

Eléments Finis Stochastiques

Introduction & Perspectives

Olivier Le Maître

olm@iup.univ-evry.fr



LABORATOIRE DE MÉCANIQUE ET D'ÉNERGÉTIQUE D'ÉVRY
AND LIMSI-CNRS, ORSAY, FRANCE.

Laboratoire de Mécanique et d'Energétique d'Evry

-

LIMSI-CNRS

Plan de la présentation

○ Méthodes des éléments finis Stochastiques :

- Objectif / motivations
- Décomposition en polynômes de Chaos
- Méthodes de résolution

○ Développements récents :

- Polynômes de chaos généralisés
- Bases alternatives
- Non-linéarités

○ Exemples :

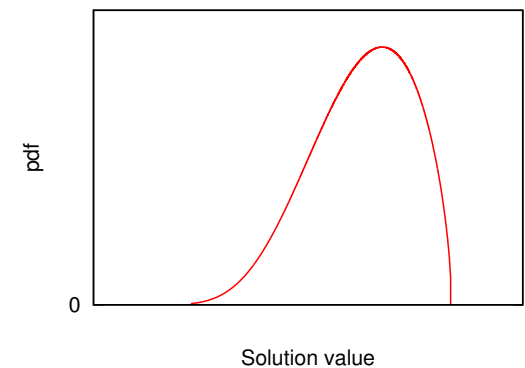
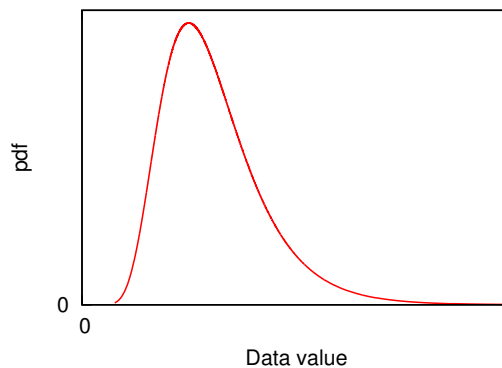
- Domaines d'application
- Quelques exemples
- Perspectives

Objectif : propagation et quantification d'incertitudes dans un modèle

○ Modélisation d'un système physique :

- Modèle mathématique du système donné (**certain**).
- Données **incertaines** (épistémique ou intrinsèque) : conditions aux limites et initiales, propriétés physiques, constantes de modélisations, **termes source**, ...
- ⇒ Considère les données incertaines comme des **quantités aléatoires** → approche probabiliste.
- ⇒ Déterminer la statistique de la solution du modèle compte tenu des distributions statistiques des données incertaines.

Données ⇒ Modèle ⇒ Solution



Méthode des éléments finis stochastiques

○ 3 étapes élémentaires :

- Paramétrisation des données incertaines : développement sur une base de polynômes de chaos.
- Propagation dans le modèle : **calcul déterministe** des coefficients du développement de la solution du modèle.
- Analyse de la statistique de la solution : moments, ANOVA, échantillonnage (pdf, probabilité d'évènements, fiabilité, ...)

○ Points forts & limites :

- Convergence rapide du développement.
- Résolution déterministe (par opposition à MC).
- Facilité du post-traitement (polynômes).
- Limité à des problèmes de complexité modérée.
- Nécessite (en général) une adaptation des solveurs.

Représentation des données incertaines

- **Données incertaines.** Soit (Ω, σ, μ) un espace probabilisé. On note $\mathbf{D}(\omega)$ les données incertaines du problème.
- Représentation de \mathbf{D} . Sous certaines conditions (notamment \mathbf{D} du second ordre), il existe un développement convergent (Cameron & Martin, 1947) du type :

$$\mathbf{D}(\omega) = \lim_{P \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^P \mathbf{D}_k \Psi_k(\boldsymbol{\xi}(\omega)).$$

□ $\boldsymbol{\xi} = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N\}$: **v.a. gaussiennes centrées réduites indépendantes.**

□ Ψ_k : polynômes en $\boldsymbol{\xi}$ orthogonaux :

Polynômes de Hermite

$$\langle \Psi_k \Psi_l \rangle = \int \Psi_k(\boldsymbol{\xi}) \Psi_l(\boldsymbol{\xi}) p(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} = 0, k \neq l.$$

□ Double limite en ordre (N_o) **et** en dimension (N).

□ Égalité au sens de la moyenne quadratique.

- **En pratique** : troncature en ordre et en dimension :

$$\mathbf{D}(\omega) \approx \sum_{k=0}^P \mathbf{D}_k \Psi_k(\boldsymbol{\xi}(\omega)), \quad P + 1 = \frac{(N_o + N)!}{N_o!N!}.$$

- **Principaux outils pour la détermination des \mathbf{D}_k**

- Transformation de variables aléatoires,
- Développement de Karhunen-Loève,
- Maximum de vraisemblance,
- Analyse Bayésienne,
- ...

Développement en PC de la solution

- Dépendance de la solution vis à vis de ξ :

$$S(\omega) = S(\xi(\omega)) = \sum_{k=0}^P S_k \Psi_k(\xi(\omega)) + TOS.$$

Approximation de S sur la même base de PC que D .

- Coefficient spectraux de la solution S_k
 - Caractérisent entièrement la solution aléatoire du modèle;
 - Développement facile à échantillonner (loi de probabilité de ξ connue).
 - Erreur de troncature.
- Suppose la disponibilité de **méthodes numériques efficaces, précises et économiques** pour la détermination des coefficients spectraux S_k .

Méthodes non-intrusives

○ Projection sur la base de PCs :

$$S_k = \frac{\langle S(\xi) \Psi_k(\xi) \rangle}{\langle \Psi_k^2 \rangle}$$

Essentiellement calcul d'intégrales de la forme $\langle S(\xi) \Psi_k(\xi) \rangle = \int S(\xi) \Psi_k(\xi) p(\xi) d\xi$.

□ Méthodes de Monte-Carlo.

□ Quadrature / cubature numérique.

○ Méthodes de régression : Trouver $\{S_0, \dots, S_P\}$ qui minimise :

$$\sum_{i=1}^n \left[\tilde{S}^i - \sum_{k=0}^P S_k \Psi_k(\xi^i) \right]^2,$$

où \tilde{S}^i est la solution du modèle déterministe pour les données $D(\xi^i)$.

○ Utilisation d'un code **déterministe**;

○ **Nombreuses résolutions du modèle**;

○ **Conditionnement et contrôle de l'erreur**.

Méthode intrusive

- Formulation du problème spectral : projection de Galerkin.

$$\mathcal{O}(S, D) = 0 \Rightarrow \left\langle \mathcal{O} \left(\sum_k S_k \Psi_k, \sum_l D_l \Psi_l \right) \Psi_m \right\rangle = 0, \quad m = 0, 1, \dots, P.$$

□ Obtention de $P + 1$ problèmes spectraux couplés.

- Dans certains cas **plus efficace que les méthodes non-intrusives**;
- Nécessite **l'adaptation d'un code de calcul déterministe**;
- **Traitement des non-linéarités du modèle**;
- **Dimension du problème spectral**;
- **Conditionnement et contrôle de l'erreur**.

Plan de la présentation

○ Méthodes des éléments finis Stochastiques :

- Objectif / motivations
- Décomposition en polynômes de Chaos
- Méthodes de résolution

○ Développements récents :

- Polynômes de chaos généralisés
- Bases alternatives
- Non-linéarités

○ Exemples :

- Domaines d'application
- Quelques exemples
- Perspectives

Choix des variables aléatoires

○ **Cas Gaussien** : $p(\xi) = \prod_{i=1}^N \frac{\exp[-\xi_i^2/2]}{\sqrt{2\pi}}$

$$U(\xi_1, \dots, \xi_N) = U_0 + \sum_{k=1}^N U_k \xi_k + TOS$$

- Les ξ_i ont un support infini.
- Termes d'ordre > 1 donnent la partie **non-gaussienne**.
- Polynômes de Hermite optimaux pour représenter des quantités non-gaussiennes ?

○ **Xiu et Karniadakis (2001)**

- Développement en Polynômes de Chaos Généralisés :

choix de la densité de probabilité des ξ_i

- Famille de polynômes pour des densités usuelles.

○ Polynômes de Chaos Généralisés :

- Distribution exponentielle → polynômes de Laguerre;
- Distribution uniforme → polynômes de Legendre;
- Schéma de Askey (v.a. usuelles continues ou discrètes);
- Construction numérique.
- Les expériences numériques montrent des comportements différents (taux de convergence, stabilité du calcul) selon le choix effectué.
- Pas de critère de choix a priori pour la densité optimale (sauf si celle de la solution est connue).

Choix des fonctions de base

○ Polynômes de Chaos Généralisés :

$$U(\xi) = \sum_{k=0}^P U_k \Psi_k(\xi) + TOS$$

- Ψ_k : polynômes orthogonaux multidimensionnels en ξ .
- Ψ_k a une contribution non-locale.
- Continuité C_∞ .
- Caractère oscillant des polynômes quand l'ordre augmente.

○ Systèmes étudiés

- Dépendances non-polynomiales \rightarrow ordre élevé.
- Dépendances locales.
- Faible régularité (bifurcations paramétriques, effets de seuil, ...).

○ **Utilisation de bases alternatives** : approximations **polynomiales par morceaux**.

□ Multi-ondelettes ([Le Maître et al, 2004](#)).

■ Contrôle local de la résolution.

■ Enrichissement de la base par ajout de détails compacts.

■ Supporte les discontinuités.

■ Permet de maintenir un ordre modéré au prix d'une augmentation significative de la dimension de la base (compression/adaptation).

□ Approche type éléments finis ([Karniadakis et al, 2005](#)).

■ Maillage éléments-finis du support de ξ .

■ Contrôle local de la taille du maillage.

■ Construction du maillage (estimateur d'erreur, dimensionnalité élevée).

Problèmes non-linéaires

○ Développement polynomial des non-linéarités :

- Par projection non-intrusive.
- Approximations pseudo-spectrales ([Debusschere at al, 2003](#)) :
 - Développements de Taylor (→ non-linéarités polynomiales).
 - Résolution de problèmes auxiliaires (Log, Exponentielles, racines carrées, inverses, ...).

○ Résolution des problèmes non-linéaires

- Méthodes non-intrusives.
- Méthodes de Galerkin :
 - Faisabilité démontrée pour des problèmes complexes.
 - Coût numérique.
 - Stabilité, robustesse des calculs.
 - Contrôle d'erreur.
 - Solutions multiples.

Plan de la présentation

○ Méthodes des éléments finis Stochastiques :

- Objectif / motivations
- Décomposition en polynômes de Chaos
- Méthodes de résolution

○ Développements récents :

- Polynômes de chaos généralisés
- Bases alternatives
- Non-linéarités

○ Exemples :

- Domaines d'application
- Quelques exemples
- Perspectives

Domains of applications :

○ **Examples & starting points** (list is incomplete)

- ✓ Solid mechanics (Ghanem and Spanos) - early 90's.
- ✓ Flow through porous media (Ghanem and Dham) - mid 90's.
- ✓ Heat diffusion in stochastic media (Hien and Kleiber) - mid 90's.
- ✓ Incompressible flows (Le Maître *et al*) - 2000.
- ✓ Fluid-Structure interaction (Karniadakis *et al*) - 2001.
- ✓ Micro-fluidic systems (Debusschere *et al*) - 2002.
- ✓ Reacting flows and combustion (Reagan *et al*) - 2002.
- ✓ 0-Mach flows and thermo-fluid problems (Le Maître *et al*) - 2003.
- ✓ Point vortex method (Le Maître *et al*) - 2004.

Note the increasing complexity of the problems, involving more and more coupled physics.

Equation de Convection Dispersion

○ Modèle 1D, hydrodynamique stationnaire

$$\theta(x) \frac{\partial}{\partial t} C(x, t) = - \frac{\partial}{\partial x} \left(q(x) C(x, t) - D(x) \frac{\partial}{\partial x} C(x, t) \right), \quad x \in [0, 1].$$

⇒ Paramètres hydrodynamiques (θ , q) **certains**,

⇒ **incertitude** sur le coefficient de dispersion :

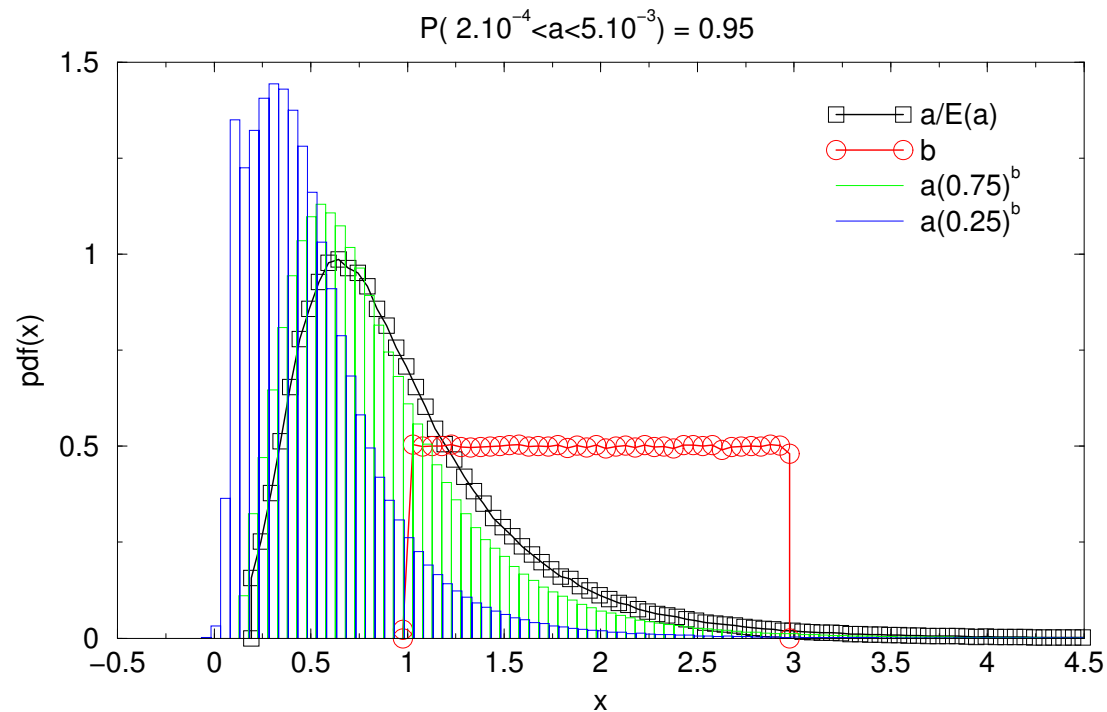
$$D(x, \omega) = \theta \left(\tau D_m + |q| a(\omega) \theta^{b(\omega)} \right).$$

a et b sont deux variables aléatoires indépendantes :

- a : distribution log-normale,
- b : distribution uniforme.

$$a(\omega) \approx \sum_{k=0}^P a_k \Psi_k(\xi(\omega)), b(\omega) \approx \sum_{k=0}^P b_k \Psi_k(\xi(\omega)) \quad \Rightarrow \quad D(x, \omega) \approx \sum_{k=0}^P D_k(x) \Psi_k(\xi(\omega))$$

○ Distribution of $a\theta^b$ ($N_o = 5$)



○ Discrétisation spatiale et temporelle : $[A]C^{n+1} = R^n$

$$\left(\sum_{k=0}^P [A]_k \Psi_k \right) \left(\sum_{l=0}^P C_l^{n+1} \Psi_l \right) = \sum_{m=0}^P R_m^n \Psi_m$$

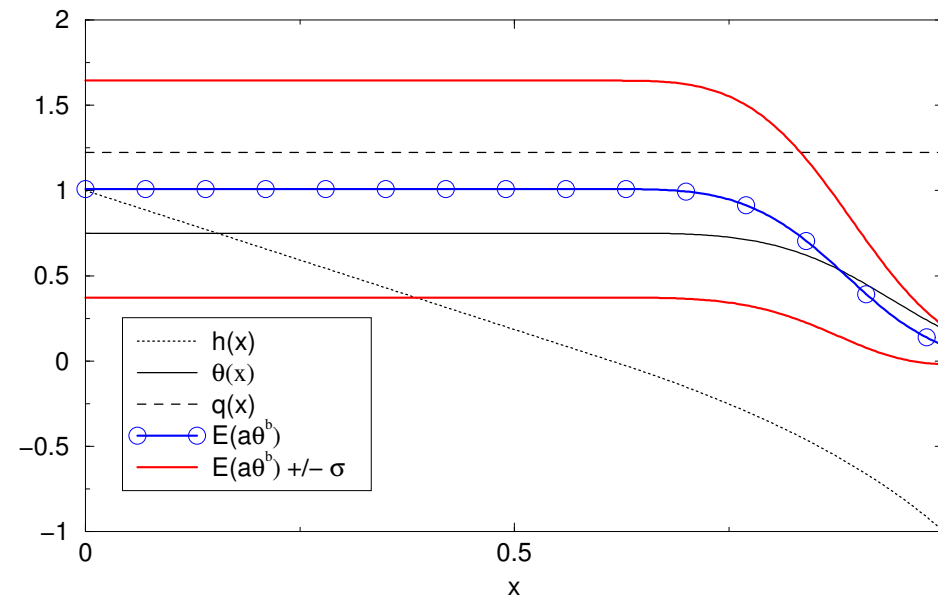
○ **Projection :**

$$\sum_{k=0}^P \sum_{l=0}^P [A]_k C_l^{n+1} \langle \Psi_i \Psi_k \Psi_l \rangle = R_i^n \langle \Psi_i \Psi_i \rangle .$$

○ **Résolution : Itérations de Jacobi par block.**

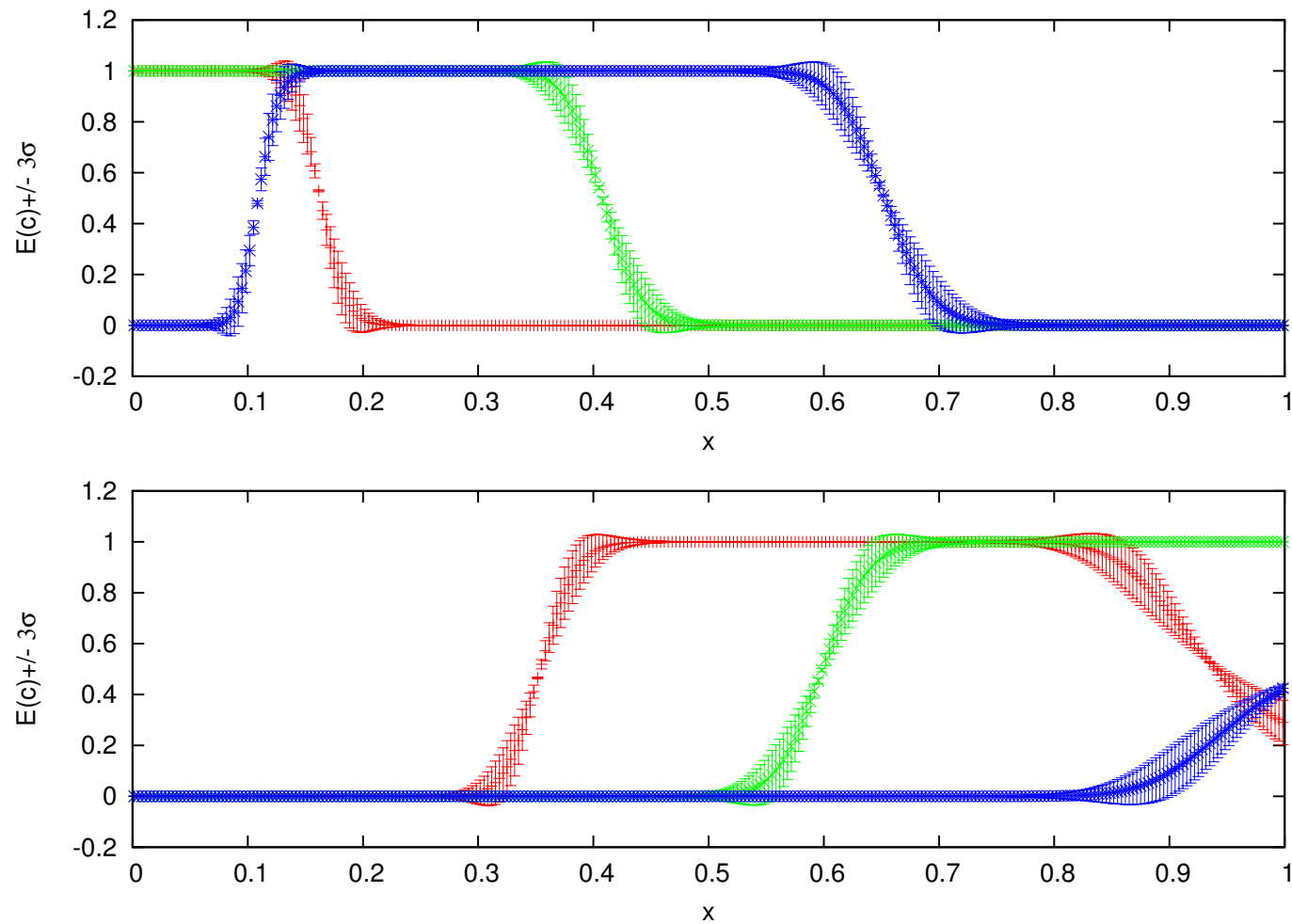
Pour le mode i de la solution :

$$[A]_0 C_i^{n+1} + \sum_{k=1}^P \sum_{l=0}^P [A]_k C_l^{n+1} \frac{\langle \Psi_i \Psi_k \Psi_l \rangle}{\langle \Psi_i \Psi_i \rangle} = R_i^n .$$



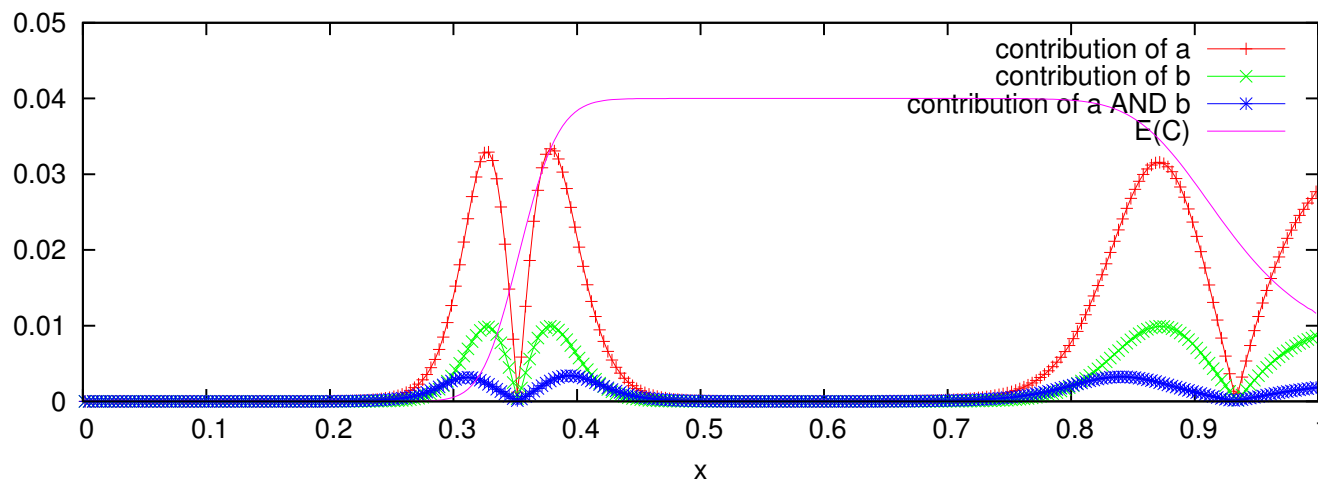
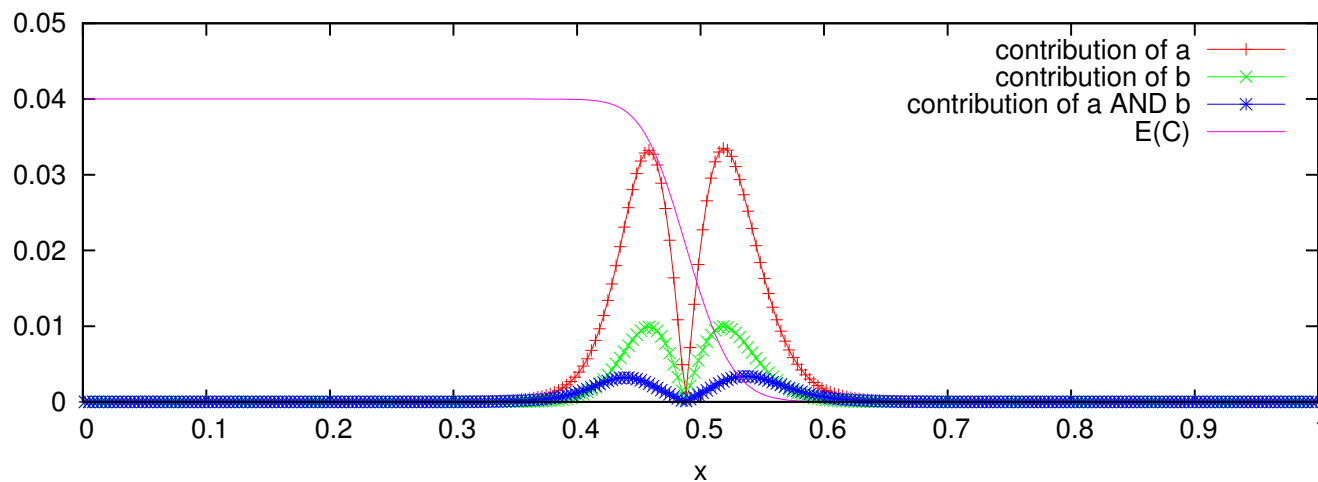
Solution

- **Espérance de la concentration et barres d'incertitude :**



Solution

○ Analyse de la variance :



Zero-Mach-Number flow : mathematical formulation

○ **Formulation** : (Najm, Knio *et al*, J. Comp. Phys., 1998 & 1999)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{\gamma T} \frac{dP}{dt} + \frac{1}{T} \left(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla T - \frac{1}{\text{Pr} \sqrt{\text{Ra}}} \nabla \cdot (\kappa \nabla T) \right) \quad (1)$$

$$\frac{dP}{dt} = -\gamma \frac{\int_{\Omega} \frac{1}{T} \left(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla T - \frac{1}{\text{Pr} \sqrt{\text{Ra}}} \nabla \cdot (\kappa \nabla T) \right) d\Omega}{\int_{\Omega} \frac{1}{T} d\Omega} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} = -\frac{\partial \rho u^2}{\partial x} - \frac{\partial \rho uv}{\partial y} - \frac{\partial \Pi}{\partial x} + \frac{1}{\sqrt{\text{Ra}}} \Phi_x \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} = -\frac{\partial \rho uv}{\partial x} - \frac{\partial \rho v^2}{\partial y} - \frac{\partial \Pi}{\partial y} + \frac{1}{\sqrt{\text{Ra}}} \Phi_y - \frac{1}{\text{Pr}} \frac{\rho - 1}{2\epsilon} \quad (4)$$

$$T = \frac{P}{\rho} \quad (5)$$

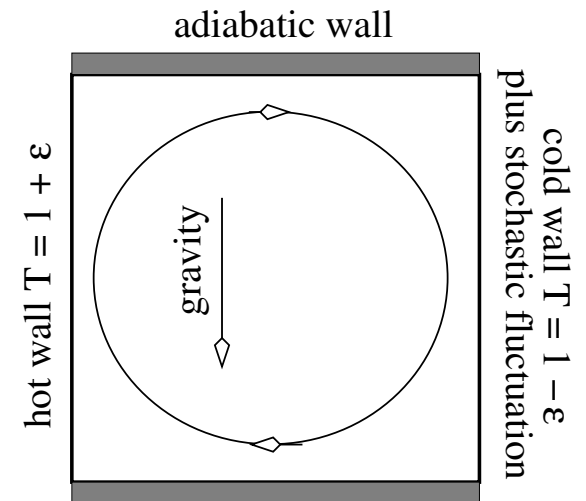
$$+ \text{Boundary and Initial Conditions.} \quad (6)$$

Boundary conditions :

○ Stochastic temperature distribution on cold wall

- ⇒ Gaussian distribution, with $COV = 0.25\epsilon$;
- ⇒ Correlation length $L_c = 1$ (exponential kernel);
- ⇒ Karhunen-Loeve decomposition.

$$T_c(y, \xi) \approx 1 + \epsilon + \sum_{i=1}^{N_{KL}=4} \epsilon \sqrt{\lambda_i} f_i(y) \xi_i.$$



○ Galerkin projection of the BC

$$\frac{\partial T_k}{\partial y} = 0, \quad k = 0, \dots, P \quad \text{for } y = 0, \text{ and } y = 1 \quad (7)$$

$$T_0(x = 0, y) = 1 + \epsilon, \quad T_0(x = 1, y) = 1 - \epsilon \quad (8)$$

$$T_k(x = 0, y) = 0, \quad T_k(x = 1, y) = \epsilon \sqrt{\lambda_k} f_k(y) \quad \text{for } k = 1, \dots, N_{KL} \quad (9)$$

$$T_k(x = 0, y) = T_k(x = 1, y) = 0 \quad \text{for } k > N_{KL} \quad (10)$$

Spectral Method :

○ Galerkin Projection

Derivation of governing equations for the spectral coefficients.

- 1) introduction of the spectral expansions into the governing equations;
- 2) projection of resulting equations onto the spectral basis.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho_k}{\partial t} = \mathcal{H}_k \quad , \quad \frac{dP_k}{dt} = \mathcal{G}_k \\ \frac{\partial \rho u_k}{\partial t} = \mathcal{X}_k - \frac{\partial \Pi_k}{\partial x} \quad , \quad \frac{\partial \rho v_k}{\partial t} = \mathcal{Y}_k - \frac{\partial \Pi_k}{\partial y} \\ T_k = \left(\frac{P}{\rho} \right)_k \quad , \quad k = 0, \dots, P \end{array} \right. \quad (11)$$

○ Strategy : explicit time scheme

- ⇒ Evaluation of non-linearities.
- ⇒ Exact enforcement of mass conservation.

Spectral treatment of non-linearities :

○ Quadratic products

if $a(\xi)$ and $b(\xi)$ are two stochastic quantities, their product $c = ab$ has for expansion :

$$c_k \equiv (ab)_k = \sum_{i=0}^P \sum_{j=0}^P a_i b_j C_{ijk}, \quad C_{ijk} = \frac{\langle \Psi_i \Psi_j \Psi_k \rangle}{\langle \Psi_k \Psi_k \rangle}. \quad (12)$$

True Galerkin form - Applied repeatedly for higher order products (becomes pseudo-spectral estimation).

○ Inverse estimation

Estimation of the spectral expansion of $1/a$, knowing $a(\xi) = \sum a_i \Psi_i$, is based on Taylor expansion around the mean (a_0) :

$$\frac{1}{a} \approx \frac{1}{a_0} - \frac{1}{a_0^2}(a - a_0) + \frac{1}{a_0^3}(a - a_0)^2 - \frac{1}{a_0^4}(a - a_0)^3 + \dots$$

Pseudo spectral evaluation → need sufficient resolution (expansion order) to avoid degradation of the solution due to aliasing errors.

Pressure solvability and mass conservation :

○ Closed Cavity

For the closed cavity case, the pressure solvability constraint is equivalent to :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \rho_k}{\partial t} d\Omega = 0, \quad k = 0, \dots, P,$$

which states the **Global Mass Conservation** for every modes.

○ Mass conservation enforcement

Since $\frac{\partial \rho_k}{\partial t} = \mathcal{H}_k$, where $\mathcal{H}_k = \frac{1}{\gamma T} \frac{dP_k}{dt} + \left[\frac{1}{T} \left(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla T - \frac{1}{\text{Pr} \sqrt{\text{Ra}}} \nabla \cdot (\kappa \nabla T) \right) \right]_k$,

pressure solvability and mass conservation are achieved if P exactly satisfies :

$$\frac{dP}{dt} \int_{\Omega} \frac{1}{\gamma T} d\Omega = (\partial_t \mathcal{P}) \mathcal{T} = - \int_{\Omega} \frac{1}{T} \left(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla T - \frac{1}{\text{Pr} \sqrt{\text{Ra}}} \nabla \cdot (\kappa \nabla T) \right) d\Omega = \mathcal{S}.$$

Using $\partial_t \mathcal{P} = \mathcal{S} \mathcal{T}^{-1}$ **leads to blow-up**. Instead **inversion of the true Galerkin product** :

$$\sum_i \sum_j (\partial_t \mathcal{P})_i \mathcal{T}_j C_{ijk} = \sum_i \mathcal{A}_{ki} (\partial_t \mathcal{P})_i = \mathcal{S}_k \Rightarrow \partial_t \mathcal{P} = \mathcal{A}^{-1} \mathcal{S}.$$



Influence of ϵ

○ Expectation of flow field

U. Level

$\epsilon = 0.01$

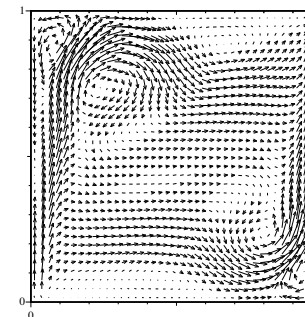
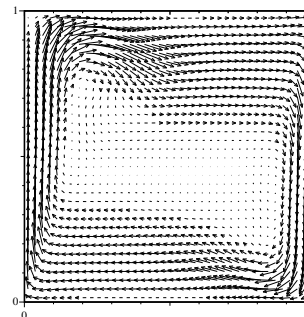
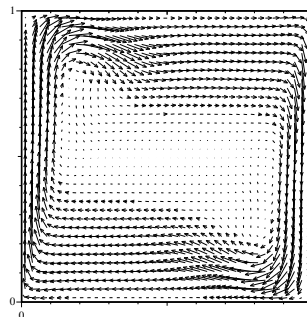
$\epsilon = 0.3$

Difference

Scale Factor .500E+00

Scale Factor .500E+00

Scale Factor .200E+01

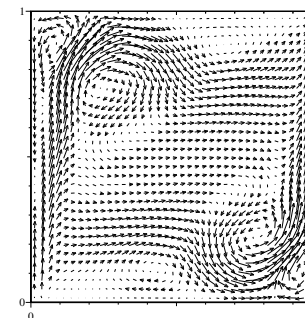
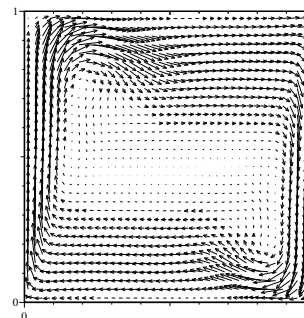
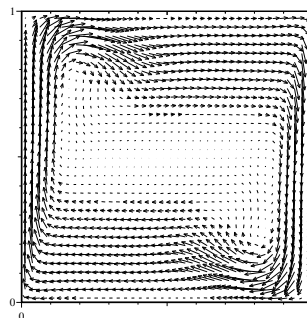


$COV = 0.25\epsilon$

Scale Factor .500E+00

Scale Factor .500E+00

Scale Factor .200E+01



$COV = 0$

Influence of ϵ ($Ra = 10^6$, $COV = 0.25\epsilon$)

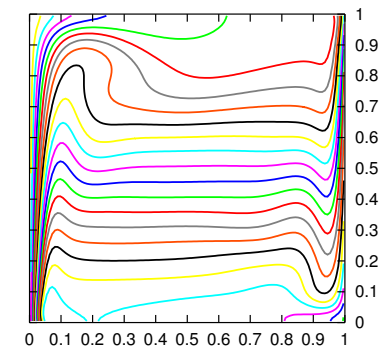
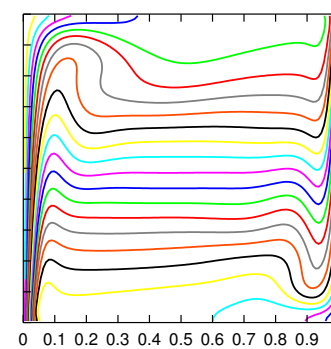
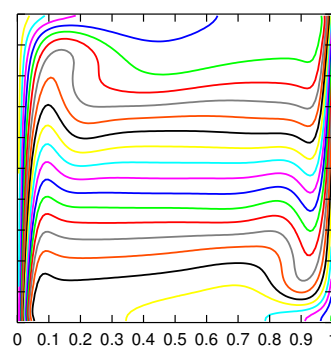
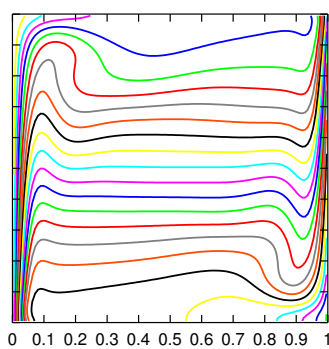
○ Standard deviation of T

$\epsilon = 0.01$

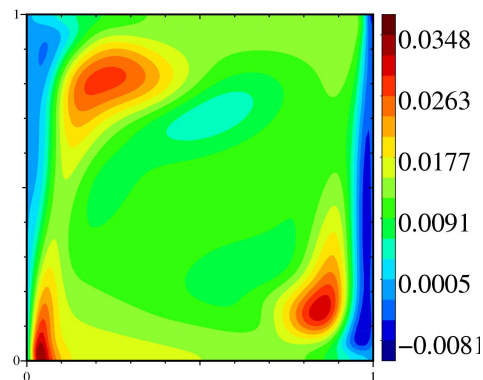
$\epsilon = 0.1$

$\epsilon = 0.2$

$\epsilon = 0.3$

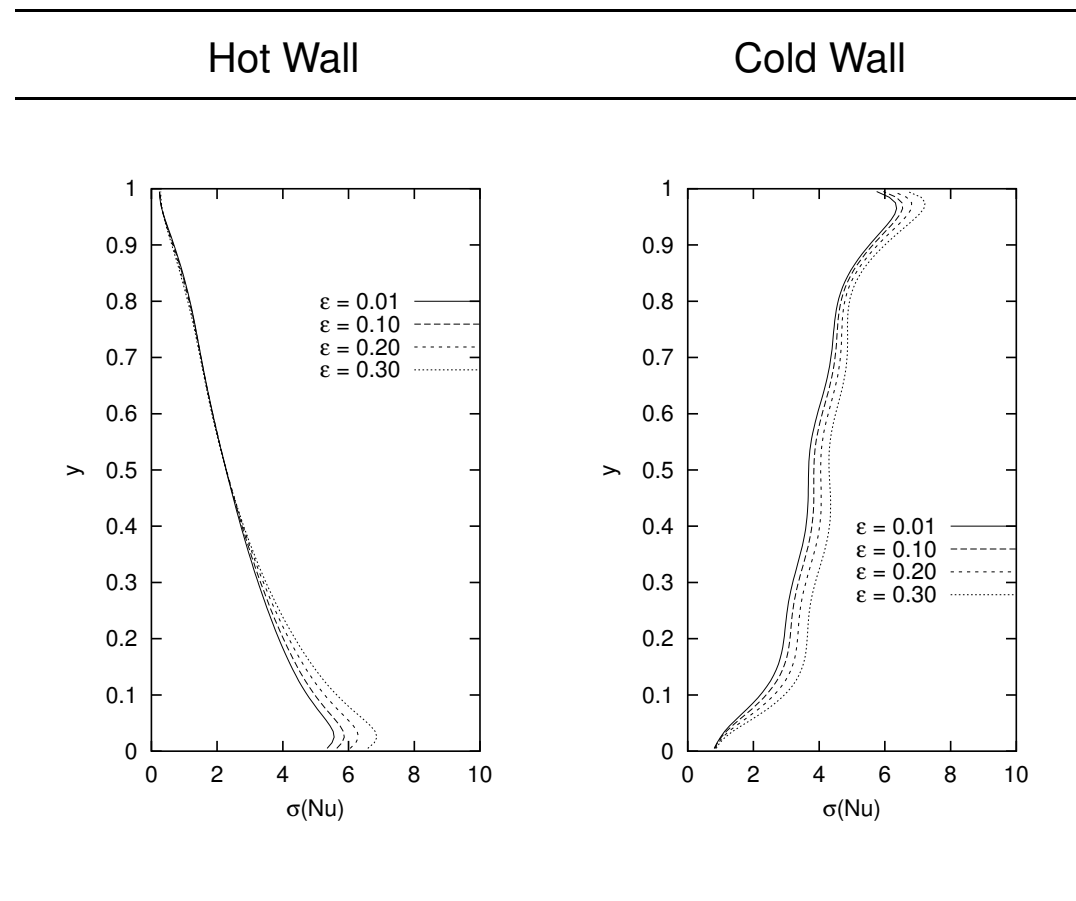


○ Differences between Std-fields of T at $\epsilon = 0.01$ and $\epsilon = 0.3$.



Influence of ϵ , $COV = 0.25\epsilon$

- Standard deviation of local heat-fluxes ($Ra = 10^6$, $No = 2$)



Perspectives sur les termes sources

- source unique : approche locale en temps.

$$f^i(t, \omega) = F^i(\omega) \Phi(t, t_i(\omega), t_e(\omega)).$$

- F^i , t_i et t_e v.a. indépendantes avec lois de probabilité données :

$$(F^i, t_i, t_e)(\omega) \approx \sum_{k=0}^P (F^i, t_i, t_e)_k \Psi_k(\boldsymbol{\xi}), \quad \boldsymbol{\xi} = \{\xi_1, \xi_2, \xi_3\}.$$

- Détermination du développement du terme source :

$$f_k^i(t) \langle \Psi_k^2 \rangle = \left\langle \left(\sum_l F_l^i \Psi_l \right) \Phi \left(t, \sum_m (t_i)_m \Psi_m, \sum_n (t_e)_n \Psi_n \right) \Psi_k \right\rangle.$$

- Ordre du développement ?
- Coût numérique ?

○ **source unique : processus stochastique (en temps).**

- Construction du noyau de corrélation $C(t, t') = E[f^i(t) f^i(t')]$ (par simulation).
- Décomposition de Karhunen-Loève de C :

$$f^i(t, \omega) = \sum_{k=0}^{\infty} \eta_k(\omega) \sqrt{\lambda_k} f_k^i(t), \quad E(\eta_k, \eta_l) = \delta_{kl}, \quad \int f_k^i(t) f_l^i(t) dt = \delta_{kl}.$$

- Représentation des v.a. η_k par PC :

$$\begin{aligned} \eta_k(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} \int f^i(t, \omega) f_k^i(t) dt. \\ &= \sum_{l=0}^P \alpha_l^k \Psi_l(\xi). \end{aligned}$$

Projection de Galerkin, maximum de vraisemblance, analyse Bayésienne ou principe de maximum d'entropie.

- Calculée lors d'une étape de pré-traitement.
- Troncature du développement de KL ?

○ **sources multiples.**

- Homogénéisation des termes sources stochastiques.
- Prise en compte des dépendances / corrélation entre sources.