

La méthode des éléments finis P^1

extrait du livre : *I. Danaila, F. Hecht, O. Pironneau,*
Simulation numérique en C++, Dunod, 2003

1.1 Résolution numérique de l'équation de la chaleur 2D par une méthode implicite

1.1.1 Discrétisation en temps

Considérons l'équation de la chaleur en deux dimensions

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \Delta \theta = 0, \quad \forall \mathbf{x} = (x, y) \in \Omega = [0, 1] \times [0, H/(2L)], \quad \forall 0 < t < t_{max}, \quad (1.1)$$

qui satisfait les conditions aux limites (n désigne le vecteur normal à la frontière $\Gamma = \partial\Omega$, dirigé vers l'extérieur du domaine) :

$$\begin{aligned} \theta &= \theta_D(\mathbf{x}) = (T_0 - T_e)/T_e && \text{sur } \Gamma^1(x = 0) && \text{(condition de Dirichlet)} \\ \frac{\partial \theta}{\partial n} &= 0 && \text{sur } \Gamma^2(y = 0) && \text{(condition de Neumann)} \\ \frac{\partial \theta}{\partial n} &= 0 && \text{sur } \Gamma^3(x = 1) && \text{(condition de Neumann)} \\ \frac{\partial \theta}{\partial n} + \underbrace{\left(\frac{h_c L}{k}\right)}_c \theta &= 0 && \text{sur } \Gamma^4(y = H/(2L)) && \text{(condition de Robin)} \end{aligned} \quad (1.2)$$

et la condition initiale ($t = 0$)

$$\theta(x, y, 0) = \theta^0(\mathbf{x}) = 0. \quad (1.3)$$

Notons $\theta^n(\mathbf{x})$ la valeur de θ calculée au point $\mathbf{x} \in \Omega$ et à l'instant $n\delta t$. Pour la discrétisation en temps, nous allons utiliser un schéma d'Euler implicite, plus robuste et moins restrictif que le schéma explicite utilisé au paragraphe ??). L'équation (1.1) discrétisée en temps s'écrit :

$$\frac{1}{\delta t}(\theta^{n+1} - \theta^n) - \Delta \theta^{n+1} = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega. \quad (1.4)$$

1.1.2 Formulation variationnelle

Pour approcher l'équation en espace nous allons utiliser une forme équivalente, dite *variationnelle*. Pour plus de généralité, notons

$$\Gamma^1 = \Gamma^D \text{ (Dirichlet)}, \quad \Gamma^2 \cup \Gamma^3 = \Gamma^N \text{ (Neumann)}, \quad \Gamma^4 = \Gamma^R \text{ (Robin)}$$

et introduisons les espaces fonctionnels suivants :

$$\begin{aligned} H^1(\Omega) &= \{v \in L^2(\Omega) : \frac{\partial v}{\partial x}, \frac{\partial v}{\partial y} \in L^2(\Omega)\} \\ H^2(\Omega) &= \{v \in H^1(\Omega) : \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y}, \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \in L^2(\Omega)\} \\ V(\Omega) &= \{v \in H^1(\Omega) : v|_{\Gamma^D} = 0\}. \end{aligned} \quad (1.5)$$

avec $L^2(\Omega)$ l'espace des fonctions $v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ de carrés intégrables. Si $\Delta\theta^{n+1} \in L^2(\Omega)$, nous pouvons multiplier l'équation (1.4) par une fonction *test* $v(\mathbf{x}) \in V(\Omega)$ et appliquer ensuite la formule de Green

$$\int_{\Omega} [\nabla v \nabla \theta + v \Delta \theta] \, dx dy = \int_{\Gamma} \frac{\partial \theta}{\partial n} v \, d\gamma, \quad (1.6)$$

pour obtenir :

$$\int_{\Omega} \left[\frac{1}{\delta t} (\theta^{n+1} - \theta^n) v + \nabla \theta^{n+1} \nabla v \right] \, dx dy = \int_{\Gamma^D} \underbrace{\frac{\partial \theta^{n+1}}{\partial n}}_{=0} v \, d\gamma + \int_{\Gamma^N} \underbrace{\frac{\partial \theta^{n+1}}{\partial n}}_{=0} v \, d\gamma + \int_{\Gamma^R} \underbrace{\frac{\partial \theta^{n+1}}{\partial n}}_{=-c \theta^{n+1}} v \, d\gamma.$$

Le problème initial décrit par les équations (1.1) et les conditions aux limites (1.2) est remplacé par la formulation variationnelle équivalente :

trouver $\theta^{n+1}(\mathbf{x}) \in H^1(\Omega)$, vérifiant $\theta^{n+1}(\mathbf{x}) = \theta_D, \forall \mathbf{x} \in \Gamma^D$, et tel que

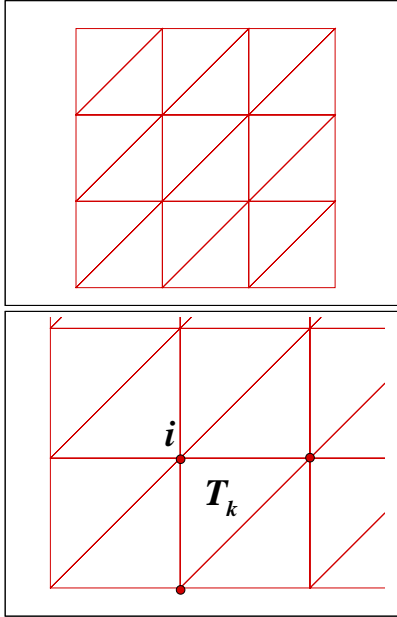
$$\int_{\Omega} \left[\frac{1}{\delta t} (\theta^{n+1} - \theta^n) v + \nabla \theta^{n+1} \nabla v \right] \, dx dy + \int_{\Gamma^R} c \theta^{n+1} v \, d\gamma = 0, \quad \forall v \in V(\Omega). \quad (1.7)$$



Remarque 1.1

La formulation variationnelle est équivalente au problème initial si la condition de régularité $\theta^{n+1}(\mathbf{x}) \in H^2(\Omega)$ est vérifiée, ou encore, la condition moins restrictive : $\theta^{n+1}(\mathbf{x}) \in H^1(\Omega)$ et $\Delta\theta^{n+1} \in L^2(\Omega)$ (voir [?], chapitre 5).

1.1.3 Discrétisation en espace par éléments finis P^1



Le domaine Ω (ici carré) est découpé en n_t éléments (finis) triangulaires $T_k, k = 1, \dots, n_t$. La famille des triangles T_k forme une *triangulation* \mathcal{T}_h , indexée par le paramètre h , la longueur du plus grand des côtés de tous les triangles. Si l'on définit le fermé $\Omega_h = \cup_{k=1}^{n_t} T_k$, nous observons que $\Omega_h = \Omega \cup \Gamma$ si, et seulement, si Γ est une frontière polygonale.

La construction de la triangulation \mathcal{T}_h doit respecter (par définition) quelques règles :

- les triangles sont d'aire non-nulle ;
- deux triangles voisins peuvent avoir en commun, soit un sommet, soit un côté **entier** ;
- les sommets définissant $\Gamma_h = \partial\Omega_h$ doivent être situés sur Γ ;
- les coins de Ω (quand ils existent) sont des sommets de triangles.

Les sommets $i = 1, \dots, n_v$ des triangles T_k sont les *sommets* de la triangulation. Ils vont également servir comme nœuds du maillage (*i.e.* les points où la solution numérique sera calculée), car nous allons utiliser des éléments finis P^1 (polynômes de degré ≤ 1).

Ce type d'éléments finis est caractérisé par l'utilisation comme espace d'approximation de

$$H_h = \{v \in C^0(\Omega_h) : \forall T_k \in \mathcal{T}_h, v|_{T_k} \in P^1(T_k)\}, \quad (1.8)$$

l'espace des fonctions continues, affines sur chaque triangle de la triangulation. L'espace V des fonctions test sera naturellement remplacé par l'espace de dimension finie

$$V_h = \{v \in H_h : v|_{\Gamma_h^D} = 0\}. \quad (1.9)$$



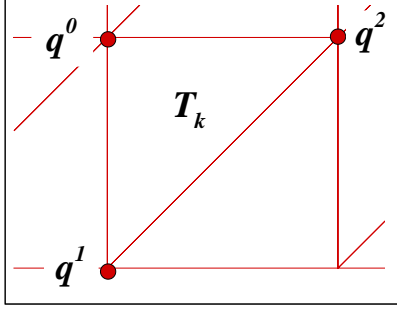
Remarque 1.2

|| Pour avoir $V_h \subset V$, il faut que Ω soit polygonal de manière à pouvoir le recouvrir exactement avec une triangulation. Dans la pratique, on peut montrer que la théorie est encore valide tant que la distance entre la frontière continue et la frontière discrète est de l'ordre de h^2 .

Plus concrètement, comment caractériser les fonctions $\varphi \in H_h$? Énonçons quelques propriétés intéressantes d'un point de vue pratique.



Proposition 1.1 Les fonctions de H_h sont entièrement déterminées par leurs valeurs aux sommets de la triangulation.



Effectivement, considérons le triangle T_k défini par les coordonnées des ses sommets $q^0, q^1, q^2 \in \mathbb{R}^2$ et les valeurs $\varphi^i = \varphi(q^i), i = 0, 1, 2$ (la numérotation «locale» des sommets suit toujours le sens trigonométrique). Par définition, φ est affine sur le triangle T_k , donc elle s'écrit sous la forme

$$\varphi(\mathbf{x}) = \alpha x + \beta y + \gamma, \forall \mathbf{x} \in T_k. \quad (1.10)$$

Les constantes réelles α, β, γ sont déterminées en particulierisant cette relation pour les sommets du triangle. Nous obtenons le système linéaire suivant :

$$\begin{pmatrix} q_x^0 & q_y^0 & 1 \\ q_x^1 & q_y^1 & 1 \\ q_x^2 & q_y^2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi^0 \\ \varphi^1 \\ \varphi^2 \end{pmatrix}, \quad (1.11)$$

qui a une solution unique si, et seulement si, son déterminant est non-nul. Mais, le déterminant du système est égal à $2|T_k|$, avec $|T_k|$ l'aire du triangle (non-nulle par définition).

 **Remarque 1.3**

Le gradient de φ sur le triangle T_k est constant et ses composantes peuvent être calculées directement de (1.10) et (1.11) :

$$\nabla \varphi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad \alpha = \frac{1}{2|T_k|} \begin{vmatrix} \varphi^0 & q_y^0 & 1 \\ \varphi^1 & q_y^1 & 1 \\ \varphi^2 & q_y^2 & 1 \end{vmatrix}, \quad \beta = \frac{1}{2|T_k|} \begin{vmatrix} q_x^0 & \varphi^0 & 1 \\ q_x^1 & \varphi^1 & 1 \\ q_x^2 & \varphi^2 & 1 \end{vmatrix}. \quad (1.12)$$

Il faut savoir qu'en pratique, on n'utilise jamais l'écriture de la fonction $\varphi \in P^1$ sous la forme (1.10), mais plutôt l'expression utilisant les coordonnées barycentriques.

 **Définition 1.1**

Les coordonnées barycentriques d'un point $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ par rapport au triangle T_k de sommets $q^0, q^1, q^2 \in \mathbb{R}^2$, sont les nombres réels $\{\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2\}$, solution unique du système :

$$\begin{cases} \mathbf{x} = \lambda_0 q^0 + \lambda_1 q^1 + \lambda_2 q^2 \\ \lambda_0 + \lambda_1 + \lambda_2 = 1. \end{cases} \quad (1.13)$$

 **Remarque 1.4**

Les coordonnées barycentriques sont des fonctions $\lambda_i(\mathbf{x})$ vérifiant $\lambda_i(q^j) = \delta_{ij}$ (1 si $i = j$, 0 sinon).

D'un point de vue pratique, l'introduction des coordonnées barycentriques nous permet :

- de vérifier si $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$, quelconque, est dans le triangle T_k ;
Effectivement, on peut calculer les coordonnées barycentriques de \mathbf{x} par rapport au triangle T_k en résolvant le système de trois équations (1.13) ; si la solution $\{\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2\}$ vérifie $0 \leq \lambda_i \leq 1, \forall i = 0, 1, 2$, le point \mathbf{x} appartient au triangle T_k ;
- de définir une fonction $\varphi \in P^1(T_k)$ par l'expression (obtenue directement de 1.13) :

$$\varphi(\mathbf{x}) = \lambda_0(\mathbf{x}) \varphi(q^0) + \lambda_1(\mathbf{x}) \varphi(q^1) + \lambda_2(\mathbf{x}) \varphi(q^2). \quad (1.14)$$

En fait, la proposition (1.1) a deux conséquences directes importantes :

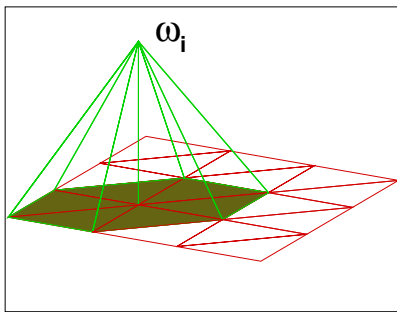
- la première indique la continuité des fonctions P^1 à l'interface $[q^i, q^j]$ entre deux triangles - effectivement, si $\mathbf{x} \in [q^i, q^j]$, nous pouvons écrire que

$$\mathbf{x} = \lambda q^i + (1 - \lambda)q^j \implies \varphi(\mathbf{x}) = \lambda\varphi(q^i) + (1 - \lambda)\varphi(q^j),$$

et cette relation est valable pour les deux triangles ;

- la deuxième conséquence donne le nombre de degrés de liberté disponibles pour la représentation discrète d'une fonction P^1 sur une triangulation donnée.

(X) **Proposition 1.2** *La dimension de l'espace H_h est égale au nombre de sommets n_v de la triangulation.*



Puisque la dimension de l'espace H_h est exactement n_v , il est naturel de choisir comme base de H_h les fonctions *chapeaux* $w^i, i = 1, \dots, n_v$ avec la propriété

$$w^i \in H_h, \quad w^i(q^j) = \delta_{ij} \quad (1 \text{ si } i = j, \quad 0 \text{ sinon}). \quad (1.15)$$

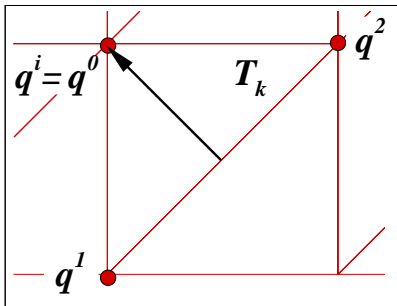


Remarque 1.5

À partir de (1.15) et (1.14), nous pouvons établir une liaison directe entre les fonctions de base P^1 et les coordonnées barycentriques sur le triangle T_k , à savoir

$$w^i(\mathbf{x}) = \lambda_i(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in T_k, \quad \forall i = 0, 1, 2. \quad (1.16)$$

Que peut-on dire de l'espace V_h ? Le nombre de degrés de liberté pour la représentation d'une fonction $v \in V_h$ est restreint par la condition $v|_{\Gamma_h^D} = 0$, et, par conséquent, la dimension de V_h sera $n_v - n_d$, où n_d est le nombre de sommets de la triangulation situés sur Γ_h^D . Une base de V_h sera constituée par les fonctions chapeaux définies sur l'ensemble des points de la triangulation, sauf ceux appartenant à Γ_h^D .



Pour finir cette section, calculons ∇w^i . Suivant (1.12), $\nabla w^i \neq 0$ sur un triangle T_k si, et seulement si, q^i est un sommet de ce triangle. Si q^i est le sommet 0 du triangle T_k , les composantes (α, β) de ∇w^i seront :

$$\alpha = \frac{q_y^1 - q_y^2}{2|T_k|}, \quad \beta = -\frac{q_x^1 - q_x^2}{2|T_k|}. \quad (1.17)$$

Cette relation nous permet d'interpréter géométriquement ∇w^i comme le vecteur orthogonal à $(q^1 - q^2)$, pointant vers le sommet i , et de longueur l'inverse de la hauteur du triangle :

$$\nabla w^i|_{T_k} = H_k^i = \frac{(q^1 - q^2)^\perp}{2|T_k|}. \quad (1.18)$$

1.1.4 Formulation variationnelle discrète

Avec les espaces d'approximation introduits précédemment, la formulation variationnelle (1.7) devient : trouver $\theta_h^{n+1}(\mathbf{x}) \in H_h$, vérifiant $\theta_h^{n+1}(q^j) = \theta_D(q^j)$, $\forall q^j \in \Gamma_h^D$, et tel que

$$\int_{\Omega_h} \left[\frac{1}{\delta t} (\theta_h^{n+1} - \theta_h^n) v + \nabla \theta_h^{n+1} \nabla v \right] dx dy + \int_{\Gamma_h^R} c \theta_h^{n+1} v d\gamma = 0, \quad \forall v \in V_h. \quad (1.19)$$

Si I désigne l'ensemble des indices des sommets qui ne sont pas sur Γ_h^D (en nombre de $n_v - n_d$) et J l'ensemble des indices des sommets de Γ_h^D (en nombre de n_d), la solution $\theta_h \in H_h$ sera cherchée sous la forme (décomposition suivant les fonctions de base) :

$$\theta_h^n(\mathbf{x}) = \sum_{i \in I} \theta_i^n w^i(\mathbf{x}) + \sum_{i \in J} \theta_D(q^i) w^i(\mathbf{x}), \quad \forall n, \quad (1.20)$$

où $q^i \in \mathbb{R}^2$ est le i -ème sommet, θ_i^n la valeur de θ_h^n en ce sommet.

La formulation variationnelle discrète (1.19) étant linéaire par rapport à $v \in V_h$, il suffit de prendre successivement $v = w^j$, $j \in I$ (fonctions de base de V_h) pour s'assurer que l'équation est vérifiée pour tout $v \in V_h$. Nous obtenons le problème discret suivant :

$$\begin{aligned} & \sum_{i \in I} \frac{1}{\delta t} (\theta_i^{n+1} - \theta_i^n) \int_{\Omega_h} w^i w^j dx dy + \\ & \sum_{i \in I} \theta_i^{n+1} \int_{\Omega_h} \nabla w^i \cdot \nabla w^j dx dy + \sum_{i \in J} \theta_D(q^i) \int_{\Omega_h} \nabla w^i \cdot \nabla w^j dx dy + \\ & \sum_{i \in I} \theta_i^{n+1} \int_{\Gamma_h^R} c w^i w^j d\gamma + \sum_{i \in J} \theta_D(q^i) \int_{\Gamma_h^R} c w^i w^j d\gamma = 0, \quad \forall j \in I, \end{aligned} \quad (1.21)$$

qui va nous permettre de calculer les $(n_v - n_d)$ inconnues θ_i^{n+1} , $i \in I$ par l'inversion d'un système linéaire.

Remarquons que l'écriture (et ensuite, la programmation) du problème discret est largement simplifiée si on considère le système augmenté par les n_d équations qui imposent les conditions de Dirichlet

$$\theta_i^{n+1} = \theta_D(q^i), \quad i \in J. \quad (1.22)$$

Avec cette astuce, la formulation (1.21) s'écrit maintenant :

$$\begin{aligned} & \sum_{i \in I \cup J} \frac{1}{\delta t} (\theta_i^{n+1} - \theta_i^n) \int_{\Omega_h} w^i w^j dx dy + \\ & \sum_{i \in I \cup J} \theta_i^{n+1} \int_{\Omega_h} \nabla w^i \cdot \nabla w^j dx dy + \\ & \sum_{i \in I \cup J} \theta_i^{n+1} \int_{\Gamma_h^R} c w^i w^j d\gamma = 0, \quad \forall j \in I, \end{aligned} \quad (1.23)$$

ou également :

$$\begin{aligned} & \sum_{i \in I \cup J} \left[\frac{1}{\delta t} \int_{\Omega_h} w^i w^j dx dy + \int_{\Omega_h} \nabla w^i \cdot \nabla w^j dx dy + \int_{\Gamma_h^R} c w^i w^j d\gamma \right] \theta_i^{n+1} \\ & = \sum_{i \in I \cup J} \left[\frac{1}{\delta t} \int_{\Omega_h} w^i w^j dx dy \right] \theta_i^n, \quad \forall j \in I. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Les équations (1.24) et (1.22) forment un système linéaire de dimension n_v , qui s'écrit sous la forme générique

$$\mathcal{A}^{(1,1,c)} \Theta^{n+1} = \mathcal{A}^{(1,0,0)} \Theta^n, \quad (1.25)$$

où Θ est le vecteur solution, de dimension n_v , et $\mathcal{A}^{(\alpha,\beta,\alpha_R)}$ la matrice de taille $n_v \times n_v$ qui dépend de trois fonctions α, β, α_R définies sur la triangulation \mathcal{T}_h :

$$\mathcal{A}_{j,i}^{(\alpha,\beta,\alpha_R)} = \frac{1}{\delta t} \int_{\Omega_h} \alpha w^i w^j dx dy + \int_{\Omega_h} \beta \nabla w^i \cdot \nabla w^j dx dy + \int_{\Gamma_h^R} \alpha_R w^i w^j d\gamma, \quad j \in I, i \in I \quad (1.26)$$

$$\mathcal{A}_{j,i}^{(\alpha,\beta,\alpha_R)} = \delta_{ji} \quad j \in J, i \in I \quad (1.27)$$



Remarque 1.6

La formulation (1.26) est beaucoup plus générale et permet de traiter, par exemple, le cas d'une conductivité variable dans le domaine de calcul ($\beta = \beta(\mathbf{x})$) ou d'un coefficient surfacique de transfert thermique variable ($\alpha_R = \alpha_R(\mathbf{x})$). Dans notre cas (équation 1.25), les trois fonctions α, β, α_R sont constantes, ce qui simplifie le calcul des intégrales.

Dans la section suivante nous allons développer un algorithme numérique efficace pour la résolution du système (1.25).

1.2 Algorithme de résolution

1.2.1 Calcul des intégrales élémentaires

Les intégrales intervenant dans (1.26) seront naturellement décomposées comme une somme d'intégrales élémentaires sur les triangles du maillage \mathcal{T}_h . Si T_k est un triangle défini par les sommets $q^0, q^1, q^2 \in \mathbb{R}^2$, nous pouvons utiliser les formules de quadrature suivantes :

$$\int_{T_k} f(\mathbf{x}) dx dy \simeq |T_k| f\left(\frac{q^0 + q^1 + q^2}{3}\right) \quad (\text{exacte pour } f \in \mathcal{P}^0) \quad (1.28)$$

$$\int_{T_k} f(\mathbf{x}) dx dy \simeq \frac{|T_k|}{3} [f(q^0) + f(q^1) + f(q^2)] \quad (\text{exacte pour } f \in \mathcal{P}^1) \quad (1.29)$$

$$\int_{T_k} f(\mathbf{x}) dx dy \simeq \frac{|T_k|}{3} \left[f\left(\frac{q^0 + q^1}{2}\right) + f\left(\frac{q^1 + q^2}{2}\right) + f\left(\frac{q^2 + q^0}{2}\right) \right] \quad (\text{exacte pour } f \in \mathcal{P}^2) \quad (1.30)$$

À partir de ces formules générales, évaluons les intégrales élémentaires correspondant à (1.26) :

- pour la première, nous utilisons les propriétés des fonctions de base w^i et nous appliquons (1.30), car $w^i w^j \in \mathcal{P}^2$:

$$\int_{T_k} w^i w^j dx dy = \begin{cases} 0, & q^i, q^j \notin T_k \\ \frac{|T_k|}{6}, & q^i, q^j \in T_k, i = j \\ \frac{|T_k|}{12}, & q^i, q^j \in T_k, i \neq j. \end{cases} \quad (1.31)$$

Pour la même intégrale nous pouvons appliquer une formule plus générale donnée dans [?] :

$$\int_{T_k} (\lambda_0)^m (\lambda_1)^n (\lambda_2)^p (\mathbf{x}) dx dy = \frac{2|T_k| m! n! p!}{(2+m+n+p)!}, \quad (1.32)$$

en tenant compte de la liaison entre les coordonnées barycentriques et les fonctions de base (équation 1.16 dans le cas des éléments finis P^1).

- pour la deuxième intégrale, nous utilisons le fait que de $\nabla w^i \in P^0$ et que son expression est donnée par (1.18) :

$$\int_{T_k} \nabla w^i \nabla w^j dx dy = \begin{cases} 0, & q^i, q^j \notin T_k \\ |T_k| (H_k^i, H_k^j), & q^i, q^j \in T_k, \end{cases} \quad (1.33)$$

où (\cdot, \cdot) est le produit scalaire euclidien de \mathbb{R}^2 .

- pour l'intégrale sur la frontière Γ_h^R on doit faire appel aux formules de quadrature 1D, comme la formule de Simpson (exacte pour les polynômes de degré 2) :

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \frac{(b-a)}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right]$$

et nous obtenons :

$$\int_{\Gamma_h^R} w^i w^j d\gamma = \begin{cases} \frac{|q^i - q^j|}{6}, & \text{si } i \neq j \text{ et } [q^i, q^j] \in \Gamma_h^R, \\ \frac{|q^i - q^{i+}|}{3} + \frac{|q^i - q^{i-}|}{3}, & \text{si } i = j \text{ et } q^i \in \Gamma_h^R, \\ 0, & \text{autrement.} \end{cases} \quad (1.34)$$

Nous avons noté par q^{i+} et q^{i-} les sommets de la frontière Γ_h^R entourant le point q^i lui appartenant.



Remarque 1.7

Le calcul de l'intégrale de bord sur Γ_h^R nécessite l'identification des arêtes du bord qui, de plus, doivent être ordonnées pour pouvoir appliquer la formule (1.34). Une méthode rapide pour la construction du tableau des arêtes appartenant à Γ_h^R sera donnée dans le paragraphe ??.

1.2.2 Résolution par gradient conjugué

La méthode du gradient conjugué, exposée et implémentée dans le paragraphe ??, offre un moyen rapide et efficace pour la résolution du système (1.25). Nous rappelons que la méthode offre la possibilité d'éviter le stockage de la matrice du système, à partir du moment où l'on sait évaluer le produit matrice-vecteur. Qui plus est, le calcul du produit $\mathcal{A}^{(\alpha, \beta, \alpha_R)} \Theta$, avec $\Theta \in \mathbb{R}^{n_v}$, peut être optimisé suivant la *procédure d'assemblage* expliquée par la suite.

Soient

$$X_j = \sum_{i \in I \cup J} \mathcal{A}_{ji}^{(\alpha, \beta, \alpha_R)} \Theta_i, \quad j \in I, \quad (1.35)$$

les composantes du vecteur résultat. Elles seront construites en additionnant les contributions des trois intégrales de la formule (1.24), dont la première s'écrit :

$$X_j^{(1)} = \sum_{i \in IUJ} \left[\frac{1}{\delta t} \int_{\Omega_h} \alpha w^i w^j dx dy \right] \theta_i = \frac{1}{\delta t} \sum_{i \in IUJ} \left[\sum_{T_k \in \mathcal{T}_h} \int_{T_k} \alpha w^i w^j dx dy \right] \theta_i. \quad (1.36)$$

À j fixé, la formule élémentaire (1.31) va donner des contributions non-nulles seulement si q^j et q^i sont les sommets d'un même triangle. Nous pouvons donc écrire :

$$X_j^{(1)} = \frac{1}{\delta t} \sum_{q^j \in T_k} \alpha_K \frac{|T_k|}{12} (2\theta_j + \theta_{j+} + \theta_{j++}), \quad (1.37)$$

où α_K est la restriction de la fonction α au triangle T_k et q^j, q^{j+}, q^{j++} sont les trois sommets du triangle T_k . À partir de cette formule il peut paraître « naturel » de calculer les composantes $X_j^{(1)}$ en faisant une boucle suivant $j \in I$ et de chercher tous les triangles qui ont j comme sommet. Mais ce type de programmation ($\mathcal{O}(n_v \cdot n_t)$ opérations) est trop coûteux et peut être remplacé par un algorithme plus astucieux ($\mathcal{O}(n_t)$ opérations) :

Algorithme 1.1 *Algorithme d'assemblage pour le produit matrice-vecteur :*

```

boucle sur les triangles  $T_k \in \mathcal{T}_h$ 
  identification des sommets  $j, j+, j++$  du triangle  $T_k$ 
   $a = \frac{\alpha_K}{\delta t} \frac{|T_k|}{12}$ 
  si  $j \in I$        $X[j]$        $+= a * (2 * \theta[j]$        $+ \theta[j+]$        $+ \theta[j++])$ 
  si  $(j+) \in I$    $X[j+]$      $+= a * (2 * \theta[j+]$      $+ \theta[j++]$      $+ \theta[j])$ 
  si  $(j++) \in I$   $X[j++]$   $+= a * (2 * \theta[j++]$   $+ \theta[j]$        $+ \theta[j+])$ 
fin boucle sur les triangles

```

L'astuce consiste à balayer tous les triangles et à rajouter chaque fois la contribution des sommets du triangle à la bonne composante du vecteur $X^{(1)}$!

En utilisant le même algorithme, les deux autres contributions seront rajoutées à partir des expressions :

- pour tout $T_k \in \mathcal{T}_h$ de numéro de sommets $j, j+, j++$, on rajoute si les sommets $\in I$

$$\begin{aligned} X^{(2)}[j] & += \beta_K \cdot |T_k| [(H_k^j, H_k^j) \theta_j + (H_k^{j+}, H_k^j) \theta_{j+} + (H_k^{j++}, H_k^j) \theta_{j++}], \\ X^{(2)}[j+] & += \beta_K \cdot |T_k| [(H_k^j, H_k^{j+}) \theta_j + (H_k^{j+}, H_k^{j+}) \theta_{j+} + (H_k^{j++}, H_k^{j+}) \theta_{j++}], \\ X^{(2)}[j++] & += \beta_K \cdot |T_k| [(H_k^j, H_k^{j++}) \theta_j + (H_k^{j+}, H_k^{j++}) \theta_{j+} + (H_k^{j++}, H_k^{j++}) \theta_{j++}], \end{aligned} \quad (1.38)$$

- pour toute arête $[q^j, q^{j+}] \in \Gamma_h^R$, on rajoute si les sommets $\in I$

$$\begin{aligned} X^{(3)}[j] & += \alpha_R \cdot \frac{|q^j - q^{j+}|}{6} [2\theta_j + \theta_{j+}], \\ X^{(3)}[j+] & += \alpha_R \cdot \frac{|q^j - q^{j+}|}{6} [\theta_j + 2\theta_{j+}]. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Nous disposons maintenant de tous les développements théoriques pour créer une classe virtuelle qui va calculer le produit matrice vecteur (voir le paragraphe ??) et qui sera utilisée par la fonction `GradientConjugué` (listing ??) sans avoir besoin de la modifier !

Avant d'appliquer la méthode du gradient conjugué, il nous reste un détail technique à expliquer. Nous avons vu que cette méthode itérative converge si la matrice du système est symétrique et définie positive, ce qui n'est pas le cas de notre matrice \mathcal{A} (équation 1.26), évidemment non-symétrique !

Nous allons pourtant appliquer le gradient conjugué, mais avec une petite astuce de calcul. Écrivons, pour formaliser l'exposé, notre système linéaire sous la forme :

$$\mathcal{A}\mathcal{X} = \mathcal{B},$$

avec $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{n_v \times n_v}$ et $\mathcal{X}, \mathcal{B} \in \mathbb{R}^{n_v}$. En supposant que les sommets appartenant à Γ_h^D correspondent aux dernières n_d composantes du vecteur \mathcal{X} , nous pouvons écrire ce système par blocs :

$$\begin{bmatrix} A & A_\Gamma \\ 0 & Id \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X \\ X_\Gamma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B \\ X_\Gamma \end{bmatrix},$$

où $A \in \mathbb{R}^{(n_v - n_d) \times (n_v - n_d)}$ est donnée par l'équation (1.26) appliquée pour $j, i \in I$ et $A_\Gamma \in \mathbb{R}^{(n_v - n_d) \times n_d}$ par la même formule pour $j \in I, i \in J$. La matrice identité de taille $n_d \times n_d$ est notée par Id .

Le vecteur $X \in \mathbb{R}^{(n_v - n_d)}$ correspond aux vraies inconnues du problème et $X_\Gamma \in \mathbb{R}^{n_d}$ aux valeurs imposées par la condition de Dirichlet. Avec ces notations, le vrai problème à résoudre est :

$$AX = B - A_\Gamma X_\Gamma = B^*, \quad (1.40)$$

où la matrice A est symétrique et définie positive (cf. [?], chapitre V). Nous pouvons donc appliquer la méthode du gradient conjugué pour résoudre ce problème. Par conséquent, nous utiliserons l'algorithme ??, mais, et l'astuce intervient à ce point, avec un choix particulier des matrices et des vecteurs qui constituent les données d'entrée de l'algorithme. En choisissant d'injecter dans l'algorithme :

$$\begin{array}{lll} \text{la matrice du système,} & \text{le second membre} & \text{et la valeur initiale} \\ \mathcal{A}^* = \begin{bmatrix} A & A_\Gamma \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, & \mathcal{B}^* = \begin{bmatrix} B \\ 0 \end{bmatrix}, & \mathcal{X}^{(0)} = \begin{bmatrix} X^{(0)} \\ X_\Gamma \end{bmatrix}, \end{array}$$

nous obtenons le gradient pour la première itération :

$$\mathcal{G}^{(0)} = \mathcal{A}^* \mathcal{X}^{(0)} - \mathcal{B}^* = \begin{bmatrix} AX^{(0)} + A_\Gamma X_\Gamma - B \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} AX^{(0)} - B^* \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G^{(0)} \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Regardons maintenant le produit

$$\mathcal{A}^* \mathcal{G}^{(0)} = \begin{bmatrix} AG^{(0)} \\ 0 \end{bmatrix}$$

qui intervient dans les calculs. Nous observons que la matrice A_Γ n'a aucune contribution. En suivant l'algorithme, nous obtenons que $\mathcal{G}^{(i)} = G^{(i)}$ et $\mathcal{H}^{(i)} = H^{(i)}$ pour les $(n_v - n_d)$ composantes et $\mathcal{G}^{(i)} = \mathcal{H}^{(i)} = 0$ pour les dernières n_d composantes (évidemment, la solution étant constante pour ces points, la variation de la fonctionnelle énergie ?? suivant les directions correspondantes sera nulle). Par conséquent, l'algorithme retourne, à la convergence, le vecteur

$$\mathcal{X} = \begin{bmatrix} X \\ X_\Gamma \end{bmatrix},$$

avec X solution de (1.40).