Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines **Année Universitaire 2021-2022**
Master 1 Mathématiques et Interactions **UE : Introduction Calcul Scientifique et Projet**
Enseignant : Tahar Z. Boulmezaoud

PROJET

— Ce projet est à rendre avant le **25 avril 2022** par courrier électronique à l'adresse `tahar.boulmezaoud@uvsq.fr` et avec comme objet : `PROJET ISCP 2022 + VOS NOMS.`

— Le courriel doit contenir un compte-rendu composé de deux pièces jointes :

1. un rapport en format PDF scanné ou tapé comportant les réponses aux questions, les explications, les résultats numériques et les listings des programmes sources (insérés dans le rapport en annexe). Le nom de ce fichier **doit comporter vos noms** afin qu'il soit facilement reconnaissable.
   Il est préférable que ce rapport soit structuré de la manière suivante : réponses aux questions théoriques dans l'ordre (sans les questions de programmation), puis une brève description de la structure du programme, puis résultats numériques et enfin les programmes sources en annexe. Vous pouvez bien évidemment y ajouter vos commentaires et vos éventuelles initiatives.
2. un dossier archivé en **un seul fichier** comportant la totalité des programmes (pour l'archivage, on peut utiliser la commande tar par exemple). De même, le nom de ce fichier doit comporter vos noms.

— **Une présentation** du projet devant ordinateur avec d'éventuelles questions est à prévoir après retour des comptes rendus (la date de ces présentations vous sera indiquée ultérieurement en fonction de l'évolution de la situation).

— Ce projet est à réaliser **individuellement** ou par **binôme**. Cependant, les notes seront individuelles. Les notes de deux membres d'un même binôme peuvent différer.

— La partie programmation de ce projet telle qu'elle est décrite ici ne nécessite pas la notion de **classe** et cela afin de vous faciliter sa réalisation. Néanmoins, une structuration du programme en utilisant la notion **de classe** est fortement recommandée (mais n'est pas obligatoire). Elle apportera un **bonus** pouvant aller jusqu'à **2.5 points** sur la note totale du projet.

— Les réponses aux questions théoriques doivent être faites dans l'ordre exact. Dans les questions de programmation, le format suggéré n'est pas obligatoire : vous pouvez programmer à votre manière. Par exemple, concernant les fonctions demandées, les paramètres qu'elles renvoient peuvent être programmés

  — comme valeurs de sortie renvoyées par les fonctions,

  — ou comme des paramètres d'entrée transmis par *référence* (donc modifiables au sein de la fonction).

— Si vous constatez une quelconque anomalie, coquille ou si vous avez une quelconque question ou commentaire, merci de m'écrire par courriel.

— **Ce projet comptera pour 30% de la note de contrôle continu.**

1 Préliminaires

Soit $\Omega =]-a, a[\times]-b, b[$ un rectangle de $\mathbb{R}^2$ et notons $\partial\Omega$ son bord ($a > 0$ et $b > 0$). On considère l'équation aux dérivées partielles

$$-\mathrm{div}\,(\eta\nabla u)(x,y) = f(x,y) \text{ pour } (x,y) \in \Omega, \tag{1}$$

où η et f désignent deux fonctions continues de $\overline{\Omega}$ dans $\mathbb{R}$. On supposera qu'il existe une constante $\eta_0 > 0$ telle que

$$\forall (x,y) \in \Omega,\ \eta(x,y) \geqslant \eta_0.$$

On complète cette équation aux dérivées partielles avec **la condition aux limites** sur le bord :

$$u(x,y) = 0 \text{ pour tout } (x,y) \in \partial\Omega. \tag{2}$$

Soit V l'espace des fonctions v de classe $\mathscr{C}^1$ sur $\overline{\Omega}$ vérifiant $v(x,y) = 0$ pour tout $(x,y) \in \partial\Omega$.

1. Montrer que si u est une solution de (1)+(2) de classe $\mathscr{C}^2$ sur $\overline{\Omega}$ alors

$$\forall v \in V,\ \int_\Omega \eta(x,y)\nabla u(x,y).\nabla v(x,y)dxdy = \int_\Omega f(x,y)v(x,y)dxdy. \tag{3}$$

   On admet la réciproque : si $u \in V$ vérifie (3) alors u est nécessairement solution de (1).
2. Rappeler sans justification le théorème de changement de variable pour des intégrales multiples (intégrale de fonctions à plusieurs variables).

2 Le maillage

Remarque : Les notions de noeuds et de triangles abordées dans cette partie peuvent être programmées sous forme de **classes**.

2.1 Les noeuds

On considère désormais une subdivision $x_0 = -a < x_2 < \cdots < x_N = a$ de l'intervalle $[-a, a]$ et une subdivision $y_0 = -b < y_2 < \cdots < y_M = b$ de l'intervalle $[-b, b]$. Ici $N \geqslant 0$ et $M \geqslant 0$ désignent deux entiers destinés à être grands (nombres de pas dans les deux directions). On obtient ainsi une famille de $(N+1)\times(M+1)$ points (ou noeuds) (x_i, y_j), $0 \leqslant i \leqslant N$, $0 \leqslant j \leqslant M$.

1. Ecrire une fonction `Subdiv` ayant comme paramètres `a, N` et qui renvoie en sortie un vecteur `xi` (de taille $N+1$) comportant une subdivision *uniforme* de $[-a, a]$ en $N+1$ points.

2.1.1 Numérotation de tous les noeuds

Pour tous entiers $0 \leqslant i \leqslant N$ et $0 \leqslant j \leqslant M$, on attribue au noeud de coordonnées (x_i, y_j) le numéro *global* $s_{i,j} = (N+1)j + i$ (numérotation ligne par ligne, d'en bas vers le haut).

1. Effectuer un dessin expliquant cette numérotation.
2. Ecrire une fonction `numgb` ayant comme paramètres d'entrée les entiers N, M, i et j (avec $0 \leqslant i \leqslant N$ et $0 \leqslant j \leqslant M$) et renvoyant en sortie le numéro global $s_{i,j}$.
3. Soit s un entier compris entre 0 et $(N+1)(M+1)-1$. Montrer qu'il existe un seul couple (i,j), $0 \leqslant i \leqslant N$ et $0 \leqslant j \leqslant M$, tel que $s_{i,j} = s$. On exprimera (i,j) en fonction de s (au moyen de restes et de quotients de divisions euclidiennes).
4. Ecrire une fonction `invnumgb` ayant comme paramètres d'entrée des entiers N, M et s (avec $0 \leqslant s \leqslant (N+1)(M+1)-1$) et renvoyant en sortie les deux entiers i et j tels que $s_{i,j} = s$.

2.1.2 Numérotation des noeuds intérieurs

Pour tous entiers $1 \leqslant i \leqslant N-1$ et $1 \leqslant j \leqslant M-1$, on attribue au noeud *intérieur* (x_i, y_j) le numéro dit *intérieur* $k_{i,j} = (j-1)(N-1) + i - 1$ (numérotation des noeuds qui sont strictement à l'intérieur du domaine et non sur le bord). Ainsi, tout noeud intérieur (x_i, y_j) est indexé par deux numéros : un numéro global $s_{i,j}$ et un numéro intérieur $k_{i,j}$.

1. Ecrire une fonction `numint` ayant comme paramètres d'entrée les entiers N, M, i et j (avec $1 \leqslant i \leqslant N-1$ et $1 \leqslant j \leqslant M-1$) et renvoyant en sortie le numéro intérieur $k_{i,j}$.
2. Soit k un entier compris entre 0 et $(N-1)(M-1)-1$. Montrer qu'il existe un seul couple (i,j), $1 \leqslant i \leqslant N-1$ et $1 \leqslant j \leqslant M-1$, tel que $k_{i,j} = k$. On exprimera (i,j) en fonction de k (au moyen de restes et de quotients de divisions euclidiennes).
3. Ecrire une fonction `invnumint` ayant comme paramètres d'entrée des entiers N, M et k (avec $1 \leqslant k \leqslant (N-1)(M-1)-1$) et renvoyant en sortie les deux entiers i et j tels que $k_{i,j} = k$.
4. Ecrire une fonction `num_int_gb` ayant en entrée des entiers N, M et le numéro intérieur k d'un noeud intérieur (c'est-à-dire tel que $0 \leqslant k \leqslant (N-1)(M-1)-1$) et renvoyant en sortie le numéro global s de ce même noeud. On peut utiliser ici les fonctions `numgb` et `invnumint`.
5. Ecrire une fonction `num_gb_int` ayant en entrée des entiers N, M et le numéro global s d'un noeud intérieur et renvoyant en sortie le numéro intérieur k de ce même noeud. On peut utiliser ici les deux fonctions `invnumgb` et `numint`.

2.2 La triangulation

2.2.1 Une partition en triangles

On construit maintenant la famille de $2NM$ triangles définis de la manière suivante : dans chacun des rectangles $[x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}]$, $0 \leqslant i \leqslant N-1$, $0 \leqslant j \leqslant M-1$, on construit les deux triangles $T^-_{i,j}$ et $T^+_{i,j}$ en alternant horizontalement et verticalement les choix suivants :

— $T^-_{i,j}$ le triangle de sommets (x_i, y_j), (x_{i+1}, y_j), (x_{i+1}, y_{j+1}) et $T^+_{i,j}$ le triangle de sommets (x_i, y_j), (x_i, y_{j+1}) et (x_{i+1}, y_{j+1}),

ou

— $T^-_{i,j}$ le triangle de sommets (x_i, y_j), (x_{i+1}, y_j), (x_i, y_{j+1}) et $T^+_{i,j}$ le triangle de sommets (x_{i+1}, y_j), (x_i, y_{j+1}) et (x_{i+1}, y_{j+1}).

On a ainsi un ensemble $\mathscr{T}$ de K triangles, avec $K = 2NM$. On conviendra qu'un triangle T sera identifié à un triplet (n_1, n_2, n_3) où n_1, n_2 et n_3 désignent les *numéros globaux* des trois sommets de T. On numérotera ces triangles ligne par ligne de *gauche à droite, de bas en haut* en commençant par 0. On posera dans la suite

$$\mathscr{T} = \{T_\ell \mid 0 \leqslant \ell \leqslant K-1\},$$

où T_ℓ est le ℓ-ème triangle. Ainsi, $\mathscr{T}$ représente *une triangulation* de Ω.

1. A l'aide d'un dessin, illustrer la numérotation allant de 0 à $K-1$ de ces triangles.
2. Ecrire une fonction `maillageTR` ayant comme paramètres les entiers N, M et renvoyant un tableau (ou matrice) `TRG` de taille $K \times 3$ dont la ℓ-ème ligne, $0 \leqslant \ell \leqslant K-1$, contient les *trois numéros globaux* des sommets de T_ℓ.

2.2.2 Coordonnées barycentriques dans un triangle. Triangle de référence.

On dit qu'une application f de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}^m$, $n \geqslant 1$ et $m \geqslant 1$, est affine si

$$\forall \vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^n, \forall \alpha \in \mathbb{R}, f(\alpha\vec{x} + (1-\alpha)\vec{y}) = \alpha f(\vec{x}) + (1-\alpha) f(\vec{y}).$$

Soient A_0, A_1 et A_2 trois points *non alignés* du plan euclidien $\mathbb{R}^2$. On note T le triangle de sommets A_0, A_1 et A_2. Ainsi, T est non aplati.
Les coordonnées du point A_j, $0 \leqslant j \leqslant 2$, seront notées (x_j, y_j).

1. Montrer qu'une application f de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}^m$ est affine si et seulement si l'application $\vec{x} \mapsto f(\vec{x}) - f(0)$ est linéaire.
2. En déduire qu'une application f de $\mathbb{R}^2$ dans $\mathbb{R}$ est affine si et seulement si elle est de la forme
$$f(x,y) = \alpha x + \beta y + \gamma, \quad \text{pour tout } (x,y) \in \mathbb{R}^2,$$
où α, β et γ sont des constantes.
3. Montrer que pour tout point $M(x,y)$ du plan il existe trois réels $\lambda_0(x,y), \lambda_1(x,y)$ et $\lambda_2(x,y)$, *uniques*, tels que
$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \sum_{j=0}^{2} \lambda_j \begin{bmatrix} x_j \\ y_j \end{bmatrix} \text{ et } \sum_{j=0}^{2} \lambda_j = 1.$$
On appelera $(\lambda_0(x,y), \lambda_1(x,y), \lambda_2(x,y))$ les coordonnées barycentriques de $M(x,y)$ par rapport à T.
4. En déduire également que les fonctions $(x,y) \mapsto \lambda_i(x,y)$, $0 \leqslant i \leqslant 2$, sont toutes affines.
5. Que vaut $\lambda_j(x_i, y_i)$ pour $0 \leqslant i, j \leqslant 2$?
6. Soit f une fonction affine $\mathbb{R}^2$ dans $\mathbb{R}$. Montrer que
$$f = \sum_{i=0}^{2} f(x_i, y_i)\lambda_i.$$
et en déduire que si f vérifie $f(x_i, y_i) = 0$ pour $0 \leqslant i \leqslant 2$ alors f est identiquement nulle.
7. On note $\widehat{T}$ le triangle dit référence dont les sommets sont les points $\widehat{A}_i$, $0 \leqslant j \leqslant 2$, de coordonnées $(\widehat{x}_0, \widehat{y}_0) = (0,0)$, $(\widehat{x}_1, \widehat{y}_1) = (1,0)$ et $(\widehat{x}_2, \widehat{y}_2) = (0,1)$. On note par ailleurs $\widehat{\lambda}_0, \widehat{\lambda}_1$ et $\widehat{\lambda}_2$ les fonctions coordonnées barycentriques par rapport à ce triangle. Dessiner ce triangle $\widehat{T}$ et donner l'expression de $\widehat{\lambda}_i(x,y)$, $0 \leqslant i \leqslant 2$, en fonction de x et y.
8. Montrer qu'il existe une et une seule transformation affine F_T de $\mathbb{R}^2$ dans $\mathbb{R}^2$ qui vérifie $F_T(\widehat{x}_i, \widehat{y}_i) = (x_i, y_i)$ pour $0 \leqslant i \leqslant 2$ (autrement dit, F_T transforme le triangle de référence $\widehat{T}$ en le triangle T).
9. Montrer que F_T est inversible.
10. Soit B_T la matrice jacobienne de F_T. Donner l'expression des coefficients de B_T en fonction des x_i et y_i, $0 \leqslant i \leqslant 2$.
11. Ecrire une fonction `CalcMatBT`
    — ayant comme paramètres deux vecteurs (ou tableaux) `xs` et `ys` comportant les coordonnées des trois sommets d'un triangle T
    — qui renvoie la matrice B_T de taille 2×2 du triangle T.
12. Exprimer l'aire de T en fonction de $\det(B_T)$.
13. Exprimer λ_i, pour $0 \leqslant i \leqslant 2$, en fonction de $\widehat{\lambda}_i$ et de F_T.
14. En déduire l'expression de $\nabla\lambda_i$ en fonction de la matrice B_T et du vecteur $\nabla\widehat{\lambda}_i$ (on notera que les gradients $\nabla\lambda_i$ et $\nabla\widehat{\lambda}_i$ sont des vecteurs constants).
15. Donner une expression simple des produits scalaires $\nabla\lambda_k.\nabla\lambda_j$ en fonction de la matrice B_T, de son déterminant, et des vecteurs $\nabla\widehat{\lambda}_j$ et $\nabla\widehat{\lambda}_k$ $(0 \leqslant j, k \leqslant 2)$.

16. On s'intéresse maintenant au calcul des intégrales

$$\int_T \eta \nabla\lambda_k.\nabla\lambda_j dxdy = (\nabla\lambda_k.\nabla\lambda_j)\int_T \eta dxdy, \quad 0 \leqslant k,j \leqslant 2.$$

Pour ce faire, on considère plus généralement une intégrale de la forme

$$S(H) = \int_T H(x,y)dxdy,$$

où H est une fonction définie sur T et suffisamment régulière.

(a) Montrer que

$$S(H) = |\det(B_T)| \int_{\widehat{T}} h(\widehat{x},\widehat{y})d\widehat{x}d\widehat{y} \text{ où } h(\widehat{x},\widehat{y}) = H(F_T(\widehat{x},\widehat{y})).$$

(b) Etant donné que le triangle T est destiné à être "petit" dans le contexte de ce projet, on aimerait utiliser une formule de quadrature du type

$$\int_{\widehat{T}} h(\widehat{x},\widehat{y})d\widehat{x}d\widehat{y} = \int_0^1 \int_0^{1-\widehat{x}} h(\widehat{x},\widehat{y})d\widehat{y}d\widehat{x} = \int_0^1 \int_0^{1-\widehat{y}} h(\widehat{x},\widehat{y})d\widehat{x}d\widehat{y} \approx \sum_{i=1}^{q} \omega_i h(\widehat{x}_i,\widehat{y}_i),$$

où $(\widehat{x}_i,\widehat{y}_i)$, $1 \leqslant i \leqslant q$, sont des points et ω_i les poids associés, tous choisis convenablement. Par exemple, on a la formule de quadrature des points milieux :

$$\int_{\widehat{T}} h(\widehat{x},\widehat{y})d\widehat{x}d\widehat{y} \approx \frac{1}{6}h(\frac{1}{2},0) + \frac{1}{6}h(0,\frac{1}{2}) + \frac{1}{6}h(\frac{1}{2},\frac{1}{2}),$$

Vérifier que cette formule est exacte pour des polynômes de degré inférieur ou égal à un certain entier naturel d à préciser (on peut tester avec des fonctions de la forme $(x,y) \mapsto x^p y^q$, $p+q \leqslant d$, $d = 0,1,2,3$, etc).

(c) Ecrire une fonction `GradGrad`

— ayant comme paramètres deux vecteurs (ou tableaux) `xs` et `ys` comportant les coordonnées des trois sommets d'un triangle T et une fonction `eta` (correspondant au coefficient variable $\eta(.,.)$),

— qui renvoie la matrice symétrique `GrdGrd` de taille 3×3 et dont les coefficients sont

$$\int_T \eta \nabla\lambda_k.\nabla\lambda_j dxdy, \ 0 \leqslant k,j \leqslant 2,$$

où λ_k, $0 \leqslant k \leqslant 2$, désignent les fonctions coordonnées barycentriques par rapport à ce triangle T.

17. Soit $M = (x,y)$ un point quelconque. Montrer que $M \in T$ si et seulement si $\lambda_i(x,y) \geqslant 0$ pour tout $0 \leqslant i \leqslant 2$.

18. Ecrire une fonction `DansTrg` ayant comme paramètres d'entrée principaux les tableaux `xs` et `ys` (coordonnées des sommets de T), deux réels `x` et `y` et qui renvoie un entier `info` valant 1 si le point $(x,y) \in T$ et 0 sinon.

3 Le problème discret

Remarque : les éléments de l'espace V_h ci-dessous peuvent être représentés par une **classe** *qui peut avoir comme attributs le vecteur des valeurs aux noeuds intérieurs, son extension à tous les noeuds, sa norme L^2, la norme L^2 de son gradient, etc.*

On considère maintenant la triangulation $\mathscr{T}$ de Ω ci-dessus (comportant $2NM$ triangles). On pose $I = (N-1)(M-1)$ et $G = (N+1)(M+1)$. On note $M_0^i, M_1^i, \cdots, M_{I-1}^i$ les noeuds intérieurs numérotés de la manière indiquée ci-dessus. On note $M_0, M_1, \cdots, M_{G-1}$ les noeuds du maillage (intérieurs ou sur le bord). Ainsi, $M_k^i = M_s$ si k est le numéro d'un noeud intérieur et s son numéro global. Soit V_h l'espace suivant

$$V_h = \{v \in \mathscr{C}_0^0(\overline{\Omega}) \mid \forall 0 \leqslant \ell \leqslant K-1,\ v_{|T_\ell} \text{ est affine}\},$$

où $\mathscr{C}_0^0(\overline{\Omega})$ est l'espace des fonctions *continues* sur $\overline{\Omega}$ et vérifiant

$$v(x,y) = 0 \text{ pour tout } (x,y) \in \partial\Omega.$$

1. On note I_h l'application de V_h dans $\mathbb{R}^I$ définie par

$$\forall v \in V_h,\ I_h(v) = (v(M_k^i))_{0 \leqslant k \leqslant I-1}.$$

   Montrer que I_h est un isomorphisme et indiquer la dimension de V_h.

2. Pour tout entier naturel $k \leqslant I-1$, on note désormais w_k l'unique élément de V_h vérifiant

$$w_k(M_\ell^i) = \delta_{k,\ell} \text{ pour tout } 0 \leqslant \ell \leqslant I-1.$$

   Justifier brièvement pourquoi $(w_k)_{0 \leqslant k \leqslant I-1}$ est une base de V_h.
   On considère aussi les fonctions $\tilde{w}_s$, $0 \leqslant s \leqslant G-1$, continues sur $\overline{\Omega}$, affines sur chacun des triangles (affines par morceaux) et vérifiant

$$\tilde{w}_s(M_r) = \delta_{s,r} \text{ pour tout } 0 \leqslant r \leqslant G-1.$$

   On observe que $\tilde{w}_s = w_k$ si $M_s = M_k^i$. On observe aussi que $\tilde{w}_s \notin V_h$ si $M_s \in \partial\Omega$.

3. Soit $k \leqslant I-1$ fixé et $T \in \mathscr{T}$ un triangle.
   (a) On suppose que M_k^i n'est pas un sommet de T. Quelle est la restriction de w_k à T ?
   (b) On suppose que M_k^i est sommet de T. Quelle est la la restriction de w_k à T ? (en termes des fonctions coordonnées barycentriques par rapport à T).
   (c) On suppose que M_k^i est sommet de T. Soit M_j^i, $j \leqslant I-1$, un autre sommet intérieur de T. Soit F_T une transformation affine transformant le triangle de référence $\widehat{T}$ en T et soit B_T sa matrice. On suppose que $F_T^{-1}(M_k^i) = \widehat{A}_\ell$ et $F_T^{-1}(M_j^i) = \widehat{A}_s$ avec $0 \leqslant \ell \leqslant 2$ et $0 \leqslant s \leqslant 2$. Exprimer $\nabla w_k.\nabla w_j$ en fonction de la matrice B_T, son déterminant, et les vecteurs $\nabla\widehat{\lambda}_\ell$ et $\nabla\widehat{\lambda}_s$.

4. On considère le problème approché : trouver $u_h \in V_h$ tel que

$$\forall v \in V_h,\ \int_\Omega \eta(x,y)\nabla u_h(x,y).\nabla v_h(x,y)dxdy = \int_\Omega f(x,y)v_h(x,y)dxdy. \tag{4}$$

   Montrer que ce problème discret se ramène à un système linéaire de taille $I \times I$ de la forme

$$AU = B,$$

avec $A = ((a_{k,j}))_{0 \leqslant k,j \leqslant I-1}$ et $B = (b_0, \cdots, b_{I-1})^t$ définis par

$$\begin{aligned} a_{k,j} &= \int_\Omega \eta(x,y) \nabla w_k(x,y) . \nabla w_j(x,y) dxdy, \\ b_k &= \int_\Omega f(x,y) w_k(x,y) dxdy. \end{aligned}$$

5. Montrer que la matrice A est définie positive.
6. Pour tout vecteur $V = (v_0, \cdots, v_{I-1})^t \in \mathbb{R}^I$ (dont chacune des composantes peut être associée à un noeud intérieur), on note $\tilde{V} = (\tilde{v}_0, \cdots, \tilde{v}_{G-1})$ le vecteur de taille G (dont chacune composante peut être associée à un noeud intérieur ou sur le bord) défini de la manière suivante : pour tout $0 \leqslant s \leqslant G-1$

$$\tilde{v}_s = \begin{cases} 0 & \text{si } M_s \in \partial\Omega, \\ v_k & \text{si } M_s = M_k^i \text{ (M_s est un noeud intérieur et k son numéro intérieur)}, \end{cases}$$

(le numéro intérieur k peut-être obtenu avec `num_gb_int`).

   (a) Ecrire une fonction `extendVec` ayant comme paramètre principal un vecteur V de taille I et envoyant le vecteur $\tilde{V}$ prolongeant V de la manière ci-dessus.

   (b) Inversement, écrire une fonction `IntVec` ayant comme paramètre principal un vecteur W de taille G et envoyant le vecteur $V = (v_0, \cdots, v_{I-1})$ tel que $v_k = w_s$ pour tout $k \leqslant I-1$ (avec s le numéro global du noeud M_k^i).

7. On veut programmer une fonction renvoyant le produit matrice-vecteur AU pour un vecteur $V = (v_0, \cdots, v_{I-1})^t \in \mathbb{R}^I$ donné. On a pour $0 \leqslant k \leqslant I-1$

$$\begin{aligned} (AV)_k &= \sum_{j=0}^{I-1} v_j \int_\Omega \eta \nabla w_k . \nabla w_j dxdy, \\ &= \sum_{r=0}^{G-1} \tilde{v}_r \int_\Omega \eta \nabla \tilde{w}_s . \nabla \tilde{w}_r dxdy, \\ &= \sum_{T \in \mathscr{T} | M_s \in T} \ \sum_{r | M_r \in T} \tilde{v}_r \int_T \eta \nabla \tilde{w}_s . \nabla \tilde{w}_r dxdy, \end{aligned}$$

où s est le numéro global de M_k^i (c'est-à-dire $M_k^i = M_s$). Ainsi, pour calculer AV, on peut penser à procéder de la manière suivante

   — faire une boucle sur tous noeuds intérieurs : $k = 0, \cdots, I-1$,

   — pour calculer $(AV)_k$, faire une autre boucle sur les triangles voisins - ceux dont M_k^i est sommet- et une boucle sur les noeuds de ces triangles (on peut stoker auparavant pour chaque noeud intérieur M_k^i les numéros de triangles qui le contiennent).

Une solution bien plus simple (qu'on pourrait adopter ici), consiste à procéder par une boucle sur les triangles. Revenons sur la formule ci-dessus

$$(AV)_k = \sum_{T \in \mathscr{T} | M_s \in T} \ \sum_{r | M_r \in T} \tilde{v}_r \int_T \eta \nabla \tilde{w}_s . \nabla \tilde{w}_r dxdy$$

Soit T un triangle quelconque du maillage. Il contribue au maximum à trois composantes de AV. Si on suppose que ses trois sommets sont intérieurs, ce triangle contribue aux composantes $(AV)_{k_1}$, $(AV)_{k_2}$ et $(AV)_{k_3}$ où k_1, k_2 et k_3 sont les numéros intérieurs de ses sommets. S'il a un sommet sur le bord, ce triangle ne contribue qu'à deux composante de AV. S'il a deux sommets sur le bord, il ne contribue qu'à une composante. Notons $v \in V_h$ la fonction associée au vecteur V :

$$v = \sum_{m=0}^{I-1} v_m w_m.$$

Soit M_k^i un sommet intérieur de T. La contribution (additive) du triangle T au terme $(AV)_k$, s'écrit.

$$\sum_{r|M_r \in T} \tilde{v}_r \int_T \eta \nabla \tilde{w}_s . \nabla \tilde{w}_r dxdy = \int_T \eta \nabla \tilde{w}_s . \nabla v dxdy.$$

Pour calculer cette contribution de T à $(AV)_k$, il faut donc faire une boucle sur ses sommets intérieures. On a l'algorithme :

. `function [W] = matvec(V, ...)`

. `prolonger V en un vecteur global VV (voir question précédente)`

. `Initialiser à zéro le vecteur WW (de taille` $(N+1) \times (M+1)$`)`

. `Pour t de 0 jusqu'à K-1 (boucle sur les numéros des triangles)`

. `Calculer la matrice` B_T `(du` t`-ème triangle)`

—— On commence ici la boucle sur les sommets M_k tel que T contribue a $(AV)_k$

. `Pour` i `de 0 jusqu'à 2 (boucle sur les sommets du triangle)`

. `s = TRG(t, i, ...) (numéro global du sommet)`

—— On commence ici le calcul de la contribution T a $(AV)_k$

. `res = 0`

. `Pour` j `de 0 jusqu'à 2 (boucle sur les sommets du triangle)`

. `r = TRG(t, j,....)`

. `PROD2 = ........ (=` $\int_T \eta \nabla \lambda_i . \nabla \lambda_j dxdy$`)`

`res = res + VV(r)*PROD2`

. `fin de boucle sur j`

—— fin du calcul de la contribution de T à $(AV)_k$

. `Incrémenter` $WW(s)$: $WW(s) = WW(s) + res$

. `fin de boucle sur i`

. `fin de boucle sur t`

. W = IntVec(WW,...)

. `fin de la fonction`

Ecrire une fonction `matvec` ayant comme paramètre d'entrée un vecteur V quelconque de taille I (ainsi que d'autres paramètres d'entrée nécessaires pour le calcul) et renvoyant à la sortie le vecteur $W = AU$.

8. On s'intéresse maintenant au calcul du second membre B. On a

$$b_k = \sum_{T \mid M_k^i \in T} \int_T f(x,y) w_k(x,y) dxdy.$$

Pour calculer l'intégrale à droite sur T, on peut effectuer le changement de variable $(x,y) = F_T(\widehat{x}, \widehat{y})$ pour la ramener à $\widehat{T}$. Ainsi, la formule de changement de variables donne

$$\int_T f(x,y) w_k(x,y) dxdy = |\det(B_T)| \int_{\widehat{T}} f(F_T(\widehat{x},\widehat{y})) w_k(F_T(\widehat{x},\widehat{y})) d\widehat{x} d\widehat{y}.$$

Si de plus F_T est choisie telle que $F_T(0,0) = M_k^i$, alors $w_k(F_T(\widehat{x}, \widehat{y})) = \widehat{\lambda}_0(\widehat{x}, \widehat{y})$.
Pour calculer une intégrale sur $\widehat{T}$, on peut utiliser des formules de quadrature comme celles expliquée auparavant.
En utilisant une de ces formules de quadrature, écrire une fonction `scdmembre` ayant comme paramètre d'entrée une fonction `rhsf` représentant f (ainsi que d'autres paramètres d'entrée nécessaires pour le calcul), et renvoyant à la sortie le vecteur B (ou plutôt une approximation de ce vecteurs puisque les formules de quadrature ne sont pas toujours exactes). On pourra adopter ici aussi un balayage *sur les triangles* (et non sur les noeuds) comme dans le produit matrice-vecteur. Ainsi, pour chaque triangle T, on calcule sa contribution aux trois termes b_k correspondant à ses sommets intérieurs (ou moins que trois termes si le triangle touche le bord).

9. On voudrait aussi savoir calculer la norme $L^2(\Omega)$ de ∇v, pour tout $v \in V_h$. Soit $v = \sum_{k=0}^{I_1} v_k w_k$ et posons $V = (v_0, \cdots, v_{I-1})^t \in \mathscr{M}_{I,1}(\mathbb{R})$. On note que

$$\|\nabla v\|_{L^2(\Omega)}^2 \left(:= \int_\Omega |\nabla v(x,y)|^2 dxdy \right) = V^t A_0 V,$$

où A_0 est la matrice A quand $\eta = 1$.
Ecrire une fonction `normL2Grad` ayant comme paramètre d'entrée principal un tableau V de taille I et renvoyant en sortie la norme $\|\nabla v\|_{L^2(\Omega)}$ (on peut évidemment employer une fonction analogue à `matvec` mais avec $\eta = 1$).

10. On voudrait aussi évaluer la norme L^2 d'un élément $v \in V_h$ quelconque. Soit $v = \sum_{k=0}^{I-1} v_k w_k$ et $V = (v_0, \cdots, v_{I-1})^t \in \mathscr{M}_{I,1}(\mathbb{R})$. Montrer que

$$\|v\|_{L^2(\Omega)}^2 \left(:= \int_\Omega v(x,y)^2 dxdy \right) = \sum_{T \in \mathscr{T}} \sum_{s=0}^{2} \sum_{j=0}^{2} \tilde{v}_{m(s)} \tilde{v}_{m(j)} \int_T \lambda_s(x,y) \lambda_j(x,y) dxdy,$$

où pour tout $0 \leqslant s \leqslant 2$, $m(s)$ désigné le numéro *global* du noeud s du triangle T tandis que $(\tilde{v}_0, \cdots, \tilde{v}_{G-1})$ désignent les composantes du vecteur $\tilde{V}$ prolongeant V.

11. Ecrire une fonction `normL2` ayant comme paramètre d'entrée principal un tableau V de taille I et renvoyant en sortie la norme $\|v\|_{L^2(\Omega)}$.

4 Inversion du système : méthode du gradient conjugué

On considère le système linéaire $AX = B$ ci-dessus. On rappelle que A est symétrique définie positive. On définit la fonction à valeurs réelles $G(Y) = \frac{1}{2} Y^T AY - B^T Y$.

1. Montrer X est solution de $AX = B$ si et seulement si $G(Y) \geqslant G(X)$ pour tout $Y \in \mathscr{M}_{I,1}(\mathbb{R})$.
2. On aimerait résoudre le système $AX = B$ avec l'algorithme dit de gradient conjugé qui consiste à construire d'une part une famille de vecteurs $Y_0, Y_1, Y_2, \cdots$, deux à deux conjuguées par rapport à la matrice A (i. e. $Y_k^T AY_m = \delta_{k,m}$ pour tous k et m), et d'autre part de calculer les points X_k, $k \geqslant 1$, comme solutions des problèmes d'optimisation :

$$\min_{X \in W_k} G(X) \text{ où } W_k = X_0 + \text{vect}\{Y_0, ..., Y_{k-1}\}. \tag{5}$$

Ainsi, pour tout $k \geqslant 0$, X_k s'écrit sous la forme $X_k = X_0 + \sum_{i=0}^{k-1} \lambda_i Y_i$.
Le dernier élément X_I minimise G sur W_I qui est forcément $\mathscr{M}_{I,1}(\mathbb{R}) \equiv \mathbb{R}^I$ tout entier. Plus exactement, les couples (X_k, Y_k) sont calculés par récurrence de la manière suivante :

$$Y_0 = -\nabla G(X_0), \; X_{k+1} = X_k + \lambda_k Y_k, \; Y_{k+1} = -\nabla G(X_{k+1}) + \beta_k Y_k, \text{ pour } k \geqslant 0,$$

où le coefficient λ_k réalise le minimum de $G(X_k + \lambda Y_k)$, c'est-à-dire

$$\lambda_k = -\frac{\nabla G(X_k)^T.Y_k}{Y_k^T A Y_k}, \tag{6}$$

tandis que β_k est choisi pour assurer la conjugaison de Y_{k+1} et Y_k par rapport à A :

$$\beta_k = \frac{\nabla G(X_{k+1})^T A Y_k}{Y_k^T A Y_k}. \tag{7}$$

On peut alors montrer que les directions Y_k, $k = 0, 1, ...$ sont deux à deux conjuguées par rapport à A et que les gradients $\nabla G(X_k)$ sont deux à deux orthogonaux. On montre aussi que si l'optimum n'est pas atteint à la k-ème itération ($\nabla G(X_k) \neq 0$), alors

$$\lambda_k = \frac{\|\nabla G(X_k)\|^2}{Y_k^T A Y_k}, \ \beta_k = \frac{\|\nabla G(X_{k+1})\|^2}{\|\nabla G(X_k)\|^2}. \tag{8}$$

Un avantage remarquable de la méthode du gradient conjugué est qu'elle ne nécessite pas de stoker la matrice A explicitement. **Il suffit en effet d'écrire une programme qui, ayant un vecteur V quelconque comme entrée, renvoie le produit matrice vecteur AV.** Écrire sous un programme qui utilise la méthode de gradient conjugué pour résoudre le système $AX = B$ ci-dessus (et qui utilise la fonction produit matrice-vecteur ci-dessus).

5 Tests numériques

On choisit dans les tests $a = b = 1$ et $\eta(x, y) = 2 - \sin(x + 2y)$.

1. Visualiser le maillage de Ω pour $N = 10$ et $M = 14$.
2. On pose désormais $h_1 = \frac{2a}{N}$, $h_2 = \frac{2b}{M}$, $h = \max(h_1, h_2)$. Soit $v_h \in V_h$ et $(x, y) \in \Omega$ quelconque. On souhaite évaluer en pratique $v_h(x, y)$. On pose

   $$i = E[(x + a)/h_1], \ j = E[(y + b)/h_2] \text{ (où } E[r] \text{ désigne la partie entière de } r).$$

   Montrer que $i \leqslant N - 1$, $x_i \leqslant x < x_{i+1}$, $j \leqslant M - 1$ et $y_j \leqslant x < y_{j+1}$. En déduire que $(x, y) \in T_\ell$ ou $(x, y) \in T_{\ell+1}$ avec $\ell = 2jN + 2i$.
3. On considère le cas où la solution est $u(x, y) = \sin(k_0 \pi x) \sin(k_0 \pi y)$, avec k_0 un entier naturel.
   (a) Calculer le second membre f dans ce cas.
   (b) On note u_h la solution de (4) et $\hat{u}_h$ l'interpolé de la solution exacte u dans V_h, c'est-à-dire

   $$\hat{u}_h(x, y) = \sum_{k=0}^{I-1} u(M_k^i) w_k(x, y), \ (x, y) \in [-a, a] \times [-b, b].$$

   Ecrire une fonction `erreurs` ayant comme paramètres d'entrée la fonction `solExa` (qui renvoie la valeur de la solution exacte en tout point (x, y)), la solution approchée u_h et qui renvoie les trois erreurs relatives

   $$e_0(h) = \frac{\|\hat{u}_h - u_h\|_{L^2(\Omega)}}{\|\hat{u}_h\|_{L^2(\Omega)}}, e_1(h) = \frac{\|\nabla \hat{u}_h - \nabla u_h\|_{L^2(\Omega)}}{\|\nabla \hat{u}_h\|_{L^2(\Omega)}}, \ e_\infty(h) = \frac{\|\hat{u}_h - u_h\|_\infty}{\|\hat{u}_h\|_\infty}.$$

   (c) Etudier le comportement de ces erreurs en fonction de h (on peut choisir $M = N$ et calculer ces erreurs pour plusieurs valeurs de N, et donc de h, puis observer par exemple le comportement de $\log(e_i(h))$ en fonction de $\log(h)$).
   Remarque : $\|u_h\|_\infty := \sup_{0 \leqslant k \leqslant I-1} |u_h(M_k^i)|$.
   (d) Etudier le comportement de ces erreurs quand k_0 augmente de 1 à $4N$ (on peut fixer N, par exemple $N = 100$ ou $N = 200$, et tester pour une dizaine de valeurs de k_0).