Estimation a posteriori pour des problèmes elliptiques

En plus du rapport écrit, il faudra envoyer à votre chargé de TD tous les codes et les maillages, de façon à que les codes puissent être exécutés sans besoin d'intervention et qu'ils renvoient les résultats qui auront été décrits dans le rapport. Merci de spécifier si vous avez utilisé Matlab ou Octave.

On s'intéresse dans ce TP à l'évolution de la température dans une pièce supposée bidimensionnelle, contenant des bureaux/objets/personnes (la conductivité n'est donc pas constante), soumise à une source de chaleur avec des conditions aux bords de Dirichlet (la température est fixée).

Une fois la méthode des éléments finis mise en place, nous aurons un moyen de calculer des solutions approchées à ce problème, et nous nous attacherons à estimer la qualité des solutions trouvées. Nous développerons notamment un estimateur *a posteriori*, permettant d'analyser la qualité de la solution approchée sans avoir besoin de connaître la solution exacte du problème.

Exercice 1. Problème stationnaire avec coefficients variables et conditions de Dirichlet

Soit Ω un ouvert borné à frontière polygonale de \mathbb{R}^2 . On s'intéresse au calcul de la température $T \equiv T(x, y)$, solution de l'équation de la chaleur en régime stationnaire, avec condition aux limites de Dirichlet :

Trouver $T \in H^1(\Omega)$ telle que

(1)
$$\begin{cases} \alpha T - \operatorname{div}(\lambda \nabla T) = S & \operatorname{dans} \Omega \\ T = T_{\Gamma} & \operatorname{sur} \partial \Omega \end{cases}.$$

Les paramètres α et λ sont tels que α est une constante strictement positive, et la conductivité λ : $\Omega \to \mathbb{R}$ est une fonction régulière par morceaux, et

$$\exists \lambda_{max}, \lambda_{min} > 0, \qquad \lambda_{min} \leq \lambda(x, y) \leq \lambda_{max}, \qquad \text{presque pour tout } (x, y) \in \Omega.$$

Les données sont la source de chaleur $S \in L^2(\Omega)$, et la température fixée au bord T_{Γ} , supposée constante.

1.1 - En exprimant la température T sous la forme $T(x,y) = T_{\Gamma} + u(x,y)$, (x,y) parcourant $\overline{\Omega}$, montrer que la nouvelle inconnue u est solution du problème $Trouver\ u \in H^1(\Omega)\ telle\ que$

(2)
$$\begin{cases} \alpha u - \operatorname{div}(\lambda \nabla u) = f & \operatorname{dans} \Omega \\ u = 0 & \operatorname{sur} \partial \Omega \end{cases},$$

2

en précisant la valeur du second membre f.

1.2 - Rappeler la formule d'intégration par parties avec la divergence, et vérifier que la formulation variationnelle du problème (2) s'écrit : Trouver $u \in H_0^1(\Omega)$ telle que

(3)
$$\alpha \int_{\Omega} uv \, d\Omega + \int_{\Omega} \lambda \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega = \int_{\Omega} fv \, d\Omega, \qquad \forall v \in H_0^1(\Omega).$$

1.3 - Montrer que la formulation variationnelle est bien posée.

Discrétisation:

Soit \mathcal{T}_h une triangulation du domaine Ω , et V_h l'approximation de $H^1(\Omega)$ par des éléments finis P^1 associés à la triangulation \mathcal{T}_h . On note $(T_\ell)_{\ell=1,L}$ les triangles de \mathcal{T}_h , $(M_I)_{I=1,N}$ les sommets des triangles et $(w_I)_{I=1,N}$ la base de V_h définie par $w_I(M_J) = \delta_{IJ}$, $1 \leq I, J \leq N$. Pour définir une approximation interne de $H^1_0(\Omega)$, on procède de la façon suivante : on suppose que les nœuds de la frontière $\partial\Omega$ sont numérotés de N_0+1 à N (et que les nœuds à l'intérieur sont numérotés de 1 à N_0). On introduit :

$$V_h^0 = \operatorname{Vect}(w_1, \dots, w_{N_0}).$$

Par construction, $V_h^0 \subset H_0^1(\Omega)$.

- 1.4 Quelle est la formulation variationnelle discrète vérifiée par la solution approchée u_h ? Exprimer la température approchée T_h en fonction de u_h .
- 1.5 La solution approchée u_h s'écrit sous la forme

$$u_h(x,y) = \sum_{I=1}^{N_0} u_h(M_I) w_I(x,y), \quad \forall (x,y) \in \overline{\Omega}.$$

Exprimer la formulation variationnelle discrète sous la forme d'un système linéaire équivalent :

$$\mathbb{A}^0 \vec{U}^0 = \vec{L}^0,$$

où la $I^{\text{ème}}$ composante du vecteur $\vec{U}^0 \in \mathbb{R}^{N_0}$ vaut $u_h(M_I)$ et où on écrira $\mathbb{A}^0 = \alpha \, \mathbb{M}^0 + \mathbb{K}^0$, avec \mathbb{M}^0 la matrice de masse, et \mathbb{K}^0 la matrice de rigidité. Quelles sont les propriétés fondamentales de la matrice \mathbb{A}^0 ?

1.6 - Dans la pratique, plutôt que de résoudre le système linéaire (4), on préfère résoudre

$$\widetilde{\mathbb{A}}\vec{U} = \widetilde{\vec{L}},$$

obtenu à l'aide de la technique de pseudo-élimination. Rappeler les expressions de $\widetilde{\mathbb{A}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, $\vec{U} \in \mathbb{R}^N$ et $\widetilde{\vec{L}} \in \mathbb{R}^N$ en fonction de \mathbb{A}^0 , \vec{U}^0 et \vec{L}^0 .

Avant d'effectuer la pseudo-élimination, nous allons donc calculer les matrices élémentaires et assembler les matrices $\widetilde{\mathbb{A}}$ et $\widetilde{\vec{L}}$.

Géométrie et maillages:

On veut résoudre le problème dans un ouvert Ω carré composé de deux zones Ω_1 et Ω_2 .

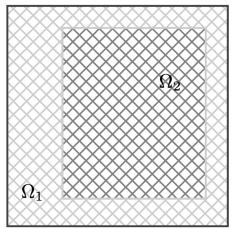


FIGURE 1 – Le domaine $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$

On appelle $\lambda_1 = \lambda \big|_{\Omega_1}$ et $\lambda_2 = \lambda \big|_{\Omega_2}$ les restrictions de λ à chacun des sous-domaines. C'est lors du calcul des matrices élémentaires qu'il faudra distinguer si un triangle est dans le domaine Ω_1 (dans ce cas, on prendra $\lambda = \lambda_1$) ou dans le domaine Ω_2 (dans ce cas, on prendra $\lambda = \lambda_2$).

Calcul des matrices élémentaires par passage à l'élément fini de référence :

On se place sur un triangle T_{ℓ} . Pour calculer les matrices élémentaires associées à ce triangle, nous allons utiliser une méthode de calcul, plus générale que les coordonnées barycentriques. Pour calculer les intégrales volumiques sur le triangle T_{ℓ} (composé des points M_1 , M_2 et M_3), on se ramène tout d'abord au triangle de référence \hat{T} (composé des points $\hat{M}_1 = (0,0)$, $\hat{M}_2 = (1,0)$ et $\hat{M}_3 = (0,1)$).

1.7 - Calculer la transformation $\mathcal{F}_{\ell}: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$

$$\forall \hat{M} \in \mathbb{R}^2, \ \mathcal{F}_{\ell}(\hat{M}) = \mathcal{B}_{\ell}\hat{M} + S_{\ell}, \ \mathcal{B}_{\ell} \in \mathcal{M}_2(\mathbb{R}), \ S_l \in \mathbb{R}^2$$

qui permet de passer du triangle de référence au triangle T_{ℓ} :

$$\forall i, \quad \mathcal{F}_{\ell}(\hat{M}_i) = M_i.$$

Les intégrales de masse sur T_l peuvent alors s'écrire

$$\int_{T_{\ell}} w_I(M) w_J(M) d\Omega = \int_{\hat{T}} \hat{w}_I(\hat{M}) \, \hat{w}_J(\hat{M}) |\det \mathcal{B}_{\ell}| \, d\hat{\Omega}$$

et de rigidité

$$\int_{T_{\ell}} \lambda(M) \nabla w_{I}(M) \cdot \nabla w_{J}(M) d\Omega =$$

$$\int_{\hat{T}} \lambda(\mathcal{F}_{\ell}(\hat{M})) \left[(\mathcal{B}_{\ell}^{T})^{-1} \hat{\nabla} \hat{w}_{I}(\hat{M}) \right] \cdot \left[(\mathcal{B}_{\ell}^{T})^{-1} \hat{\nabla} \hat{w}_{J}(\hat{M}) \right] |\det \mathcal{B}_{\ell}| d\hat{\Omega}.$$

- **1.8** Rappeler les expressions de \hat{w}_1 , \hat{w}_2 et \hat{w}_3 . En déduire le calcul de la matrice de masse élémentaire.
- 1.9 Quand les coefficients sont variables, il n'est pas toujours possible de calculer ces intégrales exactement. On approche alors ces intégrales à l'aide de formules de quadratures dites à N_q points : pour G une fonction continue par morceaux de T_ℓ

$$\int_{\hat{T}} G \, d\Omega \simeq \sum_{q=1}^{N_q} \omega^q G(\hat{S}^q).$$

où \hat{S}^q sont des points de quadrature dans \hat{T} et ω^q les poids positifs associés aux points de quadrature. Il existe de nombreux points de quadrature (Gauss-Legendre, Gauss-Lobatto,...) qui fournissent des approximations des intégrales. Ces méthodes se différencient par le fait qu'elles intègrent exactement les polynômes d'un ordre donné, ce qui caractérise leur précision. On utilisera ici la formule de quadrature à 3 points de Gauss Legendre qui est d'ordre 2 et qui est définie sur le triangle de référence \hat{T} par

$$\begin{vmatrix} \hat{S}^q \\ \hat{\omega}^q \end{vmatrix} \begin{vmatrix} (s_0, s_0) \\ \omega_0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} (s_1, s_0) \\ \omega_0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} (s_0, s_1) \\ \omega_0 \end{vmatrix}$$

avec

$$s_0 = \frac{1}{6}$$
, $s_1 = \frac{2}{3}$ et $\omega_0 = \frac{1}{6}$.

À l'aide de ces éléments, modifier le calcul de la matrice de rigidité élémentaire. Il faudra modifier la routine matk_elem.m, en prenant comme argument supplémentaire le tableau Reftri pour déterminer à quelle zone chaque triangle appartient. En fonction de la zone, on utilisera les fonctions lambdal.m et lambdal.m, que vous pouvez modifier.

1.10 - Valider le calcul pour un triangle quelconque dans le cas $\lambda=1$ en comparant au calcul de la matrice élémentaire du TP précédent.

Assemblage des matrices et vecteur second membre :

La routine principal_chaleur.m est le programme principal pour résoudre le problème (5), ce qui permet de calculer la température aprochée T_h .

- 1.11 Reprendre la partie assemblage du TP précédent, permettant de construire la matrice $\mathbb{A} = \alpha \mathbb{M} + \mathbb{K}$ et le vecteur \vec{L} , avant la pseudo-élimination. Comme au TP précédent, pour une donnée $f \in \mathcal{C}^0(\overline{\Omega})$, le vecteur \vec{L} sera construit à l'aide d'une technique d'interpolation.
- 1.12 Ecrire une routine matlab dont la syntaxe est

qui réalise la pseudo-élimination des nœuds i correspondant à Refneu(i)=1. Insérer un appel à cette routine à un endroit approprié dans principal_chaleur.m.

Validation du code:

On veut vérifier que le code calcule une solution approchée u_h correcte. Pour cela, on résout le problème (2) avec les paramètres

$$\alpha = 1, \ \lambda_1 = 1, \ \lambda_2 = 1,$$

et une solution u égale à $u(x,y) = \sin(\pi x) \sin(2\pi y)$, pour $(x,y) \in \overline{\Omega}$.

- 1.13 Calculer la donnée f correspondante et modifier la routine f.m.
- 1.14 En assimilant u à son interpolée $\pi_h u$ donner une estimation de la norme L^2 de l'erreur, $||u-u_h||_{L^2(\Omega)}$, faisant intervenir la matrice de masse \mathbb{M}^0 . Même question pour la semi-norme H^1 de l'erreur, $||u-u_h||_{H^1(\Omega)}$, qu'on estimera par un calcul faisant intervenir la matrices de rigidité \mathbb{K}^0 .

On appelle "estimateur a priori" tout résultat de la forme :

$$(6) ||u - u_h|| \le Ch^q$$

où $\|.\|$ est une norme, C une constante, h la taille des éléments du maillage et q un réel.

1.15 - Compléter la partie "Validation" du fichier principal_chaleur.m. pour calculer la norme L^2 et la norme H^1 de l'erreur. En faisant varier la taille des éléments h, et après s'être assuré que le maillage est régulier (taille d'éléments constante partout), déterminer une approximation des coefficients C et q caractérisant la convergence d'une part en norme L^2 et d'autre part en norme H^1 . Ceci est-il cohérent avec les résultats du cours?

Résolution numérique:

On choisit les valeurs suivantes pour les paramètres et données :

$$\alpha = 1$$
, $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 10$, $T_{\Gamma} = 290$, $S(x, y) = 290 + 50 \chi \left(\frac{x - 1}{0.3}\right) \chi \left(\frac{y - 1}{0.2}\right)$,

où l'on a noté χ la fonction indicatrice de l'intervalle [-1,1].

1.16 - Résoudre le problème discret et représenter la température approchée T_h . Donner sa valeur maximale. Quel phénomène observe-t-on dans Ω_2 ?

On change maintenant λ_1 (toutes les autres données restant inchangées par rapport à la question précédente) :

$$\lambda_1(x, y) = 1.01 + \sin(2\pi y).$$

- 1.17 Résoudre le problème discret et représenter la température approchée T_h . Donner sa valeur maximale. Que peut-on observer?
- 1.18 D'après vous, est-il possible de valider la qualité de la solution approchée obtenue? Quelles en seraient les difficultés?

Exercice 2. Estimation d'erreur a posteriori

Nous nous intéressons dans cet exercice aux estimateurs a posteriori qui, contrairement aux estimateurs a priori, ne font intervenir que des quantités calculables à partir de la connaissance d'une solution approchée du problème (plutôt que la solution exacte du problème non discrétisé). On va ici implémenter un exemple simple d'estimateur d'erreur a posteriori basé sur une méthode dite de lissage. Il existe d'autres estimateurs a posteriori plus complexe et plus précis ¹.

Afin de simplifier les calculs, nous nous plaçons désormais dans le cas décrit par les données suivantes :

$$\alpha = 1$$
, $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$, $T_{\Gamma} = 0$.

Flux approché:

On note $\vec{\sigma} = -\nabla u$ le flux thermique. Le problème (1) peut se ré-écrire sous la forme :

^{1.} Vohralík, «A Posteriori Error Estimates for Efficiency and Error Control in Numerical Simulations».

Trouver $u \in H_0^1(\Omega)$ et $\vec{\sigma} \in H(\Omega, div)$ tels que :

(7)
$$\begin{cases} \vec{\sigma} = -\nabla u & \text{dans } \Omega \\ u + div(\vec{\sigma}) = f & \text{dans } \Omega \end{cases}$$

où l'on a noté $H(\Omega, div) = \left\{ \vec{v} \in \left(L^2(\Omega)\right)^2 \quad \text{tel que} \quad div(\vec{v}) \in L^2(\Omega) \right\}.$

En partant de $u_h \approx u$, nous allons construire une approximation $\vec{\sigma}_h \approx \vec{\sigma}$. On s'intéresse dans un premier temps à l'approximation de ∇u_h .

- **2.1** Comment varie u_h sur un élément? En déduire à quel espace appartient ∇u_h . Le couple $(u_h, \nabla u_h)$ peut-il être considéré comme une solution approchée de (7)?
- 2.2 Compléter la fonction $grad_elem.m.$ pour calculer le gradient des fonctions de base sur un triangle. En déduire une manière de calculer le flux thermique élément fini ∇u_h triangle par triangle; compléter le calcul réalisé dans le fichier $principal_chaleur.m$ (ligne 84). Ce flux sera stocké dans un tableau à deux colonnes (composante x et composante y) et n0 btri lignes (une ligne par triangle).

On s'intéresse maintenant à la construction d'un flux approché mais régulier : $\sigma_h \approx -\nabla u_h$, avec $\sigma_h \in H(\Omega, div)$. Une manière de construire un tel flux consiste à "lisser" ∇u_h par moyennage sur chaque "patch" de la triangulation :

(8)
$$\sigma_h(M_I) = \frac{1}{N_I} \sum_{l:M_I \in T_l} (-\nabla u_h)_{|T_l},$$

où l'on a noté N_I le nombre de triangles dans le "patch" associé au sommet I, c'est à dire l'ensemble des triangles ayant M_I pour sommet (cf. fig. 2).

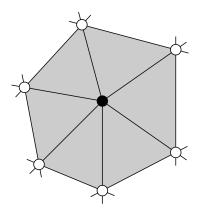


FIGURE 2 – Patch associé à un noeud intérieur. La détermination de la valeur du flux "lissé" σ_h au point (\bullet) fait intervenir la valeur de ∇u_h dans chacun des triangles grisés.

2.3 - En prenant modèle sur l'algorithme d'assemblage de la question **1.11**, implémenter dans le fichier moyenne_par_patch.m une fonction qui, à partir d'un champ constant par maille $v \in P^0(\mathcal{T}_h) = \{v \in L^2(\Omega) \text{ t.q. } \forall l, v_{|T_l} \text{ est constante}\}$, calcule sa valeur moyenne par patch \overline{v} définie par :

$$\overline{v} \in V_h = P^1(\mathcal{T}_h)$$
 et $\forall I, \overline{v}(M_I) = \frac{1}{N_I} \sum_{l: M_I \in T_l} v_{|T_l}.$

Indication: on pourra remarquer que

$$N_I = \sum_{l; M_I \in T_l} 1.$$

On a ainsi

$$\sigma_h = - \left(\begin{array}{c} \overline{\frac{\partial u_h}{\partial x}} \\ \overline{\frac{\partial u_h}{\partial y}} \end{array} \right)$$

ce qui correspond à l'implémentation déjà fournie dans le fichier principal_chaleur.m. (lignes 91-92).

- **2.4** Valider le calcul de σ_h en étudiant l'évolution de $\|\sigma_h + \nabla u\|_{L^2}$ en fonction de h. On pourra reprendre la solution de référence utilisée pour la validation du calcul de u_h aux questions 1.13–1.15.
- **2.5** Visualiser les quantités $|u-u_h|$ et $|\sigma_h| = \sqrt{\sigma_{h,x}^2 + \sigma_{h,y}^2}$. Que peut-on observer? Pourquoi?
- **2.6** A quel espace appartient σ_h ? Le couple (u_h, σ_h) peut-il être considéré comme une solution approchée de (7)? Si oui, comment estimer la qualité de cette approximation?

Estimateur d'erreur:

Pour chaque triangle $T_l \in \mathcal{T}_h$, on définit la composante en résidu de l'estimateur :

(9)
$$\eta_{R,l} := \frac{D_{\Omega}}{\pi} \| \overrightarrow{\sigma_h} + \nabla u_h \|_{L^2(T_l)},$$

ainsi que la composante en flux :

(10)
$$\eta_{F,l} := \|f - div(\overrightarrow{\sigma_h}) - u_h\|_{L^2(T_l)},$$

où l'on attire l'attention sur le fait que les normes sont prises sur le triangle T_l et non le domaine complet Ω . Dans les équations ci-dessus, D_{Ω} désigne le diamètre du domaine de calcul.

Un estimateur d'erreur a posteriori est donné par :

(11)
$$\eta_h := \left\{ \sum_{T_l \in \mathcal{T}_h} \eta_{R,l}^2 \right\}^{1/2} + \left\{ \sum_{T_l \in \mathcal{T}_h} \eta_{F,l}^2 \right\}^{1/2},$$

pour lequel on peut montrer le résultat suivant (que l'on admettra dans le cadre de ce TP) :

2.7 - En prenant modèle sur l'algorithme d'assemblage, et en réutilisant les matrices élémentaires déjà construites, compléter le calcul de l'estimateur η_h et de ses différentes composantes dans le fichier principal_chaleur.m. (lignes 120–140).

On réalise maintenant un calcul pour lequel la solution de référence n'est pas connue analytiquement :

$$\alpha = 1$$
, $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 1$, $T_{\Gamma} = 0$, $S(x, y) = 50 \chi \left(\frac{x - 0.4}{0.2}\right) \chi \left(\frac{y - 1.4}{0.15}\right)$,

Afin de pouvoir mesurer la validité de notre estimateur a posteriori, on se dote d'une solution "de référence", supposée proche de la solution exacte car obtenue par calcul sur un maillage très fin (h=0.01). Pour éviter d'avoir à exécuter de tels calcul ultra-convergés, nous vous proposons de récupérer des résultats de référence déjà calculés à l'url :

https://perso.ensta-paris.fr/~fevotte/ann201/

Le fichier ref.mat téléchargeable à cette adresse contient une solution de référence pré-calculée, qui peut être lue grâce à la fonction lecture_reference fournie avec les sources de ce TP.

2.8 - Dans la partie "Validation" du fichier principal_chaleur.m, décommenter le paragraphe permettant de lire la solution de référence. Faire varier le pas de discrétisation h et étudier l'évolution des quantités $||u_{ref} - u_h||_{H^1}$ et η_h . L'inégalité (12) est-elle bien vérifiée? Discuter des mérites comparés des estimateurs a priori et a posteriori.

Adaptation de maillage:

A partir de l'estimation d'erreur calculée, on peut chercher à déterminer un maillage "optimal" qui produirait une erreur constante dans chaque triangle. On peut par exemple re-générer un maillage dont le pas \tilde{h} varie selon une relation du type :

(13)
$$\tilde{h} = \frac{\alpha h}{\eta_h},$$

où $\alpha \in \mathbb{R}$ est une constante permettant d'ajuster la précision ciblée.

- **2.9** En combinant les estimations a priori (6) avec l'analyse a posteriori (12), commenter l'équation (13).
- 2.10 Après avoir pris soin de positionner la variable raffinement à la valeur 'oui', relancer une simulation pour h=0.1. Ceci devrait génerer le fichier size.pos contenant des préconisations de pas de maillage. Re-générez un maillage optimisé en lançant gmsh de la manière suivante :

gmsh -bgm size.pos geomChaleur.geo

Visualiser et commenter le maillage généré.

- 2.11 Re-lancer le calcul pour prendre en compte le nouveau maillage. Comment ce dernier calcul se compare-t-il aux précédents, en termes de qualité de résultat par rapport à la quantité de calculs? (Indication : le nombre de sommets du maillage étant un bon indicateur de la quantité de calculs à réaliser, on pourra par exemple représenter les courbes de convergence en prenant Nbpt comme abscisse au lieu de h).
- **2.12** Commenter l'intérêt de l'adaptation de maillage, en particulier dans un contexte industriel.