PROJET n$^{\text{o}}$ 2

Caroline Japhet

Eléments Finis P_1 - Equation de réaction-diffusion 1D

On cherche à résoudre le problème aux limites

$$\begin{cases} -u'' + cu = f \text{ dans }]a,b[, \\ u(a) = u_a, \\ u(b) = u_b, \end{cases} \tag{1}$$

où f est donnée dans $\in L^2(a,b)$, $c \in \mathbf{R}_+$, et $u_a,\ u_b \in \mathbf{R}$.

Ce problème aux limites intervient dans la modélisation de nombreux problèmes issus de la physique (équation de la chaleur, température d'une barre métallique, électromagnétisme, ...), de la mécanique (vibration d'une corde), de la finance (équation de Black-Scholes), mais aussi de la chimie, de la biologie, de l'écologie... Il peut être résolu par différentes méthodes numériques (différences finies, éléments finis, volumes finis, méthodes spectrales, méthodes probabilistes...). Ici, nous allons mettre en oeuvre la méthode des élément finis.

1. Formulation variationnelle :
On rappelle qu'on démontre en utilisant le théorème de Lax-Milgram que le problème (1) admet une unique solution. On rappelle également la formulation variationnelle associée à (1) :

$$\text{Trouver } u \in V, \quad \text{tel que } \ a(u,v) = \ell(v),\ \forall v \in W, \tag{2}$$

où $V = \{v \in H^1(a,b);\ v(a) = u_a,\ v(b) = u_b\}$, $W = H_0^1(a,b)$,
$a(u,v) = \displaystyle\int_a^b u'v'dx + c\int_a^b uvdx,\ \forall u,v \in V$, et $\ell(v) = \displaystyle\int_a^b fvdx,\ \forall v \in V$.

2. Discrétisation :
On introduit un maillage $\mathcal{T}_h$ de $[a,b]$ en $N+1$ sous-intervalles $I_k = [x_k, x_{k+1}]$ de longueur $h_k = x_{k+1} - x_k$, pour $k \in \{0,\dots,N\}$, avec $a = x_0 < x_1 < \dots < x_N < x_{N+1} = b$. On note $h = \max\limits_{k=0,\dots,N} h_k$.
On introduit l'espace des éléments finis de Lagrange de degré 1 :

$$X_h^1 = \{v_h \in C^0([a,b]) \text{ tel que } v_{h|[x_k,x_{k+1}]} \in \mathbb{P}^1([x_k,x_{k+1}]),\ k = 0,\dots,N\},$$

où $\mathbb{P}^1(I)$ est l'ensemble des polynômes à coefficients réels de degré inférieur ou égal à 1 sur I. On approche alors le problème (2) par le problème variationnel discret suivant (voir le TD 5) :

$$\text{Trouver } u_h \in V_h, \quad \text{tel que } \ a(u_h,v_h) = \int_a^b f_h v_h dx,\ \forall v_h \in W_h, \tag{3}$$

où $V_h = V \cap X_h^1$, $W_h = W \cap X_h^1$, $f_h \in X_h^1$ et vérifie $f_h(x_k) = f(x_k),\ \forall k = 0,...,N+1$. On montre par les mêmes arguments que précédemment que ce problème admet une unique solution. On introduit maintenant une base de X_h^1 définie par

$$\phi_i(x_j) = \delta_{ij},\ \forall i,j \in \{0,...,N+1\}.$$

En décomposant les fonctions u_h, v_h et f_h apparaissant dans la formulation variationnelle discrète (3) sur la base des ϕ_i, en déduire le système linéaire dont le vecteur $U_h = (u_h(x_0),...,u_h(x_{N+1}))^t$ est solution, de la forme :

$$\mathbb{A}_h U_h = b_h. \tag{4}$$

Les matrices de masse $\mathcal{M}$ et de rigidité $\mathcal{R}$ intervenant dans le calcul de $\mathbb{A}_h$ sont définies par :

$$\mathcal{M}_{i+1,j+1} = \int_a^b \phi_i \phi_j, \quad \mathcal{R}_{i+1,j+1} = \int_a^b \phi_i' \phi_j', \quad \forall i,j \in 0,...,N+1.$$

Le second membre $\mathcal{F}$ intervenant dans le calcul de b_h est défini par : $\mathcal{F}_i = \int_a^b f_h \phi_i dx = (\mathcal{M}\tilde{f})_i, \quad \forall i = 0,...,N+1$, où $\tilde{f} = ((f(x_0),...,f(x_{N+1}))^t$. On a vu au TD 5 un algorithme permettant d'assembler de façon efficace les matrices $\mathcal{M}$ et $\mathcal{R}$ (à l'aide des matrices élémentaires). Ecrire sur papier les fonctions AssembleM, AssembleR et SndMembre permettant de calculer respectivement $\mathcal{M}$, $\mathcal{R}$ et $\mathcal{F}$.

Dans (3) les conditions aux limites de Dirichlet sont incluses dans le système linéaire (mise à zéro des coefficients non-diagonaux). La prise en compte des conditions aux limites est réalisée par l'algorithme suivant (où $\mathcal{A}$ et $\mathcal{F}$ correspondent à la matrice et au second membre sans conditions aux limites) :

Algorithme 1 Prise en compte des conditions aux limites de Dirichlet dans $\mathbb{A}_h$ et b_h

---

Données : $\mathcal{A}$: matrice tridiagonale de dimension $(N+2) \times (N+2)$,
$\mathcal{F}$: vecteur de dimension $(N+2) \times 1$,
u_a, u_b : 2 réels.
Résultat : $\mathbb{A}_h$: matrice de dimension $(N+2) \times (N+2)$,
b_h : vecteur de de dimension $(N+2) \times 1$.

Fonction $[\mathbb{A}_h, b_h] \leftarrow \mathrm{CL}(\mathcal{A}, \mathcal{F}, u_a, u_b)$
  $\mathbb{A}_h \leftarrow \mathcal{A}$ ▷ Initialisation de la matrice $\mathbb{A}$
  $b_h \leftarrow \mathcal{F}$ ▷ Initialisation du vecteur b
  $\mathbb{A}_h(1,1) \leftarrow 1$ ▷ Prise en compte de la condition de Dirichlet en a
  $\mathbb{A}_h(1,2) \leftarrow 0$
  $b_h(1) \leftarrow u_a$
  $\mathbb{A}_h(N+2,N+2) \leftarrow 1$ ▷ Prise en compte de la condition de Dirichlet en b
  $\mathbb{A}_h(N+2,N+1) \leftarrow 0$
  $b_h(N+2) \leftarrow u_b$
fin Fonction

L'algorithme de résolution de (1) par la méthode des éléments finis de Lagrange P_1 s'écrit de façon modulaire (plus lisible, permet de tester séparément les modules, plus grande portabilité) de la façon suivante :

Algorithme 2 Algorithme de résolution de (1) par une méthode d'éléments finis de Lagrange de degré 1.

Données : a, b : les bornes de l'intervalle $a < b$.
N : entier.
f : vecteur de dimension $(N+2) \times 1$, $f = (f(x_0),...,f(x_{N+1}))^t$.
c : réel positif
$u_a, \ u_b$: 2 réels
Résultat : U_h : vecteur de dimension $(N+2) \times 1$, solution de (3)

$X \leftarrow \texttt{Maillage}(a,b,N)$
Pour $k \leftarrow 1$ **à** $N+1$ **faire** ▷ Initialisation de $H \in \mathbf{R}^{N+1}$ tel que $H(k) = h_{k-1}, \ \forall k \in \{1,\ldots,N+1\}$,
  $H(k) \leftarrow X(k+1) - X(k)$
fin Pour
$\mathcal{M} \leftarrow$ AssembleM(H) ▷ Assemblage de la matrice de Masse
$\mathcal{R} \leftarrow$ AssembleR(H) ▷ Assemblage de la matrice de Rigidité
$\mathcal{A} \leftarrow \mathcal{R} + c\mathcal{M}$ ▷ calcul de la matrice globale
$\mathcal{F} \leftarrow$ SndMembre$(\mathcal{M}, f)$ ▷ Calcul de second membre
$[\mathbb{A}_h, b_h] \leftarrow \mathrm{CL}(\mathcal{A}, \mathcal{F}, u_a, u_b)$ ▷ Prise en compte des conditions de Dirichlet en $x = a$ et en $x = b$
$U_h \leftarrow \texttt{Solve}(\mathbb{A}_h, b_h)$ ▷ $U(i) \approx u(X(i)), \forall i \in \{1,\ldots,N+2\}$ où u est solution de (1)

---

3. Programmation en MATLAB :
Utiliser le logiciel MATLAB pour trouver la solution du système (3). Dans un premier temps on supposera le maillage régulier ($x_k = a + k * h$ avec $h = h_k = \frac{b-a}{N+1}$). On représentera la solution approchée en choisissant une fonction f pour laquelle on peut calculer analytiquement la solution exacte et en utilisant des maillages avec différents pas h. On représentera sur la même courbe les valeurs de la solution exacte aux noeuds x_k. Ensuite on étudiera l'ordre de convergence de la méthode (toujours en choisissant une fonction f pour laquelle on peut calculer analytiquement la solution exacte) et en considérant quatre ou cinq maillages différents. On prendra garde à tester les programmes pour des solutions analytiques possédant des caractéristiques différentes : très régulières, fortement oscillantes sur le domaine, fortement variable près d'une extrémité du domaine...

Note sur la programmation : Il est demandé de fournir des programmes commentés et modulaires. En particulier, le script principal devra être succint et ne contenir qu'un minimum de calcul élémentaire. Tous les calculs seront ainsi renvoyés dans des fonctions auxiliaires (cf Algorithme 2). De plus les ajouts effectués dans les sections suivantes ne donneront pas lieu à l'écriture d'un nouveau script, mais seulement à l'ajout de nouvelles fonctions qui seront appelées par le script modifié.

4. Comparaison avec la méthode des différences finies :
La méthode des différences finies est basée sur une discrétisation directe de l'équation (1). En utilisant les programmes du Projet 1, comparer les résultats avec ceux de la question précédente.

5. Conditions aux limites de Neumann et de Robin :
Reprendre le problème (1) en remplaçant les conditions aux limites de Dirichlet par des conditions de type Neumann

$$u'(a) = g_a, \quad u'(b) = g_b, \tag{5}$$

ou de type Robin

$$-u'(a) + \alpha_a u(a) = g_a, \quad u'(b) + \alpha_b u(b) = g_b, \tag{6}$$

avec $\alpha_a > 0$, $\alpha_b > 0$, et g_a, $g_b \in \mathbf{R}$. Ecrire la formulation variationnelle, puis la formulation varitationnelle discrète obtenue. En déduire le nouveau système linéaire à résoudre. Quelles sont les parties du système linéaire qui sont touchées par cette modification des conditions aux limites ? Modifier vos programmes en conséquence (garder une copie non modifiée des anciens programmes !). Effectuer à nouveau une représentation graphique de la solution discrète puis des tests de convergence. Que se passe-t-il si on choisit $c = 0$ dans l'équation (1) avec des conditions aux limites de Neumann ? Tester numériquement cette situation. Etudier comment insérer les nouvelles conditions aux limites (5) et (6) dans la méthode des différences finies. Ecrire les programmes correspondants et comparer aux résultats obtenus avec la méthode des éléments finis.

6. Maillage irrégulier :
On considère maintenant une discrétisation basée sur un maillage irrégulier de l'intervalle $[a, b]$. Reprendre les deux méthodes (éléments et différences finies) et écrire les matrices obtenues dans chacun des cas. On vérifiera entre autres que seules les distances $h_k = x_{k+1} - x_k$ (et non la position des points x_k) interviennent dans le système linéaire obtenu. Programmer et effectuer les tests de convergence. On pourra initialiser le maillage en utilisant la fonction rand de MATLAB. L'irrégularité du maillage a-t-elle une influence sur l'ordre de convergence des méthodes ?

7. Calcul de l'erreur :
Pour une équation de type (1), il est possible d'obtenir des résultats de convergence théoriques pour la méthode des éléments finis. D'après ceux ci, on doit observer une décroissance linéaire de la norme H^1 de l'erreur et une décroissance quadratique de la norme L^2. On va ici s'intéresser numériquement au calcul de l'erreur e_h entre la solution numérique u_h et l'interpolée de la solution exacte $\pi_h(u)$

$$u_h(x) = \sum_{i=0}^{N+1} \phi_i(x), \quad \pi_h(u) = \sum_{i=0}^{N+1} u(x_i)\phi_i(x),$$

erreur qui est ainsi définie par

$$e_h(x) = (u_h - \pi_h(u))(x) = \sum_{i=0}^{N+1} (u_i - u(x_i))\phi_i(x) = \sum_{i=0}^{N+1} e_i\phi_i(x).$$

Par abus de notation, on notera également $e_h = (e_0, ..., e_{N+1})^t$. Montrer que

$$\|e_h(x)\|_{L^2(a,b)} = (\mathcal{M}e_h, e_h)^{\frac{1}{2}}, \quad \|e_h(x)\|_{H^1(a,b)} = ((\mathcal{M}e_h, e_h) + (\mathcal{R}e_h, e_h))^{\frac{1}{2}}.$$

Considérer alors une suite de trois ou quatre maillages et calculer pour chacun les erreurs L^2 et H^1 associées. Tracer ensuite en échelle Log-Log la courbe d'erreur (en abcisse le pas du maillage, en ordonnées l'erreur sur le même maillage). Pour un maillage irrégulier le pas du maillage h sera défini comme la plus grande longueur des éléments du maillage $h = \max_{k=0,...,N} h_k$. Comparer vos résultats numériques aux résultats théoriques attendus.