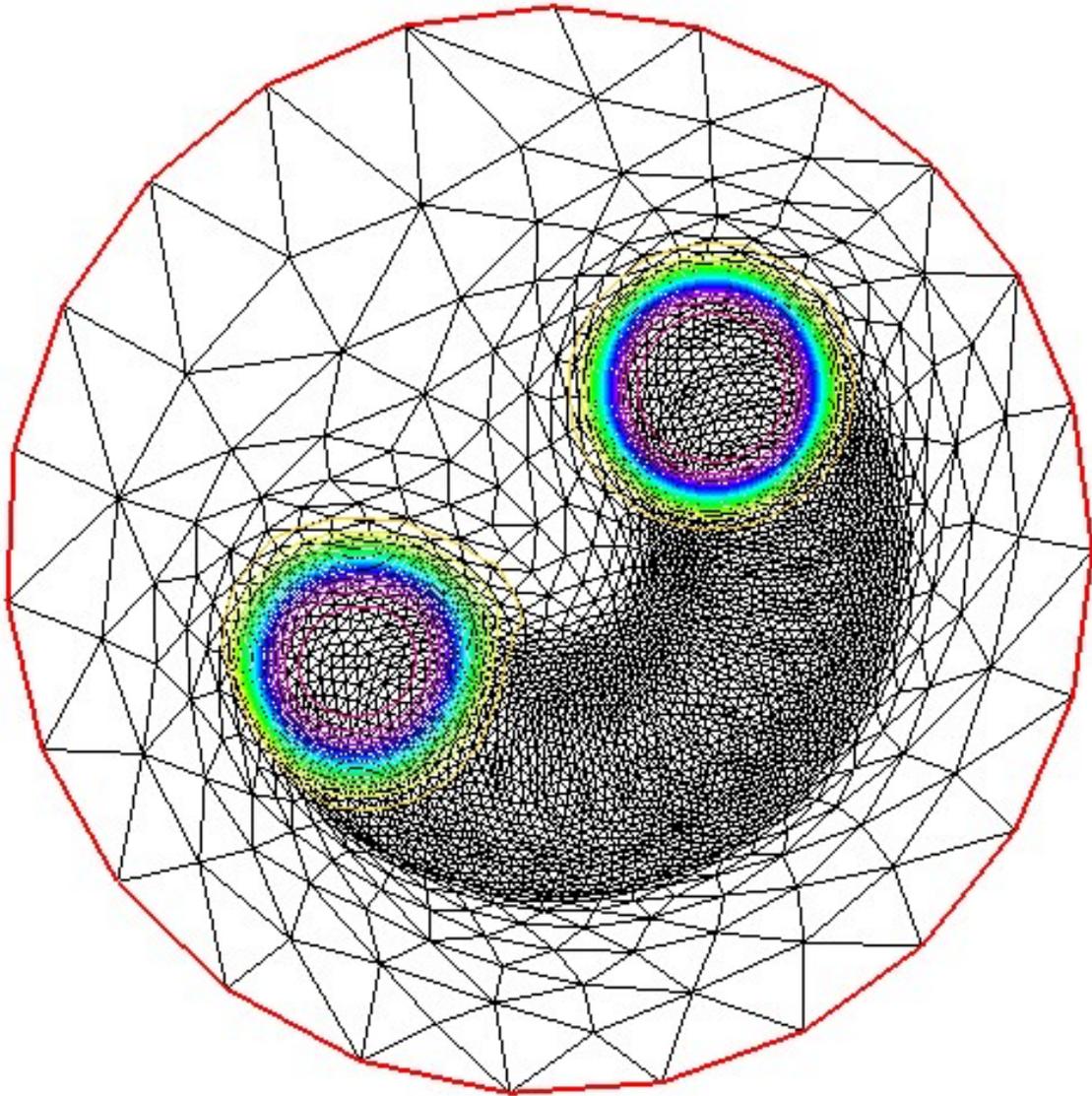

Estimation d'erreur a posteriori et adaptation de maillage

Pr. Bijan Mohammadi



Adaptation de maillage par distorsion locale de l'espace.

Motivations

Après un rappel des fondamentaux de modélisation par équations aux dérivées partielles, le but de ce cours est de découvrir les éléments suivants et programmer certains passages:

- Modélisation d'un problème d'advection-diffusion-réaction-production pour un scalaire passif,
- Discrétisation du problème sur maillage à pas variable pour les solutions stationnaires,
- Estimation de l'erreur commise dans un sens que l'on précisera,
- Mise en place d'une boucle d'adaptation de maillage par contrôle de métrique correspondant à une distorsion locale de l'espace,
- Extension de ces concepts aux problèmes instationnaires,
- Optimisation de la distribution du scalaire passif en contrôlant ses sources. Analyse de l'effet du contrôle d'erreur de discrétisation par l'adaptation de maillage sur le résultat du problème d'optimisation.

1. UN MODÈLE D'ADVECTION-DIFFUSION-DISSIPATION-PRODUCTION

Considérons le modèle suivant pour l'évolution d'une quantité $u(t, s) \geq 0$ (e.g. la température) dans un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^2$:

$$u_t + V(t, s)\nabla u - \nabla \cdot (\nu \nabla u) = -\lambda u + f(t, s), \quad s = (s_1, s_2) \in \Omega, \quad t \geq 0,$$

avec $\nu > 0$, $\lambda > 0$, $V(t, s) \in \mathbb{R}^2$ et $f(t, s) \in \mathbb{R}$.

- Décrire le rôle de chacune des expressions et quantités du modèle.
- Donner des exemples de conditions initiale et aux limites pertinentes.
- Expliciter le modèle en utilisant des dérivées partielles.

2. RÉDUCTION DE DIMENSION SPATIALE

On commence par considérer un domaine Ω infini dans la direction $s = s_2$ et de longueur L dans la direction $s = s_1$. On considère le modèle de (1) dans ce domaine:

$$u_t + V(t, s)u_s - \nu u_{ss} = -\lambda u + f(t, s), \quad s \in \Omega =]0, L[\quad t \geq 0,$$

$$u(t, 0) = u_l, \quad u_s(t, L) = 0, \quad u(0, s) = u_0(s).$$

- Interpréter les conditions aux limites en $s = 0$ et $s = L$?
- La condition initiale u_0 doit être compatible avec les conditions aux limites. Donner des exemples.
- En prenant une solution a priori $u(t, s)$, trouver $f(t, s)$. Proposer une solution stationnaire et une autre instationnaire. Ces constructions nous serviront pour l'évaluation de nos approximations dans la suite.

3. DISCRÉTISATION

- En se basant sur les schémas proposées au chapitre 10 et 12 du support du cours, quelles sont les discrétisations temporelle et spatiale utilisées dans ce code ?

- Est ce que ce code utilise un critère de stabilité en temps ? Quelle est son expression ?

On peut utiliser le théorème de Gershgorin-Hadamard, la diagonale dominante et un rayon spectral inférieur à 1 souhaités pour la matrice de l'itération pour mettre en évidence la condition de stabilité sur le pas de temps dans le cas explicite. Comparer cette analyse à l'analyse de Fourier vue en cours d'EDP en M1.

- Quel est l'expression de la viscosité numérique utilisée dans ce code ?

- Comment modifier la discrétisation de l'advection par une approximation d'ordre 1 privilégiant l'information provenant de l'amont ? Quelle est l'expression de la viscosité numérique dans ce cas ?

4. ESTIMATION D'ERREUR A POSTERIORI EN STATIONNAIRE

Intéressons-nous d'abord aux solutions stationnaires de ce problème vérifiant:

$$V(t, s)\nabla u - \nabla \cdot (\nu \nabla u) + \lambda u - f(t, s) = 0.$$

Ceci est un cas important car souvent la solution d'une équation linéaire ou nonlinéaire est obtenue par une méthode itérative qui peut être vue comme une marche en temps artificielle jusqu'à l'annulation de la dérivée temporelle.

Nous allons suivre le chapitre 18 du document du cours. On se basera aussi sur les ingrédients du chapitre 7.

Nous allons utiliser la solution explicite développée en (2) pour estimer la précision en espace de ce code.

- Tracez $\|u(t \rightarrow \infty, s) - u_h(t \rightarrow \infty, s)\|_{0,2}$ dans le cas stationnaire pour six maillages réguliers avec une taille h de maille décroissante: par exemple de $L/10$ à $L/320$.

- Identifier par moindres carrés les coefficients C et k dans les expressions:

$$\|u - u_h\|_{0,2} \leq Ch^{k+1}|u|_{2,2} \quad \text{et} \quad \|u - u_h\|_{1,2} \leq Ch^k|u|_{2,2}.$$

Quelles commentaires pouvez-vous faire sur la précision observée par rapport à celle attendue d'après les schémas utilisés ?

- Si $P_h(u)$ indique l'interpolation linéaire P^1 de la solution exacte, identifier pour chaque maillage la constante M dans l'expression:

$$\|u - u_h\|_{0,2} \leq M\|u - P_h(u)\|_{0,2}.$$

5. ADAPTATION DE MAILLAGE EN STATIONNAIRE

Ainsi, on peut espérer contrôler l'erreur sur la solution en contrôlant celle sur l'interpolation linéaire. Nous allons exploiter cette idée pour adapter le maillage.

On suit la présentation du (18.4.2) en modifiant le choix du produit scalaire Euclidien qui sert à définir les distances entre les points du maillage. Pour cela, on cherche la métrique qui équirépartit au mieux l'erreur d'interpolation.

On dispose de la majoration suivante pour l'erreur d'interpolation en élément P^1 :

$$(1) \quad \|u - P_h(u)\|_{0,2} \leq Ch^2|u|_{2,2}.$$

La majoration en norme $\|\cdot\|_{0,2}$ fait apparaître une définition homogène au carré d'une longueur dans une certaine métrique: $\|h\|_{\mathcal{M}}^2 = (h, h)_{\mathcal{M}} = h^t \mathcal{M} h$.

En pratique on ne connaît pas la solution u (sinon ce n'est pas la peine de la calculer !). On utilise cependant cette expression au sein d'un algorithme de point fixe pour le triplet (solution-métrique-maillage) $= (\mathcal{S}, \mathcal{M}, \mathcal{H})$ comme suit.

Considérons la quantité suivante à chaque noeud s_i du maillage:

$$(2) \quad \mathcal{M}_i = \max \left(\min \left(\frac{1}{\varepsilon} |\partial_s^2 u_h(s_i)|, \frac{1}{h_{\min}^2} \right), \frac{1}{h_{\max}^2} \right),$$

où $0 < \varepsilon \ll 1$ et h_{\min} et h_{\max} sont respectivement les longueurs minimale et maximale désirées (autorisées) des mailles.

La longueur du segment (s_i, s_{i+1}) dans la métrique \mathcal{M} est définie par:

$$(3) \quad l(s_i, s_{i+1}) = (s_{i+1} - s_i)^2 \frac{\mathcal{M}_{i+1} + \mathcal{M}_i}{2} = 1$$

Il s'agit donc de placer les points du maillage suivant cette loi.

- Identifier cette construction dans le code. Quelle est la loi appliquée. Implémenter la loi (3).

- Que se passe-t-il lorsque $\varepsilon \leftarrow \varepsilon/2$?

- Vérifier qu'un maillage régulier avec les maille de taille 1 dans la métrique \mathcal{M} améliore la répartition uniforme de l'erreur d'interpolation. Tracer l'évolution de cette erreur au cours des itérations de l'adaptation.

Une fois le nouveau maillage obtenu, il faut **interpoler la solution** disponible depuis l'ancien maillage sur le nouveau, par exemple en utilisant une interpolation linéaire.

- Identifier cette étape dans le code et dire comment il est possible d'en améliorer la complexité calculatoire, en évitant les redondances.

- La qualité de cette interpolation sera importante pour les calculs instationnaires. Pourquoi elle l'est moindre dans le cas stationnaire ?

- On peut ne pas interpoler la solution et recommencer les calculs à partir de rien ('from scratch' comme on dit) pour chaque nouveau maillage. Nous devrions obtenir la même solution mais le temps de calcul sera différent. Définissons la complexité calculatoire comme le cumul le long des itérations de l'adaptation du nombre d'itérations en temps K_i effectués sur le i^{eme} maillage par le nombre de points N_i de ce maillage:

$$\mathcal{C} = \sum_{i=1}^{ITER-MAX} N_i * K_i.$$

Tracer la convergence vers la solution exacte en norme $\|\cdot\|_{0,2}$ en fonction de cette complexité. Quel commentaire pouvez-vous faire ?

En résumé, l'**algorithme** de point fixe d'adaptation mis en place est le suivant.

A l'itération i d'adaptation, on note le maillage, la solution discrète de l'équation et la métrique par $\mathcal{H}_i, \mathcal{S}_i, \mathcal{M}_i$.

Initialisation :	$i = 0,$	$\mathcal{H}_0, \mathcal{S}_0 :$	donné
Tant que ($i \leq ITER - MAX$ ou Test d'arrêt) Faire			
Calculer la métrique :		$(\mathcal{H}_i, \mathcal{S}_i) \rightarrow$	\mathcal{M}_i
Générer le nouveau maillage :		$(\mathcal{H}_i, \mathcal{M}_i) \rightarrow$	\mathcal{H}_{i+1}
Interpoler l'ancienne solution :		$(\mathcal{H}_i, \mathcal{S}_i, \mathcal{H}_{i+1}) \rightarrow$	$\overline{\mathcal{S}}_{i+1}$
Calculer la nouvelle solution:		$(\mathcal{H}_{i+1}, \overline{\mathcal{S}}_{i+1}) \rightarrow$	\mathcal{S}_{i+1}
	$i ++$		
Fin			

- Comment définir un critère d'arrêt pour cet algorithme de point fixe afin d'éviter d'aller à $ITER - MAX$ systématiquement; en d'autres termes, comment mesurer la contraction ?

Ces idées se généralisent en dimension supérieure. Nous utiliserons le logiciel **Freefem**. Comme nous avons dit dans l'introduction, il faut toujours utiliser les outils aboutis qui existent, plutôt qu'en redévelopper.

On considère le fichier `adapsteady.edp`.

- Identifier les paramètres d'adaptation dans ce script. Comment évolue le nombre de points du maillage lorsque $\varepsilon \leftarrow \varepsilon/2$?

- Introduire le critère d'arrêt mis au point plus haut.

- Ecrire un code qui lit deux maillages successifs et fait les opérations suivantes:

- calcul du volume du domaine, d'une part en utilisant l'aire des triangles, et d'autre en utilisant la formule de Green et le contour du domaine.

- interpolation d'une solution scalaire entre deux maillages (c'est ce que fait **Freefem** lorsqu'on écrit `u=u`).

- Appeler votre exécutable à partir de **Freefem** et visualiser la solution interpolée.

6. ESTIMATION D'ERREUR EN INSTATIONNAIRE

Nous allons, toujours en utilisant la solution explicite développée en (2), mais dans le cas instationnaire, estimer la précision en espace et en temps de notre code.

On considère désormais les éléments qui permettent de construire `advdiffadap.exe`.

- Tracer $|u(t, s = L/2) - u_h(t, s = L/2)|$ pour $t \in [0, 1s]$ pour nos maillages réguliers, ainsi que $\|u(t = 1s, s) - u_h(t = 1s, s)\|_{0,2}$. Quels commentaires par rapport à l'analyse de la section 4 ?
- Modifier le code en implémentant le schéma RK2 à faible stockage donné en (2.5.4). Quels impacts sur les résultats précédents ?

7. ADAPTATION DE MAILLAGE EN INSTATIONNAIRE

S'agissant d'une solution instationnaire, il n'est pas concevable d'espérer un point fixe pour l'ensemble (solution-métrique-maillage) par notre algorithme d'adaptation.

On peut cependant introduire un nouveau concept de point fixe 'instationnaire' en s'inspirant de l'algorithme donné en (2.5.8).

Ainsi, on modifie l'algorithme d'adaptation donné en section 5 suivant la proposition du (18.7.1).

- Identifier la boucle de point fixe pour l'adaptation de maillage dans `advdiffadap.f90`.
- Identifier l'implémentation de l'intersection temporelle des métriques dans le code.
- Observer l'impact de l'adaptation instationnaire du maillage spatial sur les estimateurs d'erreur précédents.

Comme pour le cas stationnaire, utiliser `Freefem` et `adap.edp` pour une illustration bidimensionnelle.

- Quelle est l'équation résolue ? Faites évoluer le script pour résoudre l'équation considérée dans `adapsteady.edp`.
- Etudier l'effet d'une convergence partielle de notre point fixe sur la solution.

8. EVALUATION DE PERFORMANCES D'UN CODE BOÎTE-NOIRE

Vous êtes ingénieur calcul. Vous devez équiper votre entreprise, dont le domaine d'activité est la quantification des risques industriels, d'un logiciel de calcul. Vous devez effectuer cette évaluation uniquement à partir de l'exécutable du produit, sans jamais connaître le code source. L'acquisition aura lieu uniquement si le produit respecte certaines spécifications.

Ainsi, vous devez évaluer `Freefem` et donner à votre hiérarchie une idée de ses performances (du logiciel). Vous devez, en particulier, évaluer sa capacité à estimer les temps de transport et les niveaux

de pollutions atmosphériques en considérant le modèle développé dans `adap.edp`.

En vous inspirant de la section (12.7) et connaissant la solution exacte du problème, pouvez-vous dire:

- si le code avance, retarde ou donne le bon temps de transport ?
- quel est l'erreur commise sur l'estimation du maximum du niveau de pollution atteint en un point donné (un centre ville par exemple) ?

9. APPLICATION À L'OPTIMISATION

Nous suivrons la discussion du chapitre 17.

Pour faciliter la présentation, on se restreint dans la suite au cas stationnaire.

On souhaite analyser l'impact de la précision du calcul de la solution du problème direct (i.e. notre équation qu'on notera $F_h(u_h(x, s)) = 0$) sur la solution d'un problème inverse faisant intervenir ce problème direct.

Ici x désigne les paramètres d'optimisation qui sont les variables indépendantes du problème que l'on cherche à déterminer et $u_h(x, s) = u_h(x, t \rightarrow \infty, s)$ est la solution stationnaire de notre équation obtenue par la procédure décrite jusqu'ici.

Notre problème d'optimisation s'écrit:

$$\min_{x \in \mathcal{O}_{ad}} J(u_h(x, s)) \quad \text{sous la contrainte} \quad F_h(u_h(x, s)) = f(x).$$

Le terme source f contient N sources de la forme:

$$\alpha_i \delta(s_i) \quad (\sim \alpha_i \exp(-\beta(s - s_i)^2), \beta \gg 1)$$

que l'on souhaite optimiser:

$$f = \sum_{i=1, \dots, N} \alpha_i \delta(s_i).$$

Ainsi, les paramètres de contrôle sont $x = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)^t \in (\mathbb{R}_*^+)^N$.

On souhaite contrôler la distribution de $u_h(x, s)$ dans une région donnée $\omega_h \subset \Omega_h =]0, L[_h$. Plus précisément, nous voulons déterminer, par une méthode de moindres carrés, les valeurs à donner aux puissances α_i des N sources pour obtenir une distribution de $u_h(x, s)$ la plus proche possible d'une cible donnée $u_{des,h}(s)$ sur ω . C'est à dire, nous voulons minimiser:

$$(4) \quad J(u_h(x, s)) = \frac{1}{2} \int_{\omega_h} (u_h(x, s) - u_{des,h}(s))^2 ds.$$

- Montrer (en utilisant le principe de superposition), que l'on peut décomposer la solution inconnue en la combinaison de $N + 1$ solutions:

$$u_h = u_{0,h} + \sum_{i=1}^N \alpha_i u_{i,h} = u_{0,h} + x^t U_h,$$

où la solution de base $u_{0,h}(s)$ s'obtient par résolution du problème direct sans terme source, en prenant en compte les conditions aux limites non-homogènes. Les N solutions élémentaires $u_{i,h}(x = (0, \dots, \delta_i, \dots, N), s)$, $i = 1, \dots, N$ s'obtiennent, respectivement, en mettant à un la puissance associée et en annulant les $N - 1$ autres, ainsi que les conditions aux limites (uniquement des conditions homogènes).

Ainsi, une fois déterminées la solution de base $u_{0,h}(s)$ et les solutions élémentaires $u_{i,h}(x, s)$, $i = 1, \dots, N$, les coefficients α_i , $i = 1, \dots, N$, de la solution optimale sont solutions d'un problème de moindres carrés.

- En écrivant les conditions d'optimalité d'ordre un de notre problème de moindres carrés, montrer qu'on obtient les coefficients α_i , $i = 1, \dots, N$ en résolvant un système linéaire de N équations à N inconnues: $Ax = B$ avec

$$A_{i,j} = \int_{\omega_h} u_{i,h}(x, s) u_{j,h}(x, s) ds,$$

et

$$B_i = \int_{\omega_h} (u_{0,h}(s) - u_{des,h}(s)) u_{i,h}(x, s) ds, \quad i, j = 1, \dots, N.$$

- Ainsi avec $N = 2$, trois calculs directs suffisent pour trouver x_{opt} . Mettez en place la procédure de calcul.

- Attention si l'adaptation de maillage est utilisée lors des calculs des solutions u_{i,h_i} , elles ne seront pas disponibles sur le même maillage (i.e. $h_i \neq h_j$ si $i \neq j$). Comment calculer alors numériquement les expressions $A_{i,j}$ et B_i ?

- Quelle doit être la précision de l'intégration numérique approchée pour ne pas introduire d'erreur supplémentaire à ce niveau ? Ces calculs sont semblables à l'évaluation des éléments d'une matrice de masse en éléments finis que l'on sait évaluer exactement par intégration numérique. Le calcul sera exact si la précision de l'approximation choisie est suffisante. En tout cas, il faut s'assurer que cette nouvelle erreur soit d'un ordre inférieur que l'erreur d'interpolation afin de conserver, dans le cas d'une quadrature approchée, une erreur du même ordre que dans le cas d'intégration exacte.

- Comment analyser l'impact de l'adaptation du maillage sur x_{opt} ? Peut-on donner une solution optimale indépendante du maillage du problème direct ?

Cette question est une des difficultés des problèmes inverses, surtout en nonlinéaire et en grande dimension. En effet, le coût calculatoire de ces problèmes souvent oblige à une sous-résolution du problème direct. Il est donc bon d'en avoir conscience et de pouvoir, éventuellement, quantifier l'impact de cette sous-résolution sur la solution du problème inverse.

10. ANALYSE DE SENSIBILITÉ ET PROPAGATION RÉTROGRADE DES INCERTITUDES

Nous avons vu comment optimiser la distribution des puissances α_i pour réaliser une déformation cible. Et nous avons vu que la solution optimale est calculée très rapidement une fois que les solutions élémentaires sont calculées, en pré-calcul et en parallèle.

Les solutions élémentaires sont indépendantes des incertitudes éventuelles de la solution cible qui peut être prescrite, non pas de façon déterministe, mais uniquement aux travers des intervalles d'admissibilité.

La rapidité d'estimation des paramètres optimaux permet d'analyser la sensibilité de la solution optimale aux petites perturbations de la déformation cible et aussi d'envisager une propagation rétrograde des incertitudes.

Nous avons vu que la solution du problème d'optimisation est solution d'un système linéaire:

$$(5) \quad B(u_{des}) = Ax,$$

Supposons pour simplifier que B est à moyenne nulle. La matrice de covariance $Cov_B \in \mathbb{R}^{N \times N}$ est donnée par

$$Cov_B = \mathbb{E}(BB^t) = \mathbb{E}(A xx^t A^t) = A \mathbb{E}(xx^t) A^t = A Cov_x A^t.$$

Pour estimer Cov_x , nous devons inverser cette relation en utilisant une formulation aux moindres carrées, par exemple, en cherchant Cov_x qui minimise:

$$\frac{1}{2} \langle A Cov_x A^t, A Cov_x A^t \rangle - \langle Cov_B, A Cov_x A^t \rangle.$$

La condition d'optimalité d'ordre un par rapport à Cov_x donne:

$$A^t A Cov_x A^t A - A^t Cov_B A = 0,$$

et

$$Cov_x = (A^t A)^{-1} A^t Cov_B A (A^t A)^{-1},$$

et finalement,

$$(6) \quad Cov_x = A^{-1} Cov_B A^{-t} = (A^t Cov_B^{-1} A)^{-1}.$$

On voit que si on dispose d'une estimation de Cov_B à partir de l'incertitude sur u_{des} , on peut accéder facilement à une estimation de l'incertitude sur les paramètres d'optimisation. Nous rappelons que

$$\begin{aligned} B &= \int_{\omega} (u_{des}(s) - u_0(s)) u_i(s) \\ &= \int_{\omega} u_{des}(s) u_i(s) - \int_{\omega} u_0(s) u_i(s). \end{aligned}$$

Sachant que l'incertitude concerne uniquement u_{des} , on peut estimer Cov_B par N simulations Monte Carlo car il est raisonnable de supposer que Cov_B est diagonale.

11. OPTIMISATION PAR MÉTHODE DE DESCENTE ET ADJOINT

La méthode précédente tire avantage de la linéarité du problème direct. En nonlinéaire, on est amené à utiliser, par exemple, une méthode de descente pour construire une suite minimisante:

$$x_0 = \text{donné}, \quad x^{n+1} = x^n - \rho \nabla_x J(u_h(x^n, s)), \quad \rho > 0.$$

Le calcul de $\nabla_x J$ n'est pas aisé (voir 17.7). Par exemple, si la dimension de l'espace de contrôle est grande, on utilise la méthode de l'adjoint (voir 17.7.4 et plus bas).

Nous verrons comment utiliser cette information pour estimer l'erreur de troncature sur J comme décrit en (18.4.3). Nous verrons aussi comment modifier la métrique pour définir un maillage adapté au calcul de J qui est la quantité d'intérêt, alors que les constructions précédentes s'intéressent à l'état u .

11.1. Problème adjoint et adaptation de maillage. Il arrive que l'on souhaite uniquement optimiser le maillage pour le calcul d'une fonctionnelle locale basée sur la variable du problème, et non pas de façon précise pour le calcul de la variable elle-même. Par exemple, on peut souhaiter calculer la traînée d'un avion avec une certaine précision, sans s'intéresser aux détails de l'écoulement loin de l'avion.

En particulier, on utilisera la variable adjointe, que l'on présente brièvement. Le calcul du gradient $\nabla_x J$ implique le calcul de $\partial u_h / \partial x$ qui est coûteux:

$$\nabla_x J = \frac{\partial J}{\partial x} + \frac{\partial J}{\partial u_h} \frac{\partial u_h}{\partial x},$$

mais qui peut être vu formellement comme:

$$\nabla_x J = \frac{\partial J}{\partial x} + \frac{\partial J}{\partial u_h} \left(\frac{\partial u_h}{\partial F_h} \right)^{-1} \frac{\partial F_h}{\partial x}.$$

La technique adjointe consiste alors à introduire le système intermédiaire suivant:

$$v_h^T \left(\frac{\partial F_h}{\partial u_h} \right) = \frac{\partial J}{\partial u_h},$$

ce qui permet d'accéder au gradient dJ/dx par:

$$\nabla_x J = \frac{\partial J}{\partial x} + v_h^T \frac{\partial F_h}{\partial x}.$$

On peut utiliser la variable adjointe pour définir un maillage optimal pour le calcul de J , contrôlant l'erreur de troncature sur J :

$$\varepsilon_J = |J(u) - J(u_h)|.$$

Dans ces discussions, nous avons supposé que le calcul de la fonctionnelle était exact. Dans le cadre d'une intégration approchée, il faudrait introduire une fonctionnelle J_h discrète et prendre en compte l'erreur associée. Cette erreur est, en général, faible.

L'erreur de troncature sur J peut être liée à l'erreur δu_h (i.e. $u = u_h + \delta u_h$) sur l'état par:

$$J(u) - J(u_h) = \frac{\partial J}{\partial u_h} \delta u_h = \frac{\partial J}{\partial u_h} \left(\frac{\partial F_h}{\partial u_h} \right)^{-1} F_h(u),$$

car

$$F_h(u) = F_h(u_h) + \frac{\partial F_h}{\partial u_h} \delta u_h = \frac{\partial F_h}{\partial u_h} \delta u_h,$$

car $F_h(u_h) = 0$ par définition. Ce qui donne, en utilisant la définition de la variable adjointe v_h :

$$\varepsilon_J = |J(u) - J(u_h)| = |v_h^T F_h(u)|.$$

Ainsi, si l'on connaît une estimation de l'erreur de troncature $F_h(u)$, on en obtient une pour J .

Cette connaissance peut être issue d'une analyse théorique. On peut aussi l'estimer à partir de comportements observés sur des maillages obtenus par raffinements successifs pour une configuration pour laquelle on connaît une solution exacte de $F(u) = 0$.

En effet, on s'attend à une majoration pour le résidu de la forme:

$$\|F_h(u)\| \leq Ch^p \|\nabla^q u\|,$$

la constante C et le comportement (p et q) peuvent être identifiés à partir de ces mesures. En particulier, si $p = q = 2$ on peut appliquer ce qui a été présenté pour les métriques et nous pouvons modifier la définition de la métrique \mathcal{M} donnée en (7) en introduisant l'adjoint:

$$(7) \quad \mathcal{M}_i = \min \left(\max \left(\frac{1}{\varepsilon} |v_h(s_i)| |\partial_s^2 u_h(s_i)|, \frac{1}{h_{\min}^2} \right), \frac{1}{h_{\max}^2} \right),$$

Ainsi, on exige un maillage plus fin là où l'adjoint est grand indiquant une zone dont l'influence sur la fonctionnelle est importante.

11.2. Adjoint de notre problème en 1. Revenons à notre équation de 1 où le contrôle x est en second membre:

$$u_t + V(t, s)u_s - \nu u_{ss} = -\lambda u + f(x), \quad s \in \Omega =]0, L[\quad t \geq 0,$$

$$u(t, 0) = u_l, \quad u_s(t, L) = 0, \quad u(0, s) = u_0(s).$$

Nous voulons calculer $\nabla_x J$ pour J de la forme (4) avec une dépendance temporelle:

$$(8) \quad J(u(x)) = \int_Q j(x, t, s) = \frac{1}{2} \int_Q (u(x, s, t) - u_{des}(s, t))^2,$$

Où $Q = (0, L) \times (0, T)$. On a

$$\nabla_x J = \int_{(0,L) \times (0,T)} (j_x + j_u u_x).$$

Pour notre fonctionnelle, $J_x = 0$ et nous pouvons écrire formellement:

$$(9) \quad u_{x,t} + V(t, s)u_{x,s} - \nu u_{x,ss} + \lambda u_x - f'(x) = 0,$$

$$u_x(t, 0) = 0, \quad u_{x,s}(t, L) = 0, \quad u_x(0, s) = 0.$$

Pour accéder à u_x nous devons donc résoudre N problèmes directs. Considérons cette équation sous forme faible:

$$\int_{(0,L) \times (0,T)} (u_{x,t} + V(t, s)u_{x,s} - \nu u_{x,ss} + \lambda u_x - f'(x))v = 0, \quad \forall v,$$

où v appartient au même espace que u et telle que $v(s, t = T) = v(s = 0, t) = Vv(s = L, t) + \nu v_s(s = L, t) = 0$. Intégrant par parties, on a:

$$\begin{aligned} - \int_{(0,L)} v(s, 0)u_x(s, 0) + \int_{(0,L) \times (0,T)} (-v_t - V(t, s)v_s - \nu v_{ss} + \lambda v)u_x \\ - \int_{(0,L) \times (0,T)} f'(x)v = 0, \quad \forall v. \end{aligned}$$

Ici la condition initiale ne dépend pas de x , ce qui implique $u_x(s, 0) = 0$.

Introduisons la variable adjointe v solution de l'équation rétrograde en temps suivante:

$$(10) \quad v_t - Vv_s - \nu v_{ss} + \lambda v = J_u = u - u_{des},$$

$$v(s, t = T) = v(s = 0, t) = v_s(s = L, t) = 0.$$

Ce qui permet d'écrire:

$$\int_{(0,L) \times (0,T)} J_u u_x = \int_{(0,L) \times (0,T)} (v_t - Vv_s - \nu v_{ss} + \lambda v)u_x$$

$$= \int_{(0,L) \times (0,T)} f'(x)v.$$

Ce qui donne:

$$\nabla_x J|_i = \int_{(0,T)} v(s_i), \quad i = 1, \dots, N.$$

-Vérifier les calculs.

-Quelle est la complexité en termes de stockage de l'information pour pouvoir calculer l'adjoint par integration rétrograde ?

-Refaire les calculs avec l'équation nonlinéaire suivante:

$$u_t + uu_s - \nu u_{ss} = -\lambda u + f(x).$$

Quelles nouvelles conséquences en termes de stockage ?

Une façon de valider le calcul de l'adjoint est de vérifier si le gradient $\nabla_x J$ est correct. On peut, par exemple, comparer le résultat avec un calcul du gradient par une approximation aux différences finies qui est la méthode la plus utilisée en pratique pour le calcul du gradient d'une fonctionnelle car elle convient aux logiciels boîtes-noires.

$$\nabla_x J|_i = \frac{1}{\varepsilon} [J(x + \varepsilon e_i, u(x + \varepsilon e_i)) - J(x, u(x))] + O(\varepsilon).$$

Lors de l'utilisation de cette technique, les difficultés sont:

- (1) choix difficile pour l'incrément ε , surtout si les paramètres ont des dimensions différentes, ce qui implique souvent des incréments différents pour chaque variable.
- (2) erreurs dans la soustraction sur ordinateur de nombres réels voisins.
- (3) complexité proportionnelle à la dimension de x .

Les deux premières difficultés peuvent être réduites en utilisant des différences finies centrées, en doublant la complexité calculatoire:

$$\nabla_x J|_i = \frac{1}{2\varepsilon} [J(x + \varepsilon e_i, u(x + \varepsilon e_i)) - J(x - \varepsilon e_i, u(x - \varepsilon e_i))] + O(\varepsilon^3).$$

S'agissant d'une validation, en grande dimension, il n'est pas nécessaire de faire le calcul pour toutes les composantes de x .

Le programme `advdiffadapadj` propose une implémentation de l'ensemble de cette discussion.

Quelle est la fonctionnelle considérée ?

Quelle est l'approximation aux différences finies utilisée ?

On peut étendre cette idée au cas de plusieurs fonctionnelles dans le cadre d'une optimisation multi-critère en calculant un adjoint par fonctionnelle, une métrique par adjoint et en intersectant les métriques associées.