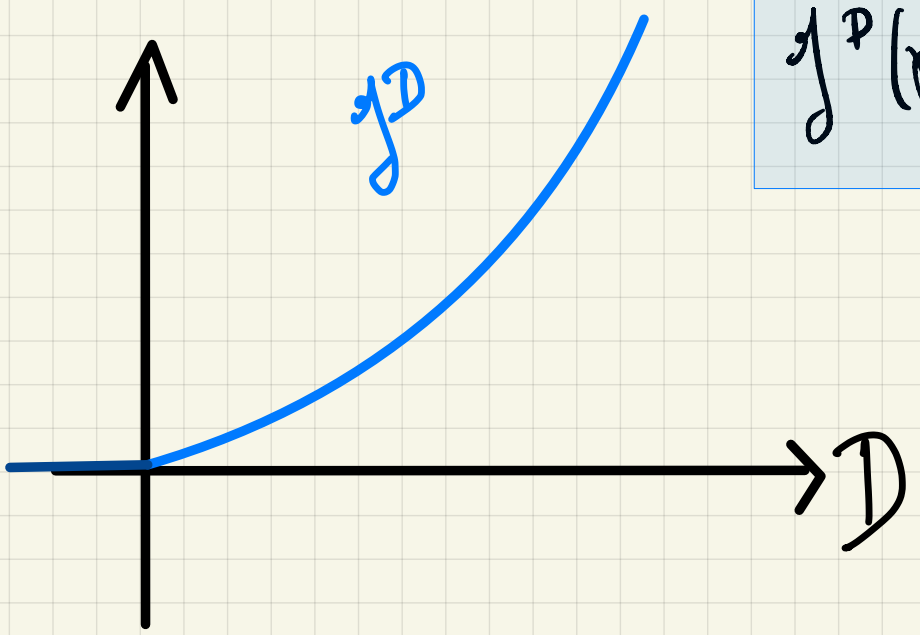
$$\left(G_{j+\frac{1}{2}}\right)_j = \underset{(G_{j+\frac{1}{2}})_j}{\operatorname{argmin}} \underbrace{J^D(G)}_{\text{diffusion}} + \underbrace{J^C(G)}_{\text{consistance}}$$

Choix de la fractionnelle, partie diffusive

$$\frac{\eta(U_j^{n+1}) - \eta(U_j^n)}{\Delta t} + \frac{\sigma_{j+\frac{1}{2}} - \sigma_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta x} = D_j^n \quad \text{avec}$$

D_j^n négatif

$\sigma_{j+\frac{1}{2}}$ constant



$$\gamma^D(\sigma) = \sum_j \max\left(0, \frac{\eta(U_j^{n+1}) - \eta(U_j^n)}{\Delta t} + \frac{\sigma_{j+\frac{1}{2}} - \sigma_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta x}\right)^2$$

$\gamma^D(\sigma) = 0 \iff$

le choix $\sigma_{j+\frac{1}{2}} = \sigma_{j+\frac{1}{2}}$ donne des diffusions numériques négatives

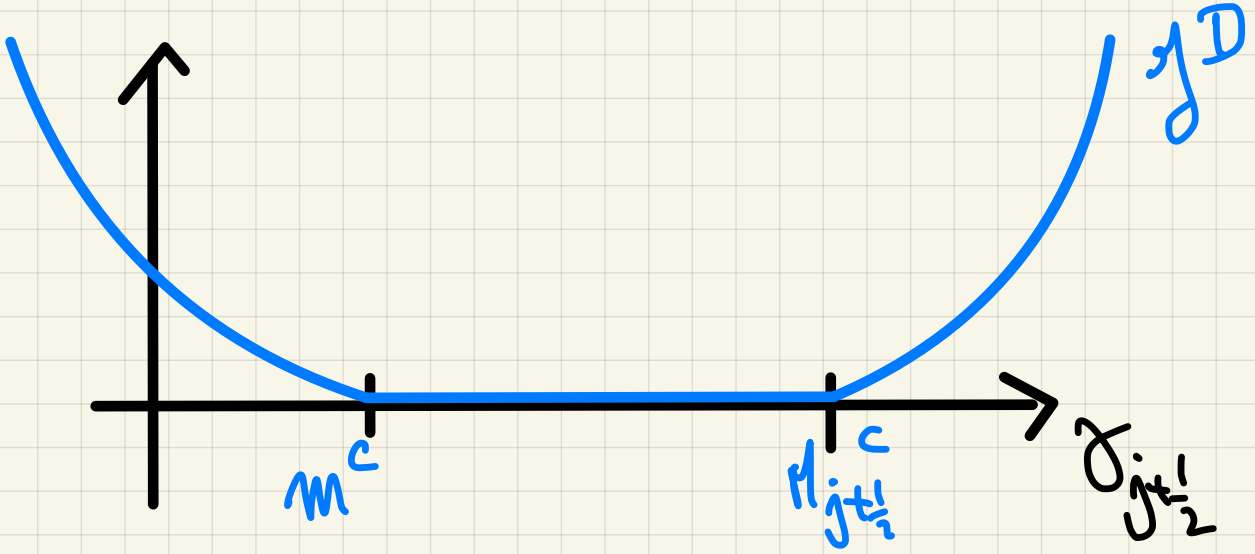
Choix de la fonctionnelle, partie consistance

$$\frac{\eta(U_j^{n+1}) - \eta(U_j^n)}{\Delta t} + \frac{G_{j+\frac12} - G_{j-\frac12}}{\Delta x} = D_j^n$$ avec D_j^n négatif

$G_{j+\frac12}$ consistant

rappel consistance : $G_{j+\frac12} = \mathcal{G}(U_{j-s_L+1}, \dots, U_{j+s_R}) \xrightarrow{(U_{j-s_L+1}, \dots, U_{j+s_R}) \to (U, \dots, U)} G(U)$

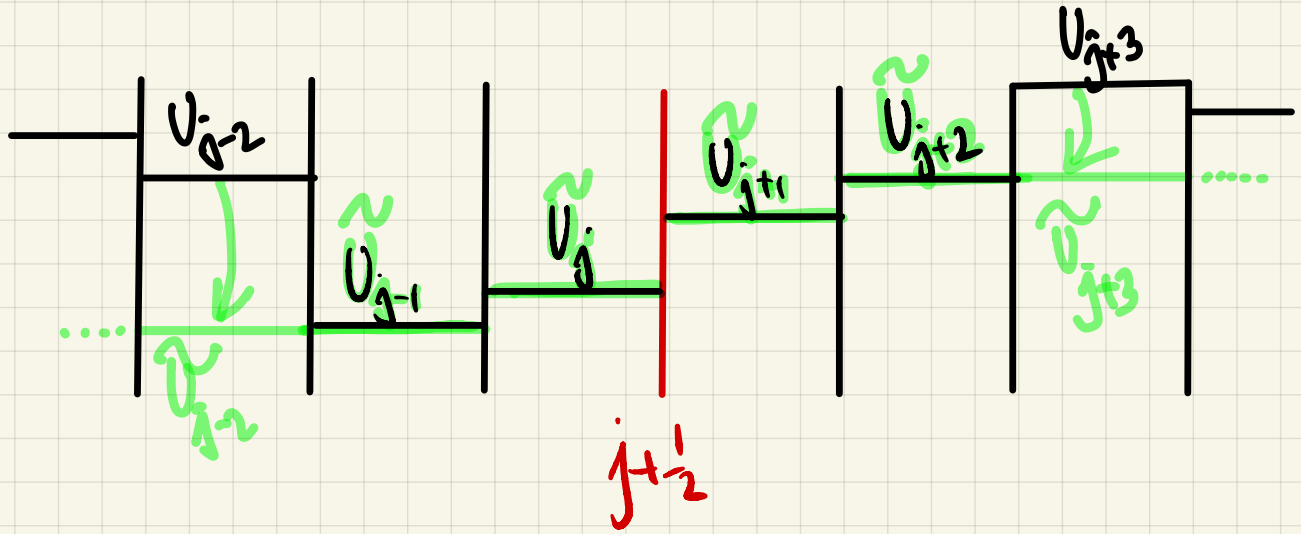
$$J^c(\gamma) = \sum_j \max(0, \gamma_{j+\frac12} - M^c_{j+\frac12})^2 + \max(0, m^c_{j+\frac12} - \gamma_{j+\frac12})^2$$



- $J^c(\gamma) = 0 \iff$ $m^c_{j+\frac12} \le \gamma_{j+\frac12} \le M^c_{j+\frac12}$
- On demande $m^c_{j+\frac12}(U, \dots, U) = M^c_{j+\frac12}(U, \dots, U) = G(U)$

Choix des bornes a priori de consistance $M^c_{j+\frac{1}{2}}$ et $m^c_{j+\frac{1}{2}}$

L'idée : bilan d'énergie sur une donnée initiale modifiée ($s_L = s_R = 2$)

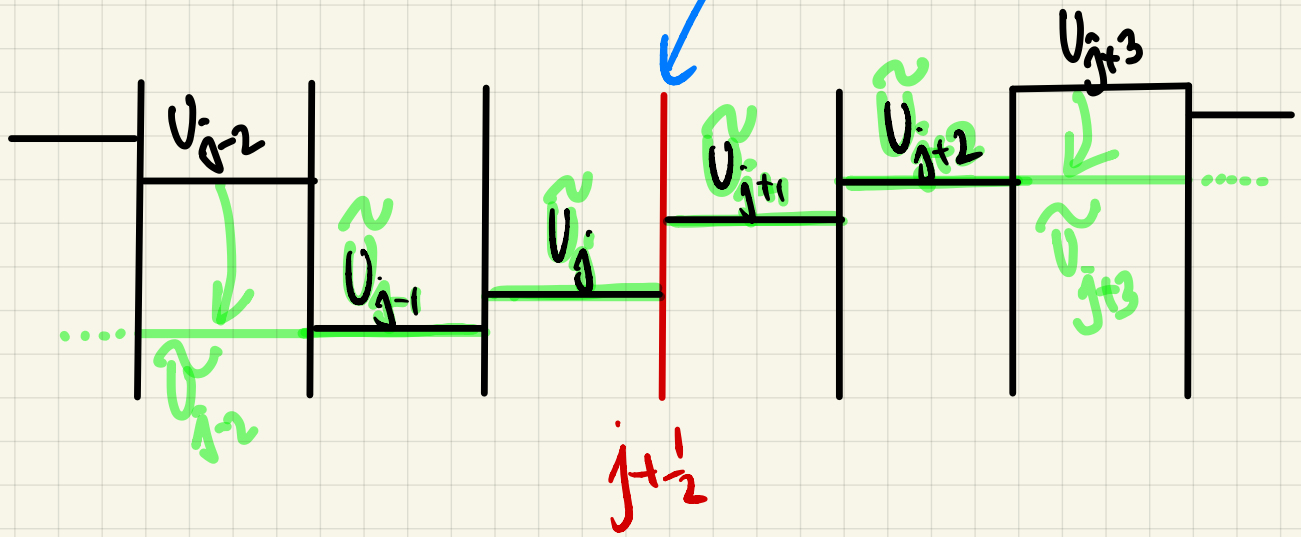


$$\tilde{U}_{j+k} = \begin{cases} U_{j+k} & \text{si} \quad j - s_L + 1 \le k \le j + s_R \\ U_{j-s_L+1} & \text{si} \quad k \le j - s_L + 1 \\ U_{j+s_R} & \text{si} \quad k \ge j + s_R \end{cases}$$

Choix des bornes a priori de consistance $M^c_{j+\frac{1}{2}}$ et $m^c_{j+\frac{1}{2}}$

L'idée : bilan d'énergie sur une donnée initiale modifiée ($s_L = s_R = 2$)

① $F_{j+\frac{1}{2}} = \tilde{F}_{j+\frac{1}{2}}$ $\quad G_{j+\frac{1}{2}} = \tilde{G}_{j+\frac{1}{2}}$

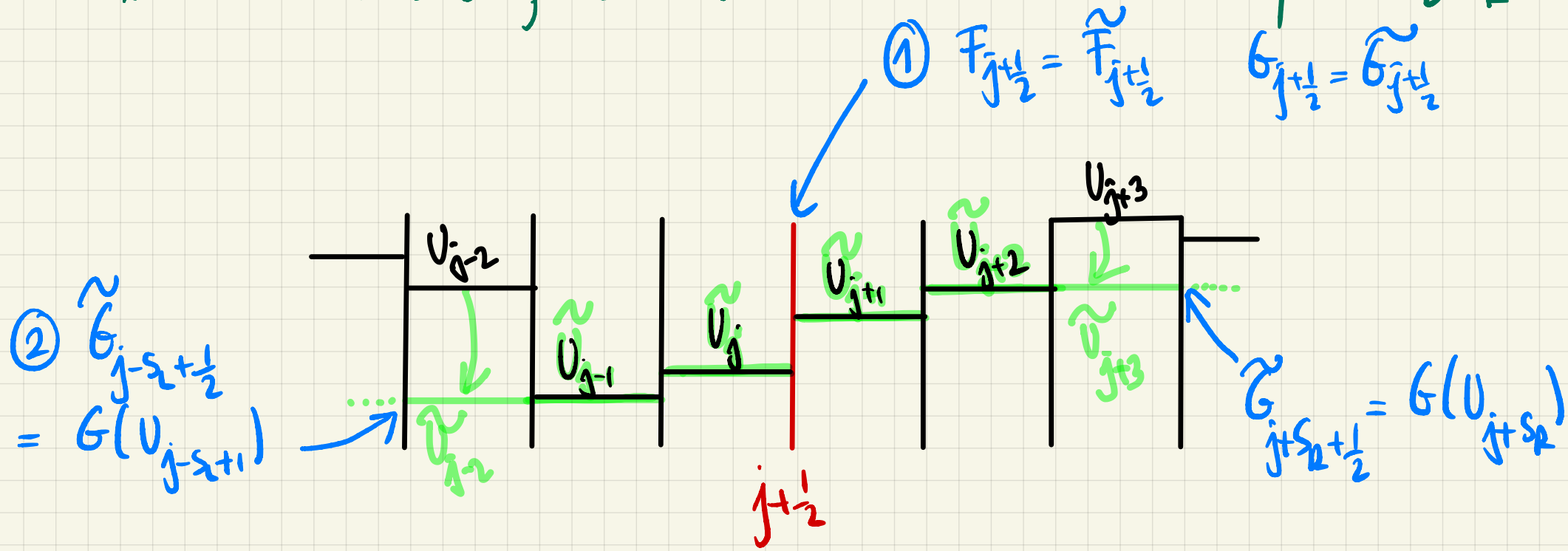


① $F_{j+\frac{1}{2}}$, $G_{j+\frac{1}{2}}$ sont independants de U_{j-2}, U_{j+3}

$$\tilde{U}_{j+k} = \begin{cases} U_{j+k} & \text{si} \quad j - s_L + 1 \le k \le j + s_R \\ U_{j-s_L+1} & \text{si} \quad k \le j - s_L + 1 \\ U_{j+s_R} & \text{si} \quad k \ge j + s_R \end{cases}$$

Choix des bornes a priori de consistance $M^c_{j+\frac{1}{2}}$ et $m^c_{j+\frac{1}{2}}$

L'idée : bilan d'énergie sur une donnée initiale modifiée ($s_L = s_R = 2$)



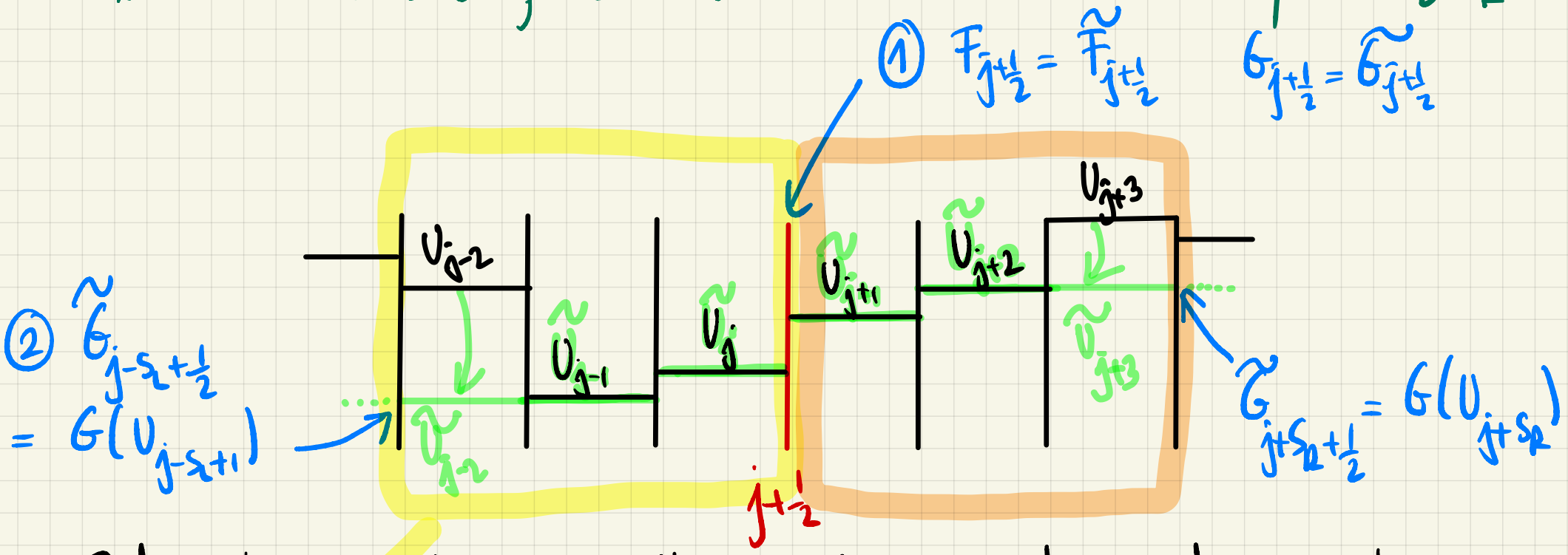
$$\tilde{U}_{j+k} = \begin{cases} U_{j+k} & \text{si} \quad j - s_L + 1 \le k \le j + s_R \\ U_{j-s_L+1} & \text{si} \quad k \le j - s_L + 1 \\ U_{j+s_R} & \text{si} \quad k \ge j + s_R \end{cases}$$

① $F_{j+\frac{1}{2}}$, $G_{j+\frac{1}{2}}$ sont independants de U_{j-2}, U_{j+3}

② Flux sur la donnée modifiée connus au bord

Choix des bornes a priori de consistance $M^c_{j+\frac12}$ et $m^c_{j+\frac12}$

L'idée : bilan d'énergie sur une donnée initiale modifiée ($s_L = s_R = 2$)



Bilan d'énergie de part et d'autre de $j+\frac12$, hyp: schéma entropique

$$\sum_{k=2s_L-2}^{0} \eta(\tilde U_{j+k}^{n+1}) \le \sum_{k=2s_L-2}^{0} \eta(U_{j+k}^{n}) - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(G_{j+\frac12} - G(U^n_{j-s_L+1})\right)$$

$$\sum_{k=1}^{2s_R+1} \eta(\tilde U_{j+k}^{n+1}) \le \sum_{k=1}^{2s_R+1} \eta(U_{j+k}^{n}) - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(G(U^n_{j+s_R}) - G_{j+\frac12}\right)$$

$\rightsquigarrow$ $\boxed{m^c_{j+\frac12} \le G_{j+\frac12} \le M^c_{j+\frac12}}$

Résultats théoriques

prop 1 : Si le schéma est entropique ($\eta(U_j^{n+1}) \leq \eta(U_j^n) - \frac{\Delta t}{\Delta x}(G_{j+\frac{1}{2}} - G_{j-\frac{1}{2}})$) alors $g((G_{j+\frac{1}{2}})_j) = 0$

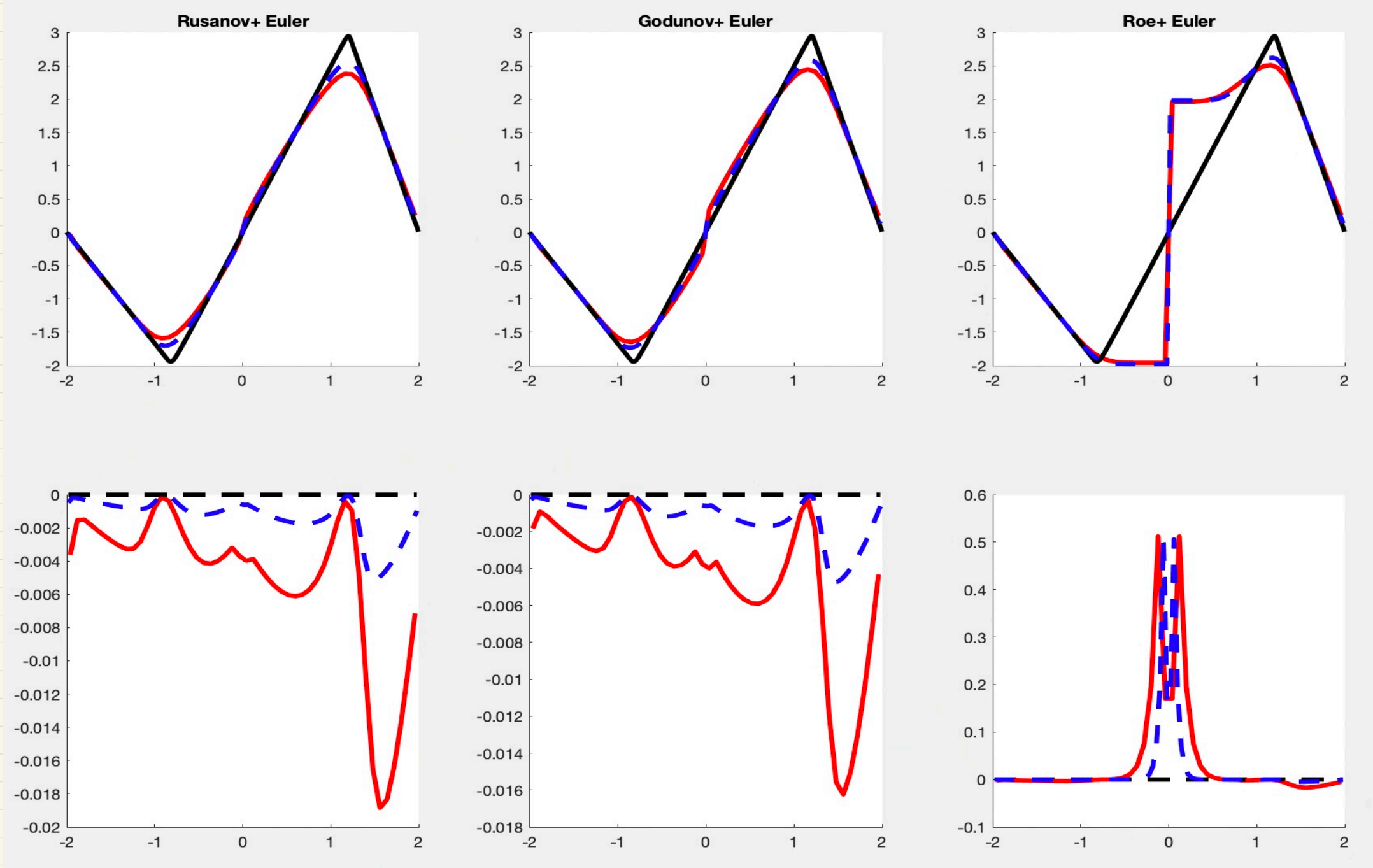
prop 2 : Si $g((G_{j+\frac{1}{2}}^{opt})_j) = 0$, alors $\eta(U_j^{n+1}) \leq \eta(U_j^n) - \frac{\Delta t}{\Delta x}(G_{j+\frac{1}{2}}^{opt} - G_{j-\frac{1}{2}}^{opt})$ et $(G_{j+\frac{1}{2}}^{opt})$ est consistant.

prop 3 : Si $g((G_{j+\frac{1}{2}})_j) = g((\bar{G}_{j+\frac{1}{2}})_j) = 0$, alors

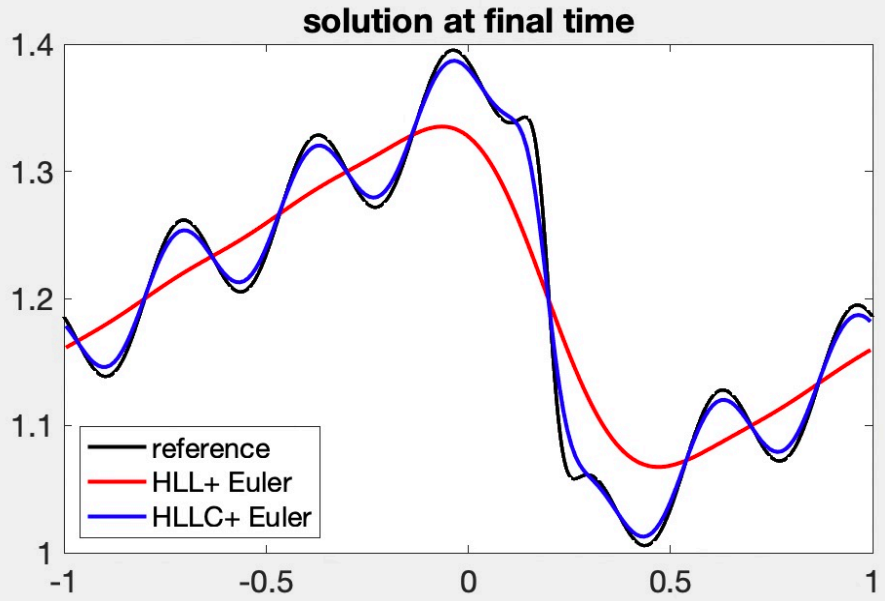
$$|G_{j+\frac{1}{2}} - \bar{G}_{j+\frac{1}{2}}| = \sum_{k=-s_L+1}^{s_R} O(|U_{j+k}^n - U_j^n|^2) = O(\Delta x^2)$$

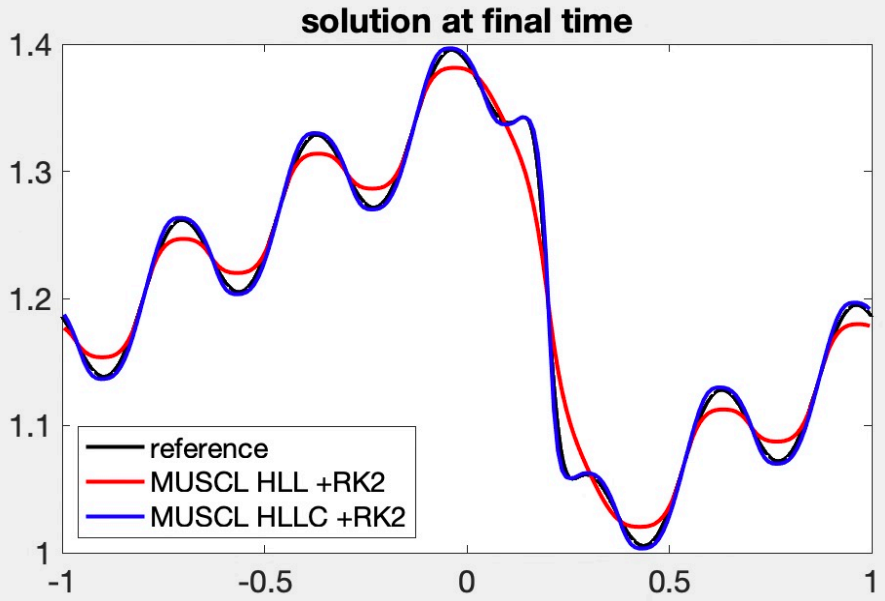
prop 4 : L'encadrement $m_{j+\frac{1}{2}}^c \leq G_{j+\frac{1}{2}} \leq M_{j+\frac{1}{2}}^c$ suffit pour obtenir le théorème de Lax Wendroff.

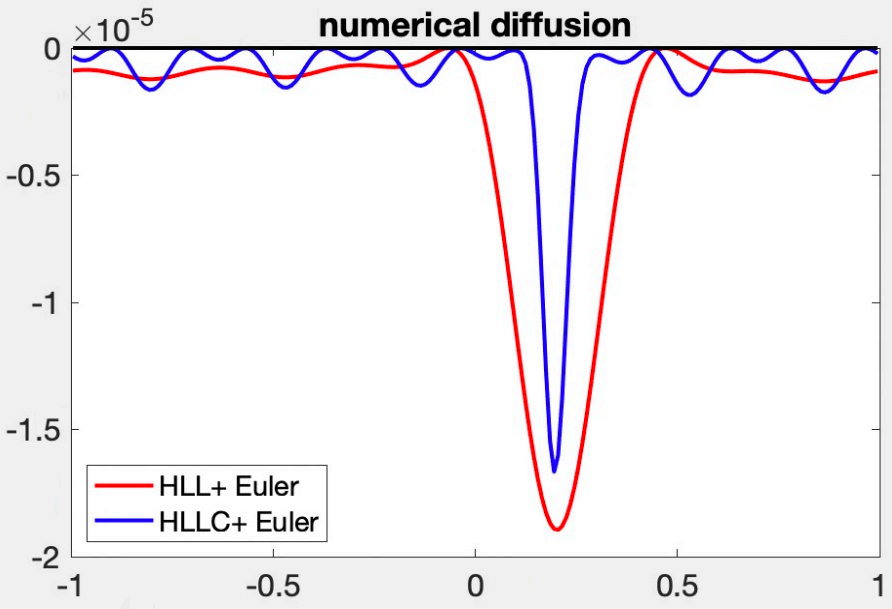
Résultats numériques: équation de Burgers, schémas d'ordre 1

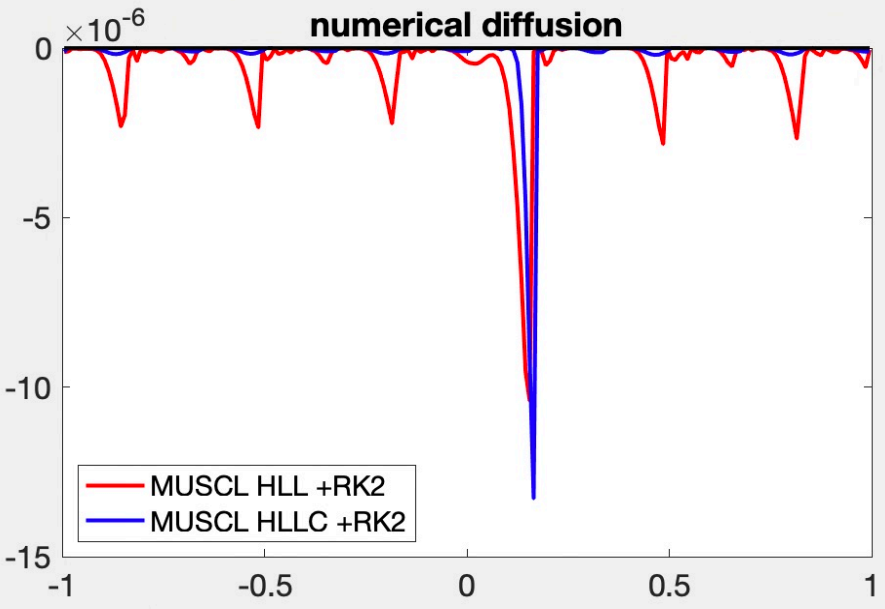


Dynamique des gaz, ordre 2, influence du schéma



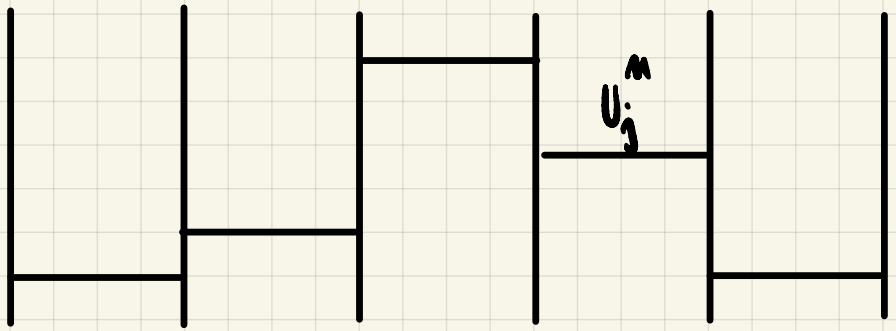




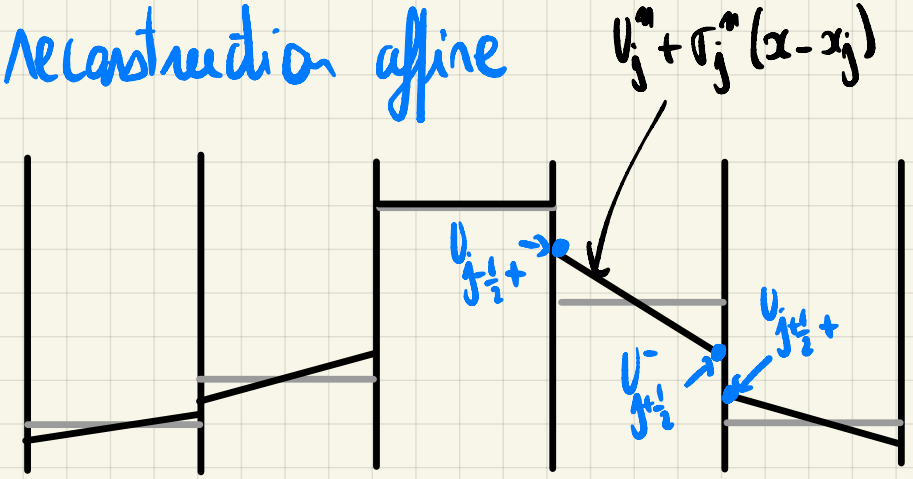


L'approche MUSCL pour l'ordre 2 en espace

début de l'itération



reconstruction affine



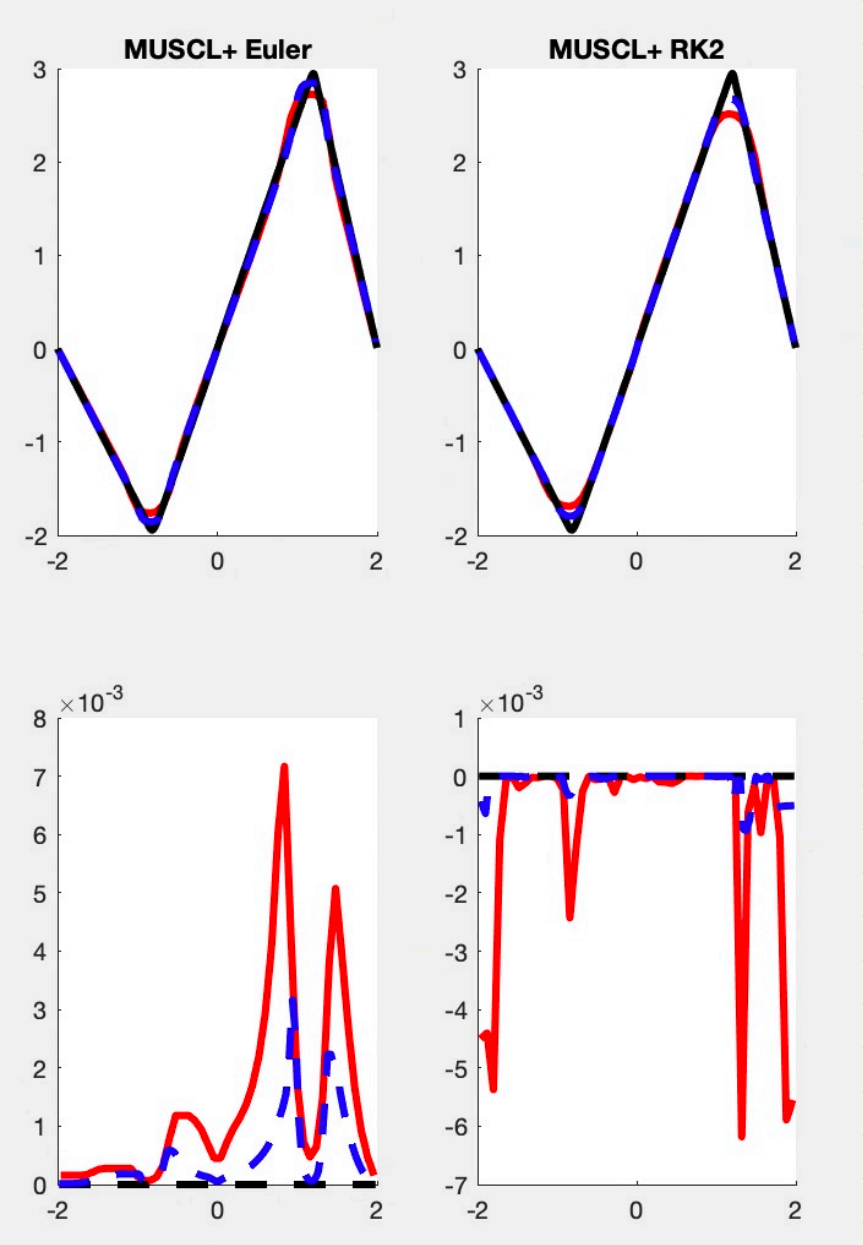
Deux objectifs : • atteindre l'ordre 2 sur les données régulières

• TVD, principe du max ⇝ théorie des limiteurs $\sigma_j^n = \phi\left(\frac{U_{j+1} - U_j}{U_j - U_{j-1}}\right)$

Flux MUSCL-Van Leer $F_{j+\frac{1}{2}} = F\left(U_{j+\frac{1}{2}-}^n, U_{j+\frac{1}{2}+}^n\right)$ ← flux d'ordre 1 entropique

En système : Quelles variables reconstruire ?
Quel limiteur ?

Discrétisation RK2 en temps. Influence sur l'entropie



La discrétisation espace diminue le bilan d'entropie en $O(\Delta x^p)$

La discrétisation en temps augmente le bilan d'entropie en $\alpha O(\Delta t^q)$

$p=q=1$: $\partial_t \eta(U) + \partial_x G(U) = O(\alpha\Delta t - \Delta x)$

≤ 0 sous CFL

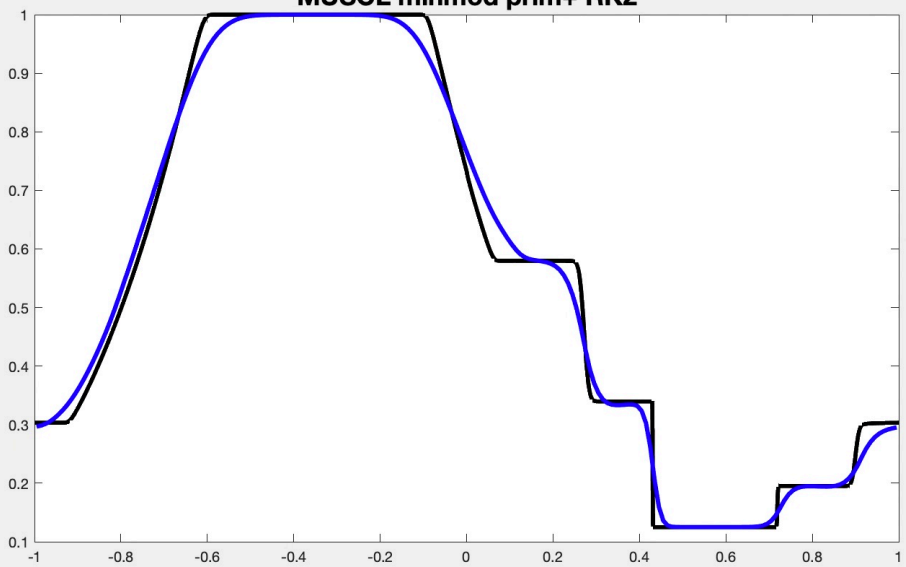
$p=2, q=1$: $= O(\alpha\Delta t - \Delta x^2)$

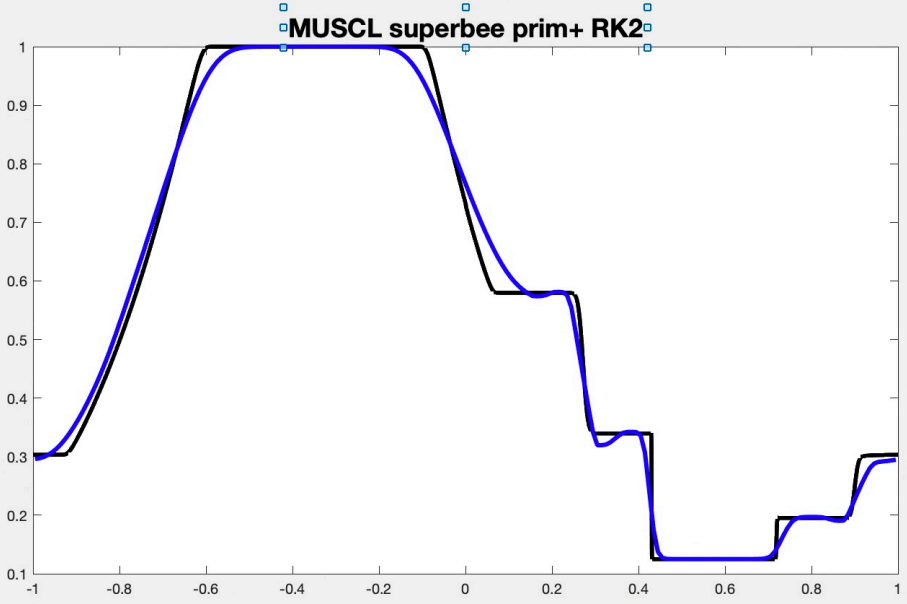
≥ 0 sous CFL hyperbolique $\Delta t \approx \Delta x$

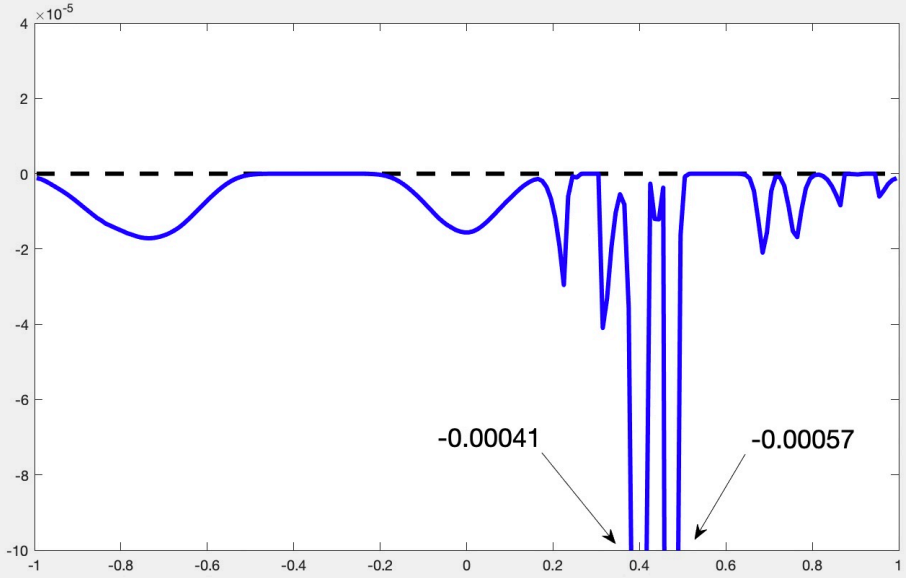
$p=q=2$: De l'espoir mais pas de preuve

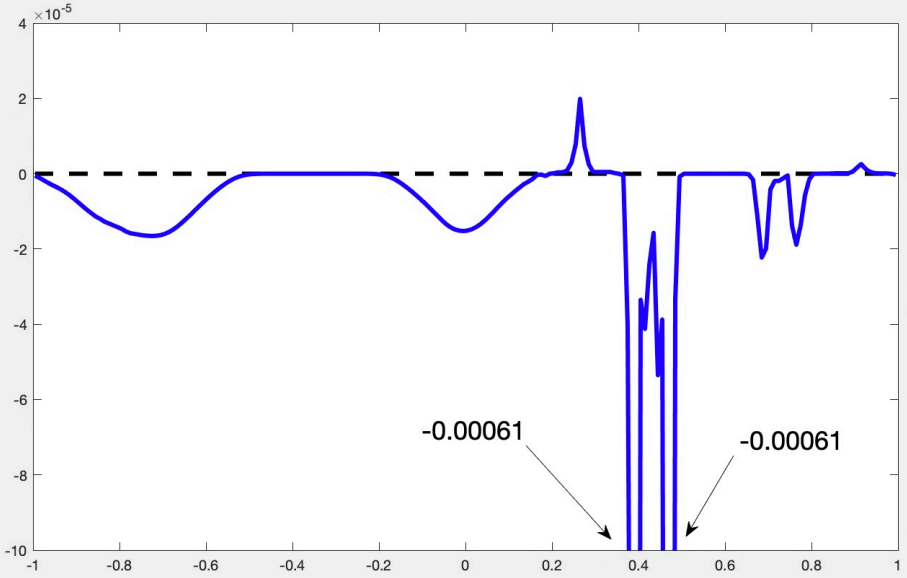
$$\eta(U_j^{n+1}) \leq \frac{\eta(U_{j-\frac{1}{2}}^{n}+) + \eta(U_{j+\frac{1}{2}}^{n}-)}{2} - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(G_{j+\frac{1}{2}} - G_{j-\frac{1}{2}}\right)$$

Dynamique des gazs, schéma d'ordre 2, influence des limiteur

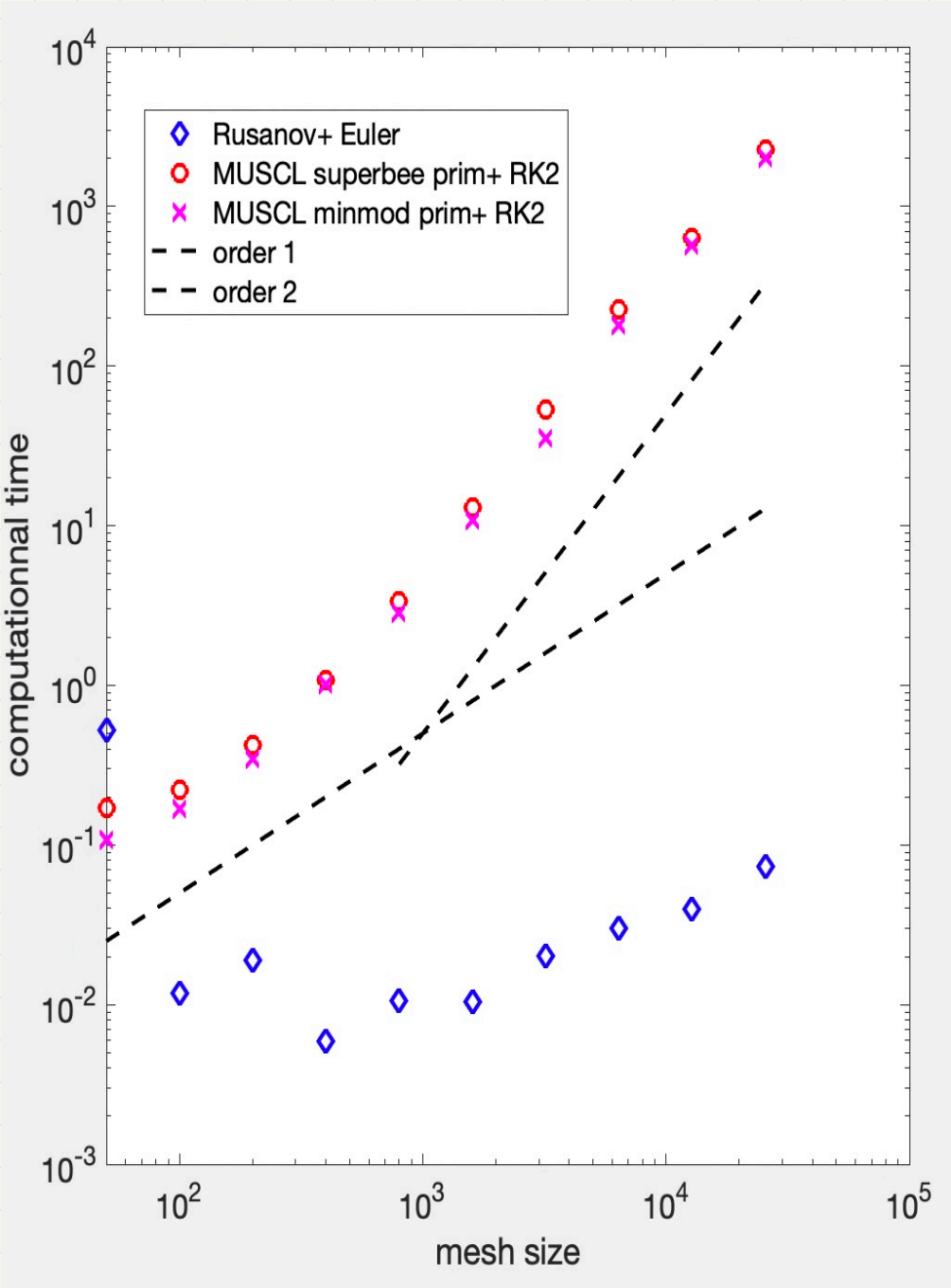








Temps de calcul et quantification a priori



$$\mathcal{D}_j^n = \eta\left(U_j^{n+1}\right) - \eta\left(U_j^n\right) + \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(\sigma_{j+\frac{1}{2}}^{opt} - \sigma_{j-\frac{1}{2}}^{opt}\right)$$

chers

$$\sigma_{j\pm\frac{1}{2}}^{opt} \in \left[m_{j\pm\frac{1}{2}}^{c},\ M_{j\pm\frac{1}{2}}^{c}\right]$$

abordables

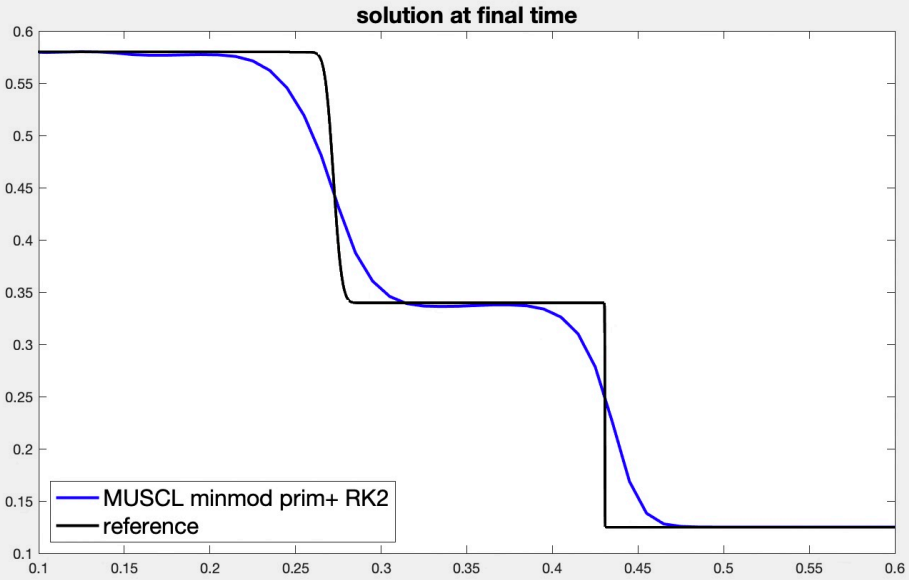
$$\underline{\mathcal{D}_j^n} \leq \mathcal{D}_j^n \leq \overline{\mathcal{D}_j^n}$$

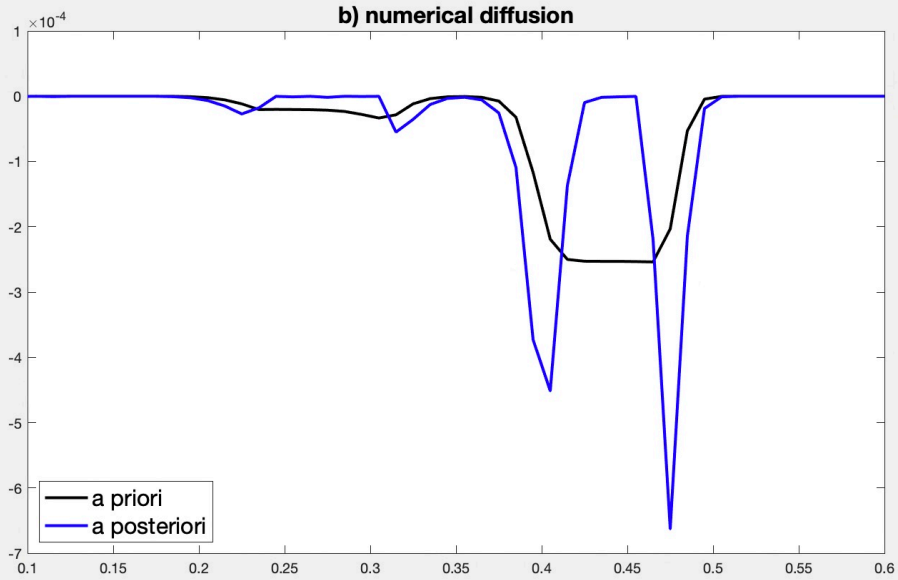
$$\underline{\mathcal{D}_j^n} = \eta\left(U_j^{n+1}\right) - \eta\left(U_j^n\right) + \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(m_{j+\frac{1}{2}}^{c} - M_{j-\frac{1}{2}}^{c}\right)$$

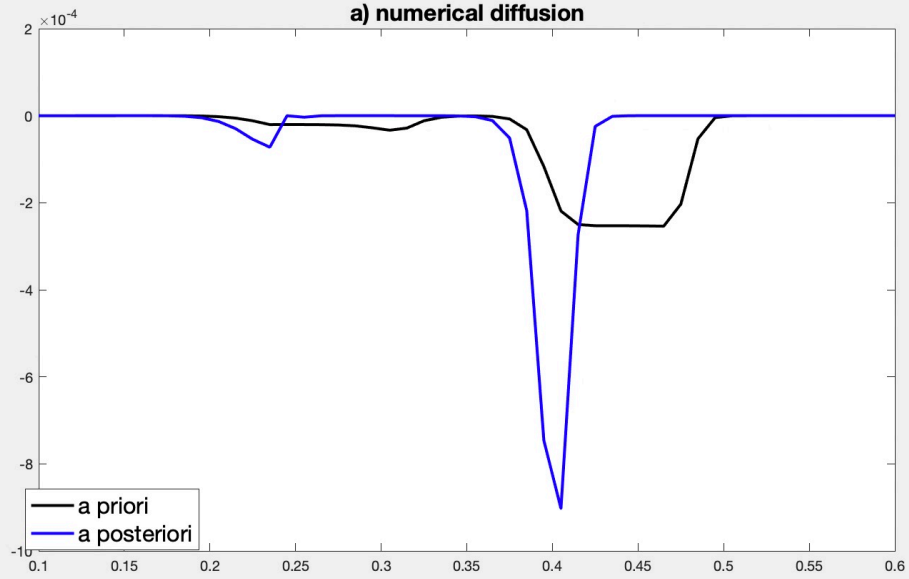
⊕ renormalisation naïve

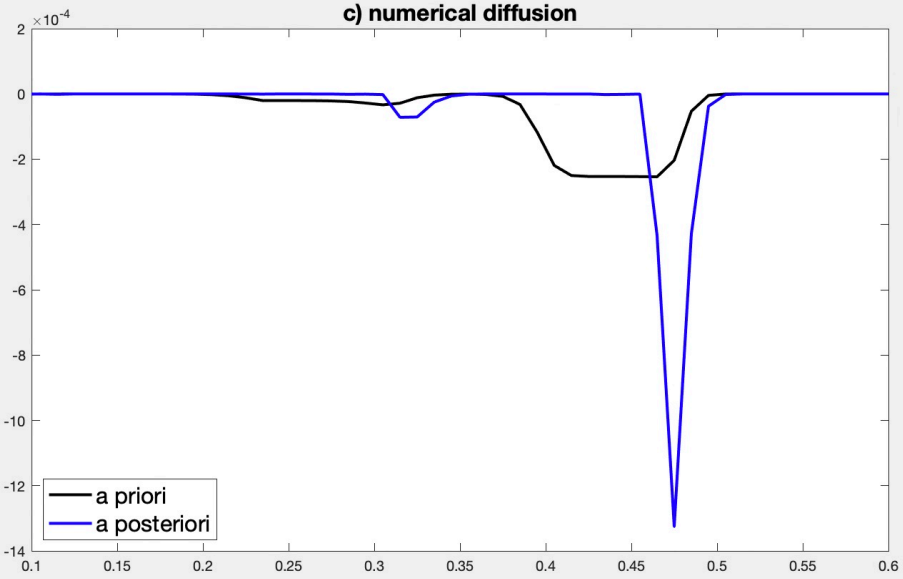
$$\alpha \sum_j \underline{\mathcal{D}_j^n} = \sum_j \mathcal{D}_j^n = \sum_j \eta\left(U_j^{n+1}\right) - \eta\left(U_j^n\right)$$

Comparison a priori / a posteriori









La minimisation qui vérifie si un schéma est entropique

def : Un schéma est entropique si pour tout $(U_j^n)_j$, on peut trouver des flux numériques d'entropie tels que

$$\eta(U_j^{n+1}) \leq \eta(U_j^n) - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(G_{j+\frac{1}{2}} - G_{j-\frac{1}{2}}\right) \quad \text{et} \quad G_{j\pm\frac{1}{2}} \in \left[m^c_{j\pm\frac{1}{2}}, M^c_{j\pm\frac{1}{2}}\right]$$

corollaire : Un schéma n'est pas entropique si il existe une donnée initiale $(U^0_{-s_L}, \dots, U^0_0, \dots, U^0_{s_R})$ (taille s_L+s_R+1) tq

A. $\eta(U_0^1) - \eta(U_0^1) + \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(m^c_{\frac{1}{2}} - M^c_{-\frac{1}{2}}\right) > 0$

ou

B. $m^c_{\frac{1}{2}} - M^c_{\frac{1}{2}} > 0$

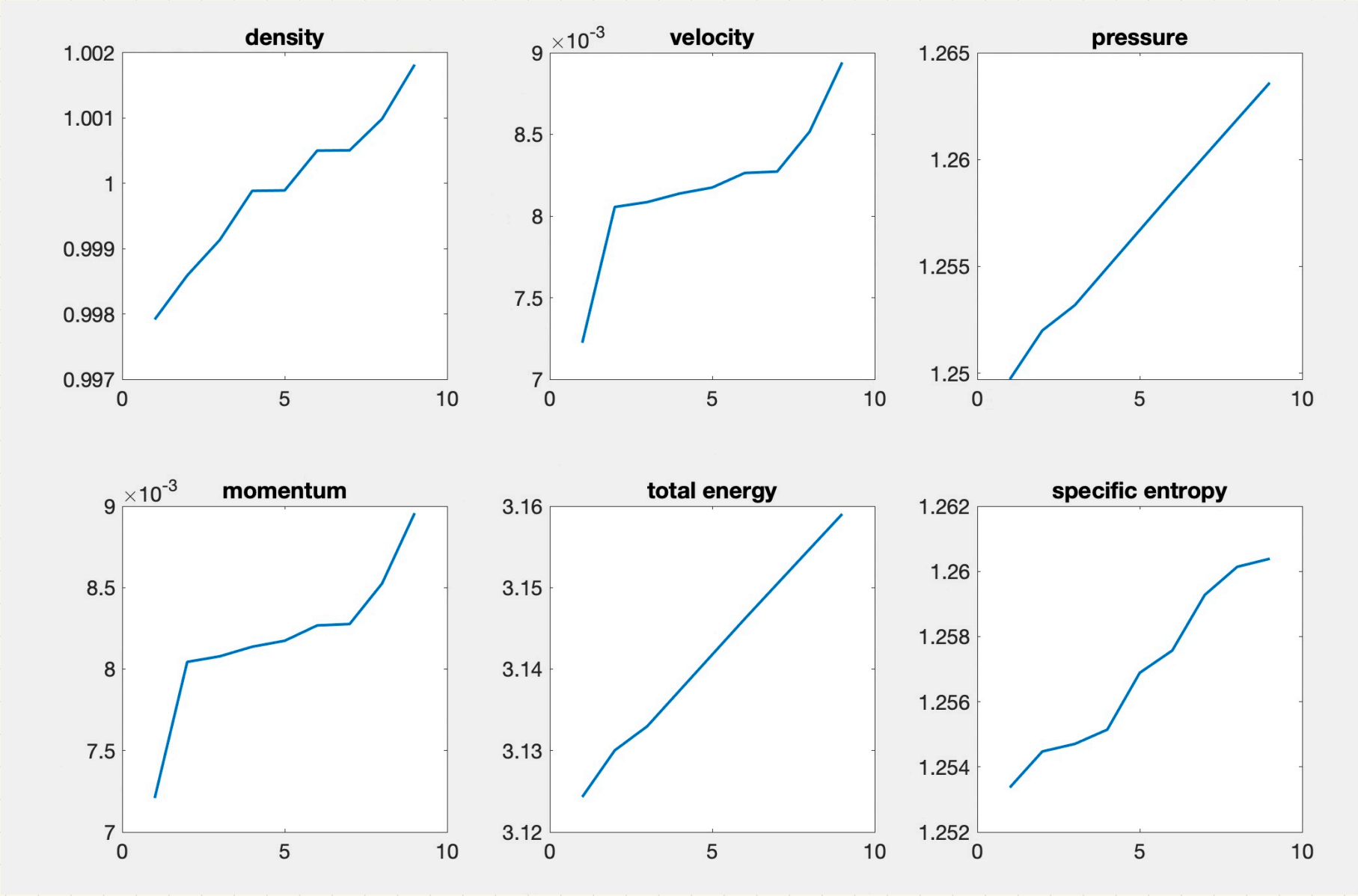
ou

C. $m^c_{-\frac{1}{2}} - M^c_{-\frac{1}{2}} > 0$

$$\min_{(U^0_{-s_L}, \dots, U^0_{s_R}) \in \Omega^{s_L+s_R+1}} (A, B, C) < 0$$

$\Leftrightarrow$ schéma non entropique

MUSCL minmod + RK2 non entropique



Perspective : tests de différents "entropy fix" pour le schéma de Roe.

Conclusion

- Construction d'une fonctionnelle pour quantifier la diffusion numérique.
- Obtention de bornes a priori pour les flux d'entropie numériques
- Les diffusions numériques "a posteriori" convergent pour les schémas d'ordre < 2
- Proposition d'une quantification "a priori" qui donne de bons résultats
- Deuxième minimisation pour construire la pire donnée initiale en terme d'entropie
- MUSCL + RK2 minmod non entropique

Pour aller vers l'océan ...

Modèle Saint Venant 2D → Complications essentiellement techniques sur maillage cartésien ?

$$
\begin{cases}
\partial_t h + \partial_x (hu) + \partial_y (hv) = 0 \\
\partial_t (hu) + \partial_x \left(hu^2 + \frac{g}{2} \frac{\rho}{\rho_0} h^2 \right) + \partial_y (huv) = -gh\partial_x z_b - \nu \partial_x (h \partial_x u) - fhv \\
\partial_t (hv) + \partial_x (huv) + \partial_y \left(hv^2 + \frac{g}{2} \frac{\rho}{\rho_0} h^2 \right) = -gh\partial_y z_b - \nu \partial_x (h \partial_x v) + fhu \\
\partial_t (h\rho) + \partial_x (hu\rho) + \partial_y (hv\rho) = 0
\end{cases}
$$

↳ Bilan sur $h\rho^2$ important en océano

⊕ splitting barotrope / barocline

↳ termes sources: influence sur le bilan d'entropie.

Impact sur $m^c_{j+\frac{1}{2}}$ et $\Pi^c_{j-\frac{1}{2}}$?

Merci !