Rapport TP X01
TP4

Aurélien Valade

1 Introduction

Dans ce rapport, nous allons nous pencher sur la description et l'implémentation d'un code de résolutions d'équations aux dérivées partielles par méthode d'éléments finis et résolution hétérogène multi-échelles, termes que nous détaillerons plus loin. Ce travaille se présente en deux parties : tout d'abord en une analyse du papier de [**?**], puis une tentative de ré-implémentation de certaines parties de ce code à l'aide des routines développées dans les TP précédents.

2 Analyse du papier

Ce papier a pour but l'implémentation d'un code MATLAB simple et multifonctions à mettre à disposition du publique. Celui ci permettrait la résolution d'EDP dont la physique amène à considérer des phénomènes physiques couplés sur plusieurs échelles d'espaces distinctes. Pour la résolution de tels problèmes, une approche frontale serait donc de discrétiser tout l'espace avec un maillage dont les cellules seraient à l'échelle du phénomène physique le plus petit, mais cela amènerait à d'énormes problèmes numériques très coûteux à résoudre. Parfois la physique demande même à ce que la taille du phénomène microscopique tende vers zéro, il est alors impossible d'attaquer le problème brutallement et il faut donc créer un meilleur cadre analytique et trouver des méthodes numériques plus efficaces quitte à faire des approximations.

La littérature semble être fournie en ce qui concerne l'approche analytique de ce genre de problème multi-échelles, cependant peu d'outils numériques semblent être disponibles aujourd'hui, ce à quoi le travail présenté dans ce papier veut rémédier.

2.1 Cadre mathématique de la résolution

2.1.1 Présentation de l'équation

L'étude présentée dans ce papier porte sur des méthodes d'éléments finis (FE) pour la résolution de problèmes elliptiques et paraboliques comme suit.

Problème 1. *Soient les sous espaces* $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ *et* $Y = [0,1]^d$*. Soient* $\varepsilon > 0$, $\alpha \in \{0,1\}$ *et soient les fonctions sur ces espaces* $f : \Omega \to \mathbb{R}$, $A^\varepsilon : \Omega \times Y \to \mathcal{M}_d(\mathbb{R})$ *telle que* $A^\varepsilon = (A^\varepsilon)^T$ *et* $g_{N,D} : \partial\Omega_{N,D} \to \mathbb{R}$*.*
Trouver u tel que

$$\begin{cases} \alpha \partial_t u^\varepsilon - \nabla(A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon) = f & \text{sur } \Omega \\ u^\varepsilon = g_D & \text{sur } \partial\Omega_D \\ n \cdot (A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon) = g_N & \text{sur } \partial\Omega_N \end{cases}$$

Remarque 1. *Il s'agit d'un problème elliptique si* $\alpha = 0$*, sinon il s'agit d'un problème parabolique.*

Remarque 2. *La dépendance en ε de A^ε n'est pas forcément de la forme vue en cours $A^\varepsilon(x, x/\varepsilon)$ mais peut être plus complexe voire implicite, bien qu'on ne considère dans la suite que ce cas simple. Il est cependant nécessaire d'avoir pour tout ε les propriétés suivantes :*

$$\exists \lambda, \Lambda > 0 \quad s.t. \quad \lambda \xi^2 < (A^\varepsilon \xi) \cdot \xi < \Lambda \xi^2 \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^d$$

en tous points pour pouvoir prouver que le problème variationnel vu en subsubsection 2.1.2 est bien posé.

Cette formulation permet de mettre en exergue la dépendance en ε qui est l'échelle la plus petite du problème, et qui tend usuellement vers zéro. C'est cette dépendance qui est au centre du questionnement. En effet il ne suffit pas de trouver une solution u^ε explicite en ε et de faire tendre ε vers zéro pour trouver u^0. La convergence n'est généralement que faible dans L^2 :

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_\Omega u^\varepsilon \phi = \int_\Omega u^0 \phi \qquad \forall \phi \in L^2(\Omega).$$

Les deux méthodes présentées plus loin permettent de palier à ce problème par des méthodes analytiques amenant à des implémentations numériques modifiées.

2.1.2 Problème variationnel associé

On va poser ici la formulation variationnelle discrète du problème pour mieux voir les éléments qui nous intéressent réellement, à savoir les coefficients de la matrice de rigidité.

Par une démonstration vue plusieure fois en cours dans un cadre plus restreint[1], on obtient que le problème 1 est équivalent à

$$\underbrace{\int_\Omega (A^\varepsilon \nabla u^\varepsilon) \cdot \nabla \phi}_{B^\varepsilon(u^\varepsilon, \phi)} = \underbrace{\int_\Omega f \phi + \int_{\partial \Omega_N} g_N \phi - \int_\Omega (A^\varepsilon \nabla g_D) \cdot \nabla \phi}_{l^\varepsilon(\phi)} \qquad \forall \phi \in L^2(\Omega). \tag{1}$$

Remarque 3. *On peut réécrire immédiatement*

$$l^\varepsilon(\phi) = l(\phi) - B^\varepsilon(g_D, \phi)$$

Sous certaines conditions de coercivité et de continuité des fonctions (bi)linéaires en présence, on peut montrer que le problème est bien posé à l'aide du théorème de Lax-Milgram.

Il apparaît que le point centrale de la difficulté de cette équation est dans la fonction bilinéaire B^ε. Ce sont en effet ces coefficients que l'on cherchera à calculer par la méthode la plus adaptée pour quand ε tend vers 0.

Avant cela, discrétisons cette équation sur une base finie de fonctions de $L^2(\Omega)$. On se donne un maillage de simplex en deux dimensions[2]. On note les sommets de ce maillage les $\{S_i\}_{1,N}$ et $\mathcal{T}_h$ l'ensemble des simplex. On définit l'ensemble des sommets les fonctions de $\mathbb{R}^g[X]$ avec $g \in \mathbb{N}$ le degré des polynômes choisi. Ces fonctions, notées $\{\varphi_i\}_{1,N}$ par la suite sont telles que

$$\varphi_i(S_j) = \delta_{i,j} \quad \forall i, j \in [1, N]^2.$$

On projette u^ε sur cette bases et on utilise les $\{\varphi_i\}_{1,N}$ comme ϕ pour obtenir le système linéaire

$$\mathbb{K}^\varepsilon U^\varepsilon = L^\varepsilon$$

avec $\mathbb{K}^\varepsilon_{ij} = B^\varepsilon(\varphi_i, \varphi_j),\ U^\varepsilon_i = u^\varepsilon(S_i)$ et $L^\varepsilon_i = l^\varepsilon(\varphi_i)$.

[1] Multiliplication par ϕ, Green-Ostrogradski deux fois dont la deuxième pour changer l'intégrale sur g_D.

[2] Le papier sus-mentionné va plus loin en considérant d'autres types de maillages, en 2D et en 3D.

2.2 Méthode d'homogénéisation classique

Le concept développé en homogénéisation pure est de trouver un méthode pour calculer le tenseur A^{hom} en tout point pour pouvoir ensuite résoudre le problème dérivé qui nous donne la solution $u^{hom} = \lim_{\varepsilon\to 0} u^{\varepsilon}$:

Problème 2. *Trouver u^{hom} tel que*

$$\alpha\partial_t u^{hom} - \nabla(A^{hom}\nabla u^{hom}) = f$$

L'avantage est ici que ε a complétement disparu de l'équation et donc qu'un maillage adapté aux grandes échelles seules suffit. Cependant il faut pour cela calculer $A^{hom}(\bar{x})$ au préalable *i.e.* avant la résolution du macro problème. Pour cela on résout les problèmes dits de cellule en tout point $\bar{x}\in\Omega$ pour trouver les $\{w_i\}_{1,d}$:

$$\int_Y A^1(\bar{x},y)\nabla w_i(\bar{x},y)\nabla\phi(y)\mathrm{d}y = \int_Y A^1(\bar{x},y)e_i\nabla\phi(y)\mathrm{d}y \quad \forall\phi\in L^2(\Omega) \qquad \forall i\in\{1,d\} \tag{2}$$

puis on calcule le tenseur homogénéisé

$$A^{hom}_{jk}(\bar{x}) = \int_Y A(\bar{x},y)\big(e_k+\nabla_y w_k(\bar{x},y)\big)\big(e_j+\nabla_y w_j(\bar{x},y)\big)\mathrm{d}y \tag{3}$$

et on peut finalement résoudre le système linéaire homogénéisé :

$$\mathbb{K}U = L$$

avec $\mathbb{K}_{ij} = \int_\Omega (A^{hom}\varphi_i)\cdot\varphi_j,\ U_i = u^{hom}(S_i)$ et $L_i = l(\varphi_i) - \int_\Omega (A^{hom}g_D)\cdot\varphi_i$.

Le gros inconvénient de cette méthode étant qui faut préalablement calculer le tenseur homogénéisé A^{hom} et ce théoriquement en tout point de Ω, ou bien au moins en un certain nombre de points assez élevés pour faire une quadrature.

2.3 Différences et apport de la nouvelle méthode

Question 1. *Mq Equation 3 peut se réécrire sous la forme de Equation 4*

$$A^{hom}_{jk}(\bar{x}) = \frac{1}{|Y_\varepsilon|}\int_{Y_\varepsilon} A(\bar{x},x/\varepsilon)\big(e_k+\nabla_x\eta_k(\bar{x},x/\varepsilon)\big)\big(e_j+\nabla_x\eta_j(\bar{x},x/\varepsilon)\big)dx \tag{4}$$

avec

$$\eta_i = \varepsilon w_i \qquad \forall i\in\{1,2\}$$

On procède par changement de variable : $y\to x/\varepsilon$ et en faisant les transformations suivantes

- $dy \to dx/\varepsilon = dx/|Y_\varepsilon|$,
- $y = (-1/2,-1/2) \to x = (-\varepsilon/2,-\varepsilon/2) \implies Y\to Y_\varepsilon = (-\varepsilon/2,-\varepsilon/2)^2$,
- $\nabla_y = \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial x}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x} = \varepsilon\nabla_x$,

la réécriture est immédiate.

Question 2. *Second changement de variable*
Après second changement de variable $x \to x + \bar{x}$ on travaille avec les nouvelles fonctions $\tilde{\eta}_i = \varepsilon w_i(\bar{x}, (x - \bar{x})/\varepsilon)$. On voudrait montrer que ces nouvelles fonctions résolvent le problème **??**

$$\int_{Y_\varepsilon(\bar{x})} A(\bar{x}, x/\varepsilon)\nabla_x \tilde{\eta}_i(\bar{x}, x/\varepsilon)\nabla_x \phi(x)dx = -\int_{Y_\varepsilon(\bar{x})} A(\bar{x}, x/\varepsilon)e_i \nabla_x \phi(x)dx \tag{5}$$

pour cela, on peut résonner par équivalence en faisant le chemin inverse en faisant les changements de variables inverses

1. $x \to x + \bar{x}$
2. $x \to \varepsilon x$

Remarque : par des arguments de pseudo périodicité on peut montrer que le premier changement de variable ne change pas $A(x, x/\varepsilon)$. On retrouve alors l'équation sur Y avec les w_i :

$$\int_Y A(y)\nabla_y w_i(y)\nabla_y \phi(\bar{x} + \varepsilon y)dy = -\int_Y A(y)e_i \nabla_y \phi(\bar{x} + \varepsilon y)dy \qquad \forall i \in \{1,2\}, \forall \phi \in V_\varepsilon(Y_\varepsilon)$$

mais on voudrait montrer cette égalité $\forall \tilde{\phi} \in V$, ce qui est équivalent car

$$\forall \tilde{\phi} \in V, \exists \phi \in V_\varepsilon(Y_\varepsilon) \quad \text{tq} \quad \tilde{\phi}(x) = \phi(\bar{x} + \varepsilon y) \text{ en tout points associés } x \to y$$

or l'Equation 5 étant vraie $\forall \phi \in V_\varepsilon(Y_\varepsilon)$, on peut bien écrire

$$\int_Y A(y)\nabla_y w_i(y)\nabla_y \phi(y)dy = -\int_Y A(y)e_i \nabla_y \phi(y)dy \qquad \forall i \in \{1,2\}, \forall \phi \in V \tag{6}$$

Question 3. *Écrire la formulation discrète intégrale*
Pour alléger le calcul suivant, on pose les conventions d'écriture suivantes

- $A^{hom} = \begin{pmatrix} A_{11}^{hom} & A_{12}^{hom} \\ A_{21}^{hom} & A_{22}^{hom} \end{pmatrix}$
- $\partial_{x_i} \to \partial_i, \quad \forall i \in \{1,2\}$
- $B = \begin{pmatrix} 1 + \partial_1\tilde{\eta}_1 & \partial_1\tilde{\eta}_2 \\ \partial_2\tilde{\eta}_1 & 1 + \partial_2\tilde{\eta}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1 + \nabla_x\tilde{\eta}_1 & e_2 + \nabla_x\tilde{\eta}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_1 & B_2 \end{pmatrix} = I + \nabla_x\tilde{\eta}$

et on ne note pas les arguments des fonctions. Commençons par écrire $A^{hom}\nabla_x w_j$:

$$\begin{aligned} A^{hom}\nabla_x w_j &= \begin{pmatrix} A_{11}^{hom} & A_{12}^{hom} \\ A_{21}^{hom} & A_{22}^{hom} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_1 w_j \\ \partial_2 w_j \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} A_{11}^{hom}\partial_1 w_i + A_{12}^{hom}\partial_2 w_i \\ A_{21}^{hom}\partial_1 w_i + A_{22}^{hom}\partial_2 w_i \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{7}$$

on peut maintenant multiplier par la droite

$$\begin{aligned}
A^{hom}\nabla_x w_j \nabla_x w_i &= (A^{hom}_{11}\partial_1 w_i + A^{hom}_{12}\partial_2 w_i)\partial_1 w_i + (A^{hom}_{21}\partial_1 w_i + A^{hom}_{22}\partial_2 w_i)\partial_2 w_i \\
&= \frac{1}{|Y_\varepsilon|}\int_{Y_\varepsilon} A(e_1+\nabla_x\tilde{\eta}_1)\cdot(e_1+\nabla_x\tilde{\eta}_1)\partial_1 w_j \partial_1 w_i + \\
&\qquad A(e_2+\nabla_x\tilde{\eta}_2)\cdot(e_1+\nabla_x\tilde{\eta}_1)\partial_2 w_j \partial_1 w_i + \\
&\qquad A(e_1+\nabla_x\tilde{\eta}_1)\cdot(e_2+\nabla_x\tilde{\eta}_2)\partial_1 w_j \partial_2 w_i + \\
&\qquad A(e_2+\nabla_x\tilde{\eta}_2)\cdot(e_2+\nabla_x\tilde{\eta}_2)\partial_2 w_j \partial_2 w_i \\
&= \frac{1}{|Y_\varepsilon|}\int_{Y_\varepsilon} AB_1\partial_1 w_j\cdot B_1\partial_1 w_i + AB_2\partial_2 w_j\cdot B_1\partial_1 w_i + \\
&\qquad AB_1\partial_1 w_j\cdot B_2\partial_2 w_i + AB_2\partial_2 w_j\cdot B_2\partial_2 w_i\big] \\
&= \frac{1}{|Y_\varepsilon|}\int_{Y_\varepsilon} A(B_1\partial_1 w_j + B_2\partial_2 w_j)\cdot B_1\partial_1 w_i + \\
&\qquad A(B_1\partial_1 w_j + B_2\partial_2 w_j)\cdot B_2\partial_2 w_i + \\
&= \frac{1}{|Y_\varepsilon|}\int_{Y_\varepsilon} AB\nabla_x w_j\cdot B\nabla_x w_i \\
&= \frac{1}{|Y_\varepsilon|}\int_{Y_\varepsilon} A(I+\nabla_x\tilde{\eta})\nabla_x w_j (I+\nabla_x\tilde{\eta})\nabla_x w_i
\end{aligned} \tag{8}$$

cette équation appliquée aux points corrects donne

$$\begin{aligned}
A^{hom}\nabla_x w_j \nabla_x w_i = \frac{1}{|Y_\varepsilon(x_{T,k})|}\int_{Y_\varepsilon(x_{T,k})} & A(x_{T,k}, x/\varepsilon)(I+\nabla_x\tilde{\eta}(x_{T,k}, x/\varepsilon))\nabla_x w_j(x_{T,k}) \\
& (I+\nabla_x\tilde{\eta}(x_{T,k}, x/\varepsilon))\nabla_x w_i(x_{T,k})
\end{aligned}$$

Question 5. *Pb cell sur le dernier $\tilde{w}$*

En passant le membre de droite dans l'Equation 5, on retrouve

$$\begin{aligned}
&\int_{Y_\varepsilon(x_{T,k})} A(x_{T,k}, x/\varepsilon)(e_i+\nabla_x\tilde{\eta}_i(x_{T,k}, x/\varepsilon))\nabla_x\phi(x)dx = 0 \\
\iff &\int_{Y_\varepsilon(x_{T,k})} A(x_{T,k}, x/\varepsilon)B_i\nabla_x\phi(x)dx = 0
\end{aligned} \tag{9}$$

on peut donc écrire les couples d'équations scalaires $\forall i, l \in \{1,2\}$

$$\begin{aligned}
&\begin{cases} \int_{Y_\varepsilon(x_{T,k})} A(x_{T,k}, x/\varepsilon)B_i(x_{T,k}, x/\varepsilon)\nabla_x\phi(x)(\nabla w_l)_1 dx = 0 \\ \int_{Y_\varepsilon(x_{T,k})} A(x_{T,k}, x/\varepsilon)B_i(x_{T,k}, x/\varepsilon)\nabla_x\phi(x)(\nabla w_l)_2 dx = 0 \end{cases} \\
\iff &\begin{cases} \int_{Y_\varepsilon(x_{T,k})} A(x_{T,k}, x/\varepsilon)B_i(x_{T,k}, x/\varepsilon)(\nabla w_l)_1\nabla_x\phi(x) dx = 0 \\ \int_{Y_\varepsilon(x_{T,k})} A(x_{T,k}, x/\varepsilon)B_i(x_{T,k}, x/\varepsilon)(\nabla w_l)_2\nabla_x\phi(x) dx = 0 \end{cases}
\end{aligned} \tag{10}$$

avec une disjonction de cas on trouve

$$\begin{aligned}
&\begin{cases} \int_{Y_\varepsilon(x_{T,k})} A(x_{T,k}, x/\varepsilon) B_1(x_{T,k}, x/\varepsilon)(\nabla w_1)_1 \nabla_x \phi(x) dx = 0 \\ \int_{Y_\varepsilon(x_{T,k})} A(x_{T,k}, x/\varepsilon) B_2(x_{T,k}, x/\varepsilon)(\nabla w_1)_2 \nabla_x \phi(x) dx = 0 \end{cases} \qquad l = 1 \\
et \quad &\begin{cases} \int_{Y_\varepsilon(x_{T,k})} A(x_{T,k}, x/\varepsilon) B_1(x_{T,k}, x/\varepsilon)(\nabla w_2)_1 \nabla_x \phi(x) dx = 0 \\ \int_{Y_\varepsilon(x_{T,k})} A(x_{T,k}, x/\varepsilon) B_2(x_{T,k}, x/\varepsilon)(\nabla w_2)_2 \nabla_x \phi(x) dx = 0 \end{cases} \qquad l = 2() \\
\Longleftrightarrow &\begin{cases} \int_{Y_\varepsilon(x_{T,k})} A(x_{T,k}, x/\varepsilon) B(x_{T,k}, x/\varepsilon) \nabla w_1 \nabla_x \phi(x) dx = 0 \\ \int_{Y_\varepsilon(x_{T,k})} A(x_{T,k}, x/\varepsilon) B(x_{T,k}, x/\varepsilon) \nabla w_2 \nabla_x \phi(x) dx = 0 \end{cases} \\
\Longleftrightarrow &\begin{cases} \int_{Y_\varepsilon(x_{T,k})} A(x_{T,k}, x/\varepsilon) \nabla_x \tilde{w}_1(x_{T,k}, x/\varepsilon) \nabla_x \phi(x) dx = 0 \\ \int_{Y_\varepsilon(x_{T,k})} A(x_{T,k}, x/\varepsilon) \nabla_x \tilde{w}_2(x_{T,k}, x/\varepsilon) \nabla_x \phi(x) dx = 0 \end{cases}
\end{aligned} \tag{11}$$

d'où

$$\int_{Y_\varepsilon(x_{T,k})} A(x_{T,k}, x/\varepsilon) \nabla_x \tilde{w}_l(x_{T,k}, x/\varepsilon) \nabla_x \phi(x) dx = 0 \quad \forall l \in \{1, 2\} \tag{12}$$