Estimation d'erreur a posteriori

Sujet proposé par O. Pantz `olivier.pantz@polytechnique.org`

Objectif

La grande majeure partie des équations aux dérivées partielles issues de la physique n'ont pas de solutions explicites et ne peuvent de ce fait qu'être résolue de manière approchées. Dans le cours, on introduit à cet effet la méthode des éléments finis, et on montre que la solution approchée converge vers la solution de l'équation lorsque la taille du maillage tend vers zéro. Par ailleurs, on peut estimer la vitesse de converge de la solution en fonction de la régularité de la solution ainsi que du type d'éléments finis utilisés. Cependant, on obtient ainsi uniquement un ordre de convergence, ce qui ne nous permet pas de déterminer l'erreur réalisée pour un maillage donné. De telles estimations sont qualifiées de *a priori*, car elle ne dépendent pas de la solution approchée calculée. A contrario, les estimations *a posteriori*, basées sur la solution discrétisée obtenue, permettent de majorer l'erreur de discrétisation de manière explicite.

Travail demandé

Il sera demandé de réaliser différentes simulations numériques et de répondre à un certain nombre de questions théoriques. Une première analyse sera effectuée en dimension 1 sous `scilab` puis en dimension 2 sous `FreeFem++`. Le rapport devra contenir outre les résultats des applications numériques demandées (en utilisant les valeurs des paramètres fournis) une description complète des schémas implémentés. Chaque script fourni en complément du rapport écrit devra contenir des commententaires détaillés, leur utilisation et leur fonction décrits dans le rapport écrit. Les scripts devront être écrits de sorte à pouvoir être utilisés pour n'importe quel jeu de paramètres (et non uniquement ceux proposés à titre d'application par l'énoncé). Les scripts ne doivent pas être inclus dans le rapport écrit, mais envoyé par email (avec une version pdf du rapport). Il est fortement encouragé de rédiger le rapport à l'aide de LaTeX. Les résultats théoriques pourront être admis dans un premier temps afin d'avancer sur la partie numérique et abordés dans un second temps en fonction de l'avancement du cours. En ce qui concerne les scripts `scilab`, il est rappelé qu'il est ABSOLUMENT nécessaire d'utiliser la nature creuse des systèmes. Il très fortement déconseillé de manipuler des matrices pleines.

Position du problème

Soit Ω un ouvert régulier borné de $\mathbb{R}^n$ $(n = 2, 3)$, $f \in L^2(\Omega)$, $k, \alpha > 0$. On considère l'équation aux dérivées partielles

$$\begin{cases} -\nabla \cdot k\nabla u + \alpha u = f & \text{dans } \Omega \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \tag{1}$$

On rappelle que la formulation variationnelle associée à cette équation aux dérivées partielles consiste à déterminer $u \in V := H^1_0(\Omega)$ tel que pour tout $v \in V$,

$$\int_\Omega k\nabla u \cdot \nabla v + \alpha uv \, dx = \int_\Omega fv \, dx.$$

Afin de déterminer une approximation numérique de u, on utilise une méthode de type Galerkin (voir cours 6.1.3). En d'autres termes, on considère un sous espace V_h de dimension fini de V et on note u_h l'élément de V_h tel que pour tout $v_h \in V_h$,

$$\int_\Omega k\nabla u_h \cdot \nabla v_h + \alpha u_h v_h \, dx = \int_\Omega f v_h \, dx.$$

On introduit alors l'erreur d'approximation $e_h = u_h - u$. D'après le cours (section 6.3.13), on connaît certaines estimations a priori. En particulier si on utilise la méthode des éléments finis P_1 de Lagrange, il existe une constante C indépendante de f telle que si le potentiel u est régulier et h est la taille du maillage (supposé régulier) de Ω, on a

$$\|e_h\|_V \leq Ch\|u\|_{H^2},$$

où on note $\|\cdot\|_V$ la norme d'énergie, c'est à dire

$$\|v\|_V = \left(\int_\Omega k\nabla v \cdot \nabla v + \alpha |v|^2 \, dx \right)^{1/2}.$$

Malheureusement, on ne connaît a priori pas la solution u. De ce fait, l'estimation précédente ne fournit qu'un ordre de grandeur de l'erreur. On souhaite majorer l'erreur par une quantité qui ne fait intervenir que des données connues ou calculables explicitement. Pour cela, on se propose d'utiliser le principe de l'énergie complémentaire (voir cours, section 10.4.1).

Question 1 - Estimation a posteriori. L'erreur d'approximation e_h est elle même solution d'un problème variationnel. En effet $e_h \in V$ est tel que pour tout $v \in V$,

$$\int_\Omega k\nabla e_h \cdot \nabla v + \alpha e_h v \, dx = \int_\Omega k\nabla u_h \cdot \nabla v + \alpha u_h v \, dx - \int_\Omega f v \, dx.$$

En utilisant le principe de l'énergie complémentaire à l'erreur e_h, montrer que (voir cours, section 4.4.2 pour la définition de $H(\mathrm{div})$)

$$\forall \sigma \in H(\mathrm{div}) := \{\tau \in L^2(\Omega)^n \text{ tel que } \nabla \cdot \tau \in L^2(\Omega)\},$$

$$\frac{1}{2}\|e_h\|_V^2 \leq -G_h(\sigma), \tag{2}$$

où

$$G_h(\sigma) = -\frac{1}{2}\int_\Omega k^{-1}|\sigma - k\nabla u_h|^2 \, dx - \frac{1}{2}\int_\Omega \alpha^{-1}|f - \alpha u_h + \nabla \cdot \sigma|^2 \, dx.$$

Question 2 - Approximation du flux. On cherche à optimiser le second membre de l'inégalité (2) sur un espace W_h. Plus précisément, on introduit $\sigma_h \in W_h \subset H(\mathrm{div})$ tel que

$$G_h(\sigma_h) = \max_{\tau \in W_h} G_h(\tau).$$

Montrer que $\sigma_h \in W_h$ est tel que pour tout $\tau \in W_h$,

$$\int_\Omega k^{-1}\sigma_h \cdot \tau \, dx + \int_\Omega \alpha^{-1}(f + \nabla \cdot \sigma_h)\nabla \cdot \tau \, dx = 0.$$

En déduire que σ_h est une approximation du flux $\sigma = k\nabla u$.

Cas Unidimensionnel

On considère le cas $\Omega = (0,1)$. On utilise une discrétisation de type éléments finis afin de déterminer une approximation u_h du potentiel u et approximation σ_h du flux σ. Plus précisément, on décompose le domaine Ω en $N+1$ intervalles (x_i, x_{i+1}) avec $i = 0, \cdots, N$ où $x_i = ih$ et $h = 1/(N+1)$.

On introduit l'espace V_h des éléments finis P_1 sur $(0,1)$ s'annulant sur le bord du domaine. Autrement dit,

$$V_h = \{v_h \in H_0^1(\Omega) \text{ tel que } v_h|_{(x_{i+1},x_i)} \in \Pi_1 \text{ pour tout } i = 0, \cdots, N\}$$

On munit V_h de la base d'éléments finis $(\phi_i)_{i=1,\cdots,N}$ définis par $\phi_i \in V_h$ et

$$\phi_i(x_j) = \delta_i^j, \text{ pour tout } j = 1, \cdots, N,$$

où δ_i^j est le symbole de Kronecker. Par ailleurs, on note U_h les coordonnées de la solution u_h de l'approximation de Galerkin de u sur V_h.

Question 3 - Conditions d'optimalité pour le potentiel. Montrer que U_h est solution du système linéaire

$$A_h U_h = b_h, \tag{3}$$

où A_h est la matrice $A_h = kh^{-1}K + \alpha h M$, avec

$$K = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}, M = \frac{1}{6}\begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 4 \end{pmatrix},$$

et

$$(b_h)_i = \int_{(i-1)h}^{ih} f(x)\frac{x-(i-1)h}{h}\,dx + \int_{ih}^{(i+1)h} f(x)\frac{(i+1)h - x}{h}\,dx.$$

Question 4 - Calcul du potentiel. Calculer numériquement la solution de (3) à l'aide de `scilab` pour une fonction f constante. Tracer le graphe de u. Application numérique : $N = 100$, $f = 1$, $k = 1$ et $\alpha = 1$.

On procède de manière similaire pour le calcul de l'approximation du flux $\Sigma \in \mathbb{R}^{N+1}$. On choisit comme espace d'approximation pour le flux σ_h l'ensemble des éléments finis P_1,

$$W_h = \{\sigma_h \in H^1(\Omega) \text{ tel que } v_h|_{(x_{i+1},x_i)} \in \Pi_1 \text{ pour tout } i = 0, \cdots, N\}$$

On munit W_h de la base des éléments finis $(\phi_i)_{i=0,\cdots,N+1}$ définis par $\phi_i \in W_h$ et

$$\phi_i(x_j) = \delta_i^j, \text{ pour tout } j = 0, \cdots, N+1$$

(à noter qu'on a les mêmes éléments finis de base pour $i = 1, \cdots, N$ que ceux utilisés pour V_h). On note Σ_h les coordonnées de σ_h, approximation de Galerkin de σ_h sur W_h.

Question 5 - Conditions d'optimalité pour le flux. Montrer que Σ_h est solution du système

$$B_h \Sigma_h = c_h, \tag{4}$$

où

$$B_h = k^{-1} h M' + \alpha^{-1} h^{-1} K',$$

avec

$$K' = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 2 & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}, M' = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 4 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 4 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix},$$

et

$$(c_h)_i = -(\alpha h)^{-1} \int_{(i-1)h}^{ih} f(x)\, dx + (\alpha h)^{-1} \int_{ih}^{(i+1)h} f(x)\, dx.$$

pour $0 < i < N$,

$$(c_h)_0 = (\alpha h)^{-1} \int_0^h f(x)\, dx \text{ et } (c_h)_{N+1} = -(\alpha h)^{-1} \int_{Nh}^1 f(x)\, dx.$$

Question 6 - Calcul du flux. Calculer numériquement la solution de (4) à l'aide de `scilab`. Tracer le graphe de σ_h en utilisant les mêmes valeur numériques qu'à la question précédente. On introduit l'epsace X_h des éléments finis P_1-discontinus, ensemble des fonctions sur $(0,1)$ dont les retrictions aux intervalles (x_i, x_{i+1}) sont affines (elles peuvent avoir des discontinuités aux noeuds x_i).

$$X_h = \left\{\tau_h : (0,1) \to \mathbb{R} \text{ tel que } \tau_h|_{(x_i,x_{i+1})} \in \Pi_1 \text{ pour tout } i = 0, \cdots, N\right\}.$$

On munit X_h de la base des $(\psi_k)_{k=0,\cdots,2N+1}$ définie pour tout $i = 0, \cdots, N$ et $k = 2i$ par

$$\psi_k|_{(x_i,x_{i+1})}(x_i) = 1, \qquad \psi_k|_{x_i,x_{i+1}}(x_{i+1}) = 0,$$

et $\psi_k(x) = 0$ pour $x \in (0,1) \setminus (x_i, x_{i+1})$ et pour $k = 2i+1$ par

$$\psi_k|_{(x_i,x_{i+1})}(x_i) = 0, \qquad \psi_k|_{(x_i,x_{i+1})} = 1,$$

et $\psi_k(x) = 0$ pour $x \in (0,1) \setminus (x_i, x_{i+1})$.

Question 7 - Discrétisation de l'opérateur d'injection V_h dans W_h. Montrer que la matrice I_V qui associe à U_h, coordonnées de u_h dans la base de V_h, ses coordonnées dans W_h est la matrice $(N+2) \times N$ de la forme

$$I_V = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathrm{Id} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Question 8 - Discrétisation de l'opérateur d'injection W_h dans X_h. Montrer que la matrice I_W qui associe à Σ_h, coordonnées de σ_h dans W_h, ses coordonnées dans X_h est la matrice $2(N+1) \times (N+2)$ de la forme

$$I_W = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & c & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & c & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ avec } c = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Remarque : Pour la construction des matrices blocs, on pourra utiliser la fonction `kron` ou l'opérateur `.*.` de `scilab`.

Question 9 - Discrétisation de l'opérateur gradient sur X_h. Soit v_h un élément de X_h et $\tau_h \in X_h$ défini pour tout $i = 0, \cdots, N$ par $\tau_h|_{(x_i,x_{i+1})} = \nabla v_h|_{(x_i,x_{i+1})}$. En notant V et T les coordonnées respectives de v_h et τ_h dans X_h, montrer que

$$T = D_h V,$$

où D_h est la matrice $2(N+1) \times 2(N+1)$

$$D_h = h^{-1} \begin{pmatrix} D & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & D \end{pmatrix} \text{ avec } D = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Question 10 - Discrétisation de l'opérateur de masse sur X_h. Soit τ_h un élément de X_h de coordonées T. Montrer que

$$\int_\Omega |\tau_h|^2 \, dx = N_h T \cdot T,$$

où

$$N_h = \frac{h}{6}\begin{pmatrix} N & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & N \end{pmatrix} \text{ avec } N = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Question 11 - Estimation d'erreur. Pour simplifier légèrement l'analyse, on suppose que $f \in X_h$. Soit F_h les coordonées de f dans X_h. Déduire de l'estimation (2) que

$$\begin{aligned} \|e_h\|_V \leq \frac{1}{2}\Big(& k^{-1} N_h (I_W \Sigma_h - k D_h I_W I_V U_h) \cdot (I_W \Sigma_h - k D_h I_W I_V U_h) \\ &+ \alpha^{-1} N_h (F_h - \alpha I_W I_V U_h + D_h I_W \Sigma_h) \cdot (F_h - \alpha I_W I_V U_h + D_h I_W \Sigma_h)\Big). \end{aligned} \tag{5}$$

À l'aide de cette estimation, calculer une majoration de l'erreur $\|e_h\|_V$ effectuée sur le calcul u. On utilisera à nouveau les mêmes données que dans les questions précédentes avec $N = 100$ et $N = 1000$.

Cas Bidimensionnel

On considère dorénavant le cas bidimensionnel avec comme domaine Ω le disque unité.

Question 12 - Calcul du potentiel. Déterminer à l'aide de `FreeFem++` une approximation du potentiel à l'aide de la méthode des éléments finis P_1. On utilisera un maillage comportant une densité δn de mailles par unité de longueur avec $\delta n = 10$. Par ailleurs, on choisira $f = 1$, $\alpha = 1$ et $k = 1$. Représenter les isovaleurs du potentiel et donner la moyenne de u_h sur Ω.

Question 13 - Calcul du flux. Déterminer à l'aide de `FreeFem++` une approximation du flux. On utilisera des éléments de Raviart-Thomas de degré zéro (RT0 sous `FreeFem++`). On utilisera le même maillage et les mêmes données que ceux utilisés pour le calcul du potentiel dans la question précédentes. Représenter le champs σ_h ainsi obtenu sur un graphique.

Question 14 - Estimation d'erreur. Déterminer une borne sur l'erreur $\|e_h\|_V$. On utilisera à nouveau le même maillage et les mêmes données qu'aux deux questions précédentes.

Question 15 - Taux de convergence. Tracer le graphe, en coordonnées logarithmiques, de l'erreur $\|e_h\|_V$ en fonction de la densité δn de points sur la frontière par unité de longueur (on choisira δn variant de 10 à 100). Quel est le taux de convergence observé. Comparer le taux ainsi obtenu au taux théorique de convergence de l'erreur.