

## Préservation de l'invariance par rotation sur maillage cartésien

ou Vous avez dit trèfle à 4 feuilles ?

**C**ONSIDÉRONS le modèle que nous avons construit au chapitre précédent avec pour donnée initiale des densités invariantes par rotation. Le champ de vitesse (donnée par ces mêmes densités) est donc invariante par rotation. Ainsi pour tout temps nos densités devraient être invariante par rotation. Sauf qu'avec les schémas numériques classiques, cette propriété n'est pas du tout conservée au fil du temps... Comme nous allons le présenter au début de ce chapitre, les lignes de niveaux, au départ circulaires, vont peu à peu se déformer devenant progressivement carrées puis prenant plus tard la forme d'un trèfle à 4 feuilles!... Deux pistes seront alors étudiées :

- défaut du schéma de diffusion
- défaut du schéma de transport

Une fois le défaut identifié, un correctif sera finalement proposé.

### 1.1 Présentation du problème

Sans plus tarder, présentons le problème en image. Sur la Figure 1.1, est présenté une simulation numérique du modèle EDP construit au chapitre précédent avec :

- un schéma à 5 points classique pour la diffusion,
- un WENO5 (avec splitting directionnel) pour le transport.

Partant d'une donnée initiale irrotationnelle, on constate que la simulation numérique peut générer une structure en forme de trèfle, comme présenté sur la Figure 1.2, alors que la forme circulaire devrait être préservée.

HEP FIGURE

FIGURE 1.1 – Simulations numériques réalisées avec un WENO5 pour le transport et un Laplacien classique à 5 points pour la diffusion. Partant d'une donnée initiale circulaire, une structure en forme de trèfle apparaît.

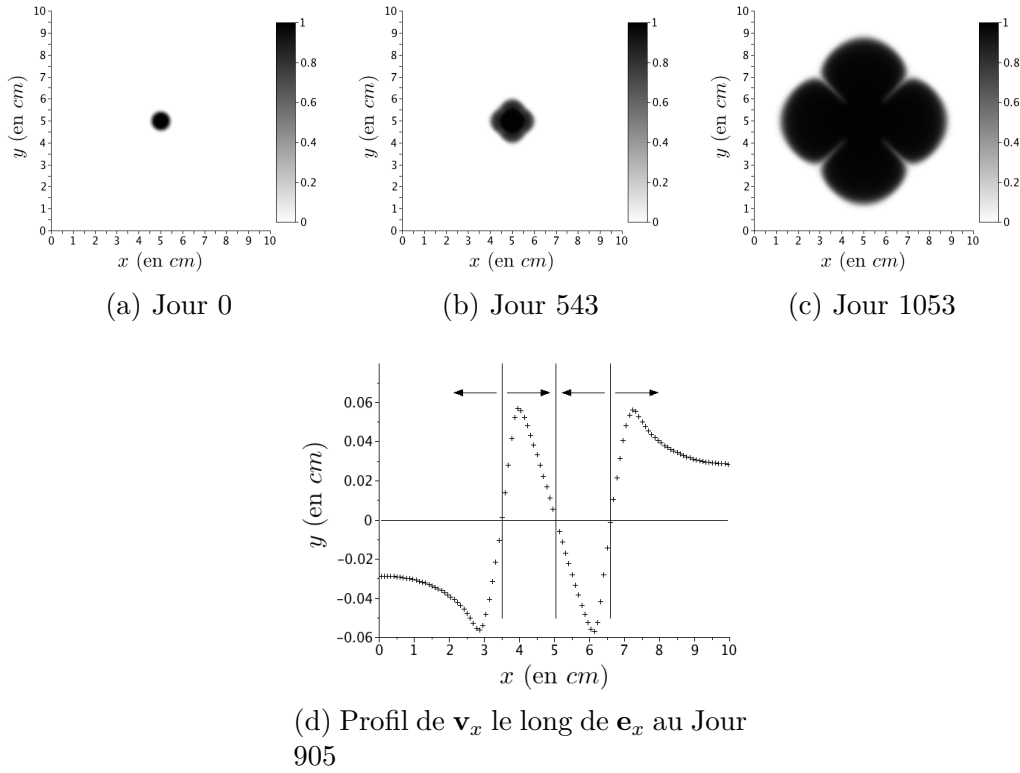


FIGURE 1.2 – Simulation numérique avec le stencil standard du WENO5 pour un jeu de paramètres spécifique. Partant d’une donnée initiale circulaire, une structure en forme de trèfle apparaît.

Notez que ce type d’erreur sur la forme conduit à une erreur sur l’évolution de l’aire de la lésion. En effet la forme de trèfle augmente la surface de contact ce qui modifie l’interaction entre la vascularisation et la tumeur. Ce type d’instabilités doit être fixé.

## 1.2 Le schéma de diffusion

### 1.2.1 Influence de la condition limite

Le schéma associé à la diffusion a été le premier à être incriminé. En effet dans l’équation REFF ??, la condition limite (CL) est imposée au bord du domaine de calcul  $\Omega$ , domaine qui est carré. La CL ne vérifie donc pas, dès le départ, l’invariance par rotation. Ceci est illustré sur la Figure 1.3 qui présente la solution de l’équation

$$\begin{cases} -\Delta \Pi(\mathbf{x}) = P(t = 0, x) & \text{dans } \Omega, \\ \Pi(\mathbf{x}) = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases} \quad (1.1)$$

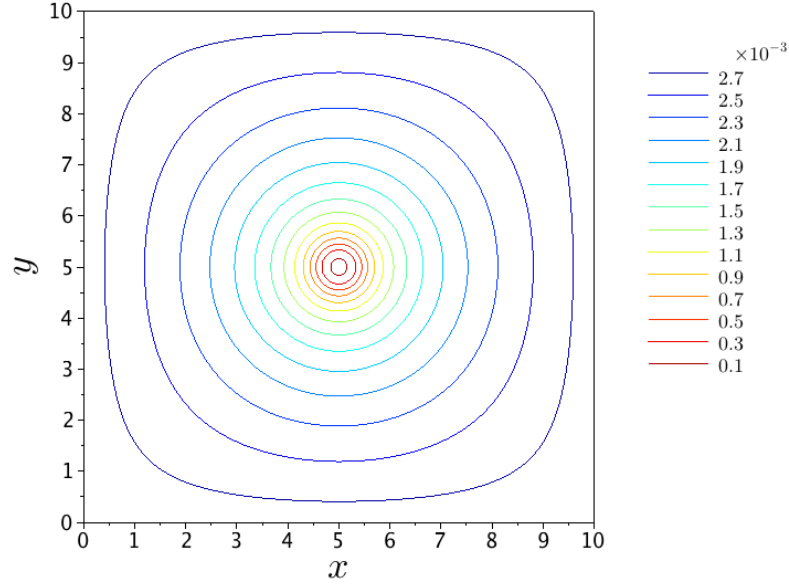


FIGURE 1.3 – Résolution de la pression donnée par un laplacien. La forme du domaine de calcul carré impacte sur le résultat.

qui n'est autre que l'équation résolue à la première itération ( $M$  étant initialisé au dessus du seuil d'hypoxie, on a alors au départ  $\gamma_{pp} = 1$  dans l'équation REF. De plus, comme  $N = 0$  au départ, on obtiens alors  $\nabla \cdot \mathbf{v} = P$ , car  $k \equiv 1$ ). Dans les itérations suivantes certes le second membres de l'équation va varier, mais cela ne va pas changer le fait que la forme du bord impacte sur les lignes de niveaux.

L'effet carré sur les lignes de niveaux de la pression, apparait surtout près du bord du domaine de calcul. Ainsi, pour tenter de palier à ce défaut, la première idée fut de considérer un domaine plus grand, laissant une sorte de couche limite pour absorber les déformations. Des simulations numériques de notre modèle ont été réalisées en doublant la longueur dans chaque direction (la taille d'une maille restant inchangée, on double aussi le nombre de maille). Malheureusement, une forme de trèfle est toujours visible. On a même du mal à distinguer visuellement si il y a eu une amélioration. Visiblement cette couche limite ne suffit pas. Imposons donc la CL sur un cercle, de sorte à ce que celle-ci soit invariante par rotation. Considérons alors un disque  $\mathcal{D}$  inclus dans notre domaine de calcul initial  $\Omega$  et imposons la CL de dirichlet sur son bord. L'équation REFF devient alors :

$$\begin{cases} -\Delta \Pi(t, \mathbf{x}) = F(t, \mathbf{x}) & \text{dans } \Omega, \\ \Pi(t, \mathbf{x}) = 0 & \text{sur } \partial \mathcal{D}, \end{cases} \quad \forall t > 0 \quad (1.2)$$

Pour résoudre cela on procède par pénalisation de tout ce qui est à l'extérieur

eqref

du disque :

$$-\Delta \Pi(t, \mathbf{x}) = F(t, \mathbf{x}) + \frac{1}{\epsilon} \Pi \mathbb{1}_{\mathcal{D}^c}(\mathbf{x}), \quad (1.3)$$

où  $\mathcal{D}^c$  désigne le complémentaire de  $\mathcal{D}$ . Cette technique nous garantit ainsi l'invariance par rotation de  $\Pi$  si  $F$  l'est, comme on peut le voir sur la Figure REF. Les simulations numériques réalisées avec ce masque circulaire ne montre qu'une très légère amélioration de la forme : le trèfle persiste. Explorons alors une autre piste.

Montrer graphique ?

### 1.2.2 Schéma à 9 points

La forme du trèfle fait très clairement apparaître les directions du maillage. Il est alors légitime de se demander si un schéma avec un stencil à 9 points ferait aussi apparaître ce genre de forme. Le premier schéma à 9 points essayer

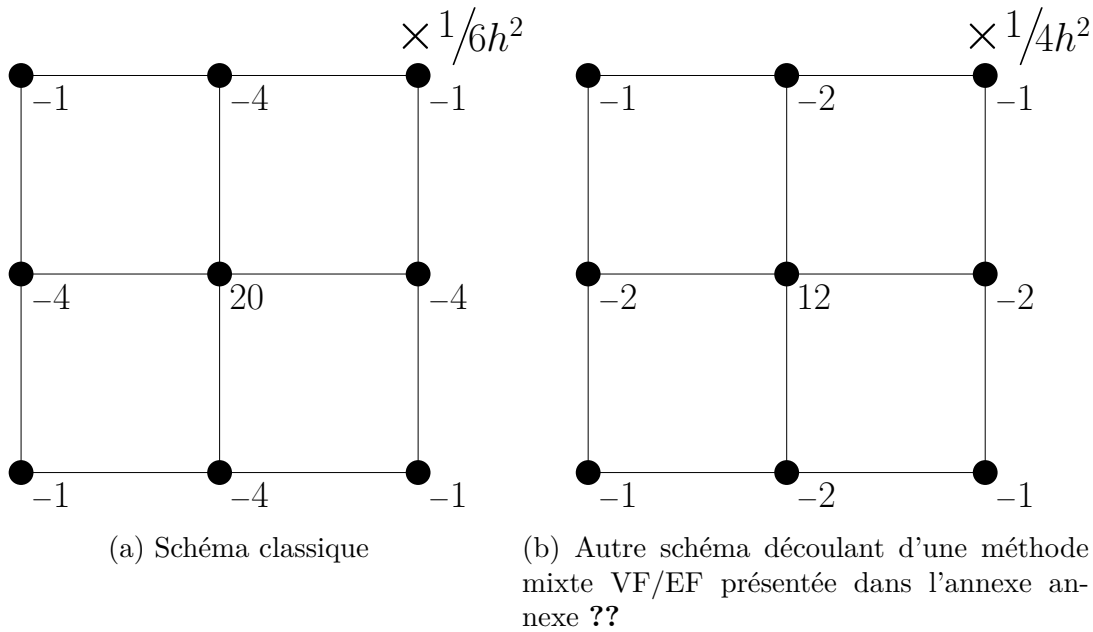


FIGURE 1.4 – Poids associés à chacun des points du stencil à 9 points de schémas discrétisant le laplacien ( $h$  étant le pas d'espace, égal dans chaque direction).

est le schéma classique, présenté notamment ???, ayant des poids comme indiqué sur la Figure 1.4a. Aucune amélioration n'a malheureusement été constatée ... Un second schéma à 9 points a été imaginé à partir d'une méthode mixte éléments finis/volumes finis. Sur chaque maille  $\mathcal{M}$ , une approximation par un polynôme  $\mathbb{Q}_1$  est réalisée à partir des valeurs aux quatre coins de

bib ref

la maille. Le flux au travers du volume de contrôle est alors calculé comme l'intégrale sur le bord de ce volume, de la dérivée du polynôme. Les détails concernant cette méthode sont présentés en annexe ???. Il y est notamment montré que ce schéma mixte se ramène en réalité à un schéma à 9 points avec des poids un peu différents, comme présenté dans la Figure 1.4b. Ici encore le trèfle persiste. Explorons alors une autre piste.

## 1.3 Le schéma de transport

### 1.3.1 Reproduction du problème sur un modèle (très) réduit

Afin de démontrer que le responsable du trèfle est le schéma de transport, travaillons sur un modèle plus simple, le plus simple possible. Il sera à priori incapable de reproduire la biologie que l'on souhaite décrire mais il aura l'avantage de toujours présenter cette forme en trèfle. Ce nouveau modèle est construit à partir du modèle complet présenté au chapitre précédent, en faisant les simplifications suivantes :

- On enlève les parties modélisant les traitements cliniques. On peut donc ainsi considérer une seule et unique population proliférante.
- On supprime la partie vascularisation. Les taux de croissance  $\gamma_{pp}$  et  $\gamma_{pd}$  sont alors considérés constants, égaux à 1.
- On supprime le compartiment nécrosé, quitte à considérer que celle-ci est instantanément éliminée.

Le modèle complet en est alors réduit à :

$$\begin{cases} \partial_t P + \nabla \cdot (\mathbf{v}P) = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = P \\ \mathbf{v} = \nabla \Pi \end{cases} \quad (1.4)$$

Notez qu'en injectant la seconde égalité dans la première équation, on obtient :

$$\partial_t P + \mathbf{v} \nabla P = -P^2 \quad (1.5)$$

Pour pouvoir incriminer le schéma de transport, réalisons une dernière simplification : donnons nous une vitesse. Ainsi seule l'équation 1.5 ci-dessus. La vitesse est choisie de sorte à reproduire au mieux la vitesse du système complet. Le champ est d'abord dilatatant (pour reproduire la croissance lors de la rechute au premier traitement) puis contractant (lorsque le second traitement agit). La transition entre les deux comportements est une phase dans laquelle on a un mélange des deux comportements :

- dilatatant sur le pourtour de la tumeur,
- contractant à l'intérieur de la tumeur.

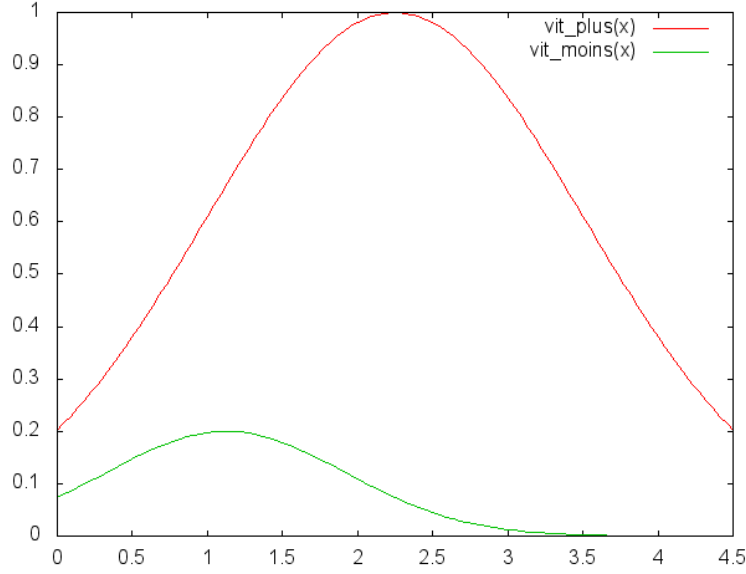


FIGURE 1.5 – Vitesses imposées dans l'équation de transport (1.5)

FIGURE 1.6 – Evolution de la densité  $P$ , solution numérique du modèle réduit (1.5).

La vitesse est alors choisie comme suit en fonction du rayon  $r(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_c\|$  uniquement ( $\mathbf{x}_c$  étant le centre du domaine de calcul de taille  $L \times L$ ) :

$$\mathbf{v}(t, \mathbf{x}) = v(t, r(\mathbf{x})) \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|} \quad \text{avec} \quad v(t, r) = e^{-t} v_+(r) - v_-(r), \quad (1.6)$$

où  $v_-$  et  $v_+$  sont respectivement les vitesses contractantes et dilatantes

$$v_+(r) = \exp \left( \frac{-1}{10} \left( \frac{r - L/4}{L/16} \right)^2 \right), \quad (1.7)$$

$$v_-(r) = \frac{1}{550} \exp \left( \frac{-1}{10} \left( \frac{r - L/8}{L/8} \right)^2 \right). \quad (1.8)$$

Le profil de ces 2 vitesses est présenté à titre indicatif sur la Figure 1.5. Avec ce modèle extrêmement minimaliste, le trèfle à 4 feuilles apparaît une fois de plus, comme on peut le constater sur la Figure 1.6.

graphique 1.5  
a refaire

### 1.3.2 Méthode pour améliorer la préservation de l'invariance par rotation : le twin-WENO5

De la même manière que nous avons procédé pour l'équation de Poisson, proposons un schéma pour le transport dont le stencil n'est pas uniquement réparti selon 2 directions. Le nouveau schéma, baptisé twin-WENO5 consiste

ref bi-  
blio pour  
WENO5

à combiner le WENO5 standard avec un autre WENO5 basé sur les directions diagonales. Ainsi l'ordre de convergence du WENO5 est préservé.

Détaillons un peu plus la manière dont se présente ce schéma. Son stencil est présenté sur la Figure ...

===== COPIE ARTICLE =====

Le schéma WENO5 standard comme donné par [?] est précis dans la plupart des cas, cependant certains ensembles de paramètres<sup>1</sup> produisent des instabilités numériques (de telles instabilités ont aussi été constatées avec un schéma classique upwind).

Le problème est dû au stencil du WENO5 qui tend à favoriser les directions du maillage lors de changement de direction de la vitesse. Comme on peut le voir sur la Figure 1.2d, au centre de la tumeur (autour de  $x = 5 \text{ cm}$  sur la Figure 1.2d), il y a un point de compression : la vitesse est centripète puisque  $v_x$  est positif à droite et négatif à gauche. De plus, aux alentours de  $1.5 \text{ cm}$  du centre de la tumeur, il y a une couronne de cellules proliférantes qui induit un mouvement d'étalement : la vitesse est centripète près du centre mais centrifuge plus loin.

Plus précisément, pour le schéma classique WENO5, en tout point  $\mathbf{x}_{ij}$  de la grille, l'approximation numérique  $\mathbf{W}_{ij}^{n+1}$  de l'équation (??) au temps  $t^{n+1}$  est donnée par

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_{i,j}^{n+1} = \mathbf{W}_{i,j}^n + \Delta t \Big( & v_{i,j}^{x,n} \mathcal{F} \left( \Delta x, (\mathbf{W}_{i+k,j}^n)_{k=-3,\dots,3} \right) \\ & + v_{i,j}^{y,n} \mathcal{F} \left( \Delta y, (\mathbf{W}_{i,j+k}^n)_{k=-3,\dots,3} \right) \Big), \end{aligned} \quad (1.9)$$

où  $v_{i,j}^{x,n}$  et  $v_{i,j}^{y,n}$  sont définis par (??) et où  $\mathcal{F}$  est la fonction de flux WENO5 donnée par [?]. Pour éviter ces instabilités numériques, nous introduisons le schéma twin-WENO5, qui est la combinaison d'un WENO5 avec son stencil standard avec un autre WENO5 dont le stencil est une rotation d'angle  $\alpha$  du premier (cf. Figure 1.7), où  $\alpha$  est défini en fonction des pas d'espaces de la grille,  $\Delta x$  et  $\Delta y$ , par

$$\alpha = \arctan(\Delta y / \Delta x) \in (0, \pi/2).$$

Nous introduisons les coefficients  $(v_{i,j}^{r,n}, v_{i,j}^{\theta,n})$  et  $\Delta r$  définis par<sup>2</sup>

$$\begin{pmatrix} v_{i,j}^{r,n} \\ v_{i,j}^{\theta,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{i,j}^{x,n} \\ v_{i,j}^{y,n} \end{pmatrix}, \quad \Delta r = \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}, \quad (1.10)$$

1. L'ensemble de paramètre a été trouvé par incident en fitant l'aire tumorale de Patient B, cf. Section ??.

2. Les coefficients  $v_{i,j}^{r,n}$  et  $v_{i,j}^{\theta,n}$  sont définis de sorte que

$$\mathbf{v}_{i,j}^n = v_{i,j}^{x,n} \mathbf{e}_x + v_{i,j}^{y,n} \mathbf{e}_y = v_{i,j}^{r,n} \mathbf{e}_r + v_{i,j}^{\theta,n} \mathbf{e}_\theta, \quad \text{avec} \quad \mathbf{e}_r = \cos \alpha \mathbf{e}_x + \sin \alpha \mathbf{e}_y, \quad \mathbf{e}_\theta = -\sin \alpha \mathbf{e}_x + \cos \alpha \mathbf{e}_y.$$

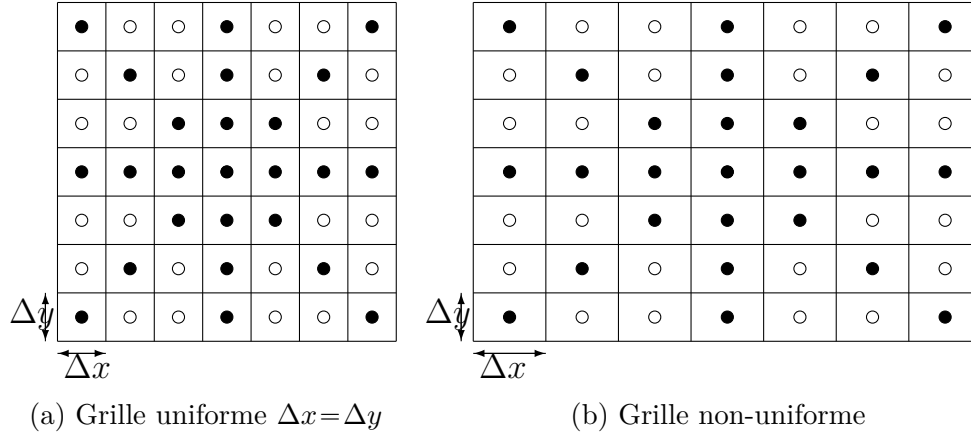


FIGURE 1.7 – Stencil du schéma twin-WENO5 pour une grille uniforme (à gauche) et une grille non-uniforme (à droite).

et nous discrétisons l'équation (??) grâce à notre schéma twin-WENO5 :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{W}_{i,j}^{n+1} = & \mathbf{W}_{i,j}^n + (1 - \beta)\Delta t \left( v_{i,j}^{x,n} \mathcal{F} \left( \Delta x, (\mathbf{W}_{i+k,j}^n)_{k=-3,\dots,3} \right) \right. \\
 & \left. + v_{i,j}^{y,n} \mathcal{F} \left( \Delta y, (\mathbf{W}_{i,j+k}^n)_{k=-3,\dots,3} \right) \right) \\
 & + \beta\Delta t \left( v_{i,j}^{r,n} \mathcal{F} \left( \Delta r, (\mathbf{W}_{i+k,j+k}^n)_{k=-3,\dots,3} \right) \right. \\
 & \left. + v_{i,j}^{\theta,n} \mathcal{F} \left( \Delta r, (\mathbf{W}_{i-k,j+k}^n)_{k=-3,\dots,3} \right) \right),
 \end{aligned} \tag{1.11}$$

où  $\beta \in (0, 1)$  est un paramètre numérique que nous devons choisir. En particulier pour  $\beta = 0$ , on retrouve le WENO5 standard. Comme nous pouvons le voir sur la Figure 1.8, notre nouveau schéma préserve beaucoup mieux la propriété d'invariance par rotation dans les cas où le WENO5 ne la préserve pas.



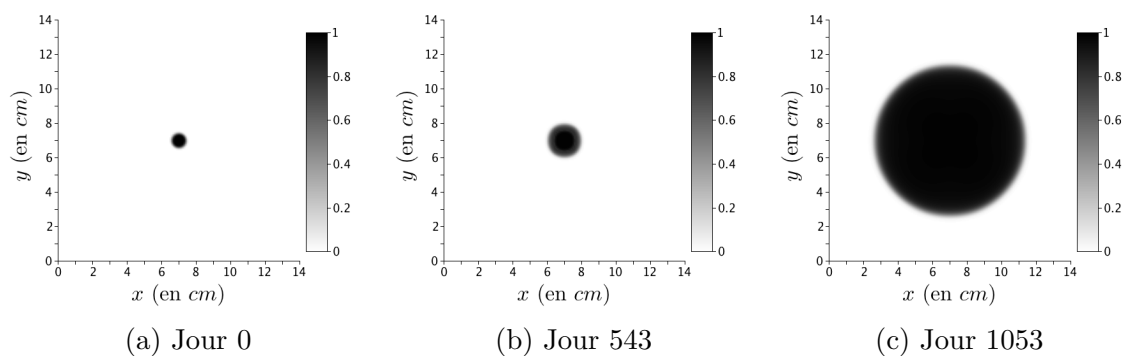


FIGURE 1.8 – Simulation numérique avec le schéma twin-WENO5 ( $\beta = 0.26$ ). Comparé à la Figure 1.2, la conservation de l'invariance par rotation est très clairement améliorée.