Certification d'erreurs dans des simulations numériques
Préservation d'invariants par post-traitement et adaptivité (maillage, schéma, solveurs, modèle) pour les besoins industriels

Ecole d'été CEA/EDF/INRIA d'analyse numérique

27 juin – 1er juillet 2022

Mickaël Abbas, ingénieur-chercheur, EDF R&D - ERMES[†]
Ludovic Chamoin, Professeur, ENS Paris Saclay[‡]
Erell Jamelot, Ingénieure de recherche, CEA Saclay[§]
François Madiot, Ingénieur de recherche, CEA Saclay[§]
Pascal Omnes, Directeur de recherche, CEA Saclay[§]
Martin Vohralík, Directeur de recherche, Inria Paris & Ecole des Ponts[¶]

1 Certification d'erreurs dans des simulations numériques

La simulation numérique des équations aux dérivées partielles (EDPs) est devenue un outil indispensable pour trouver des solutions approchées de problèmes physiques. Elle mène à plusieurs questions importantes :

- Quelle est l'**erreur** dans l'**approximation numérique** ?
- Peut-on **certifier le résultat**, donner une marge de sûreté ?
- Peut-on estimer l'erreur dans des **quantités d'intérêt** identifiées par l'utilisateur (valeur ponctuelle de la solution, flux à travers une partie du bord) ?
- Peut-on disposer de ces informations pour un **coût abordable**, largement inférieur par rapport au coût de la simulation numérique elle-même ?

C'est la théorie des estimations d'erreur a posteriori [1, 10, 16, 6, 13] et notamment des contributions récentes [9, 5, 11, 2, 14] qui permettent de donner des réponses affirmatives à ces questions. L'exposition de ces dernières avancées, en détail pour des problèmes modèles simples, sera le pilier central de l'école proposée.

2 Préservation d'invariants par post-traitement

La particularité des approches dans [9, 5, 2, 14] est qu'elles fournissent des **améliorations de l'approximation numérique**. Ces améliorations permettent de satisfaire une autre propriété hautement souhaitée dans des simulations numériques : la **préservation d'invariants**. Plus précisément, par exemple, il s'avère qu'il n'est pas complètement indispensable d'utiliser un schéma numérique dédié à la conservation locale de masse. On peut retrouver un champ localement conservatif pour un schéma non-conservatif par construction via un **post-traitement local** qui fait déjà partie de l'évaluation d'erreur a posteriori. Ceci s'applique de façon similaire pour des quantités primales. Une journée dans l'école sera consacrée à ce sujet.

3 Adaptivité de maillage, du schéma et des solveurs

La théorie des estimations d'erreur a posteriori est également à la base du concept de l'**adaptivité** de **maillage** [3, 15, 12], mais aussi dans un sens beaucoup plus large, incluant le **schéma** [11] ou les **solveurs linéaires et non linéaires** [4, 8, 7]. Pour donner aux auditeurs une idée de la puissance d'une telle adaptivité, des séminaires scientifiques aborderont des utilisations pratiques permettant de :

†. mickael.abbas@edf.fr
‡. ludovic.chamoin@ens-paris-saclay.fr
§. erell.jamelot@cea.fr, francois.madiot@cea.fr, pascal.omnes@cea.fr
¶. martin.vohralik@inria.fr

- donner une **borne garantie** de l'**erreur totale** à chaque étape (pas de temps, itération des solveurs) de l'algorithme numérique ;
- **estimer** les différentes **composantes d'erreur**, associées à la discrétisation en temps, discrétisation en espace, schéma, solveur non linéaire ou solveur linéaire ;
- équilibrer les différentes composantes d'erreur via un **choix adaptatif** du **pas de temps** et du **maillage**, des **paramètres** du schéma, ou des **critères d'arrêt** des solveurs linéaires et non linéaires ;
- concevoir des **solveurs** imbriqués **adaptatifs** pour **réduire** de façon importante les **temps de calcul** ;
- obtenir une meilleure **robustesse** des **codes de simulation**.

4 Contrôle a posteriori et adaptivité pour les besoins industriels

La problématique de la gestion automatique des calculs impacte à présent diverses applications des simulations numériques en ingénierie. Aujourd'hui, on l'étudie plus largement en lien avec l'analyse multiéchelle, la réduction de modèle, le contrôle optimal, les problèmes inverses, la quantification d'incertitudes, le traitement de problèmes fortement non-linéaires avec des instabilités... Dans toutes ces thématiques, l'objectif est de calculer juste au juste coût, en trouvant le meilleur compromis entre l'efficacité et la précision, en fonction de l'objectif de la simulation, avec une marge d'erreur de simulation garantie. Une partie des présentations et discussions abordera donc ces thématiques, en focalisant sur les besoins industriels et les défis de recherche actuels. On peut lister par exemple :

- l'**adaptivité** du **modèle** (choix du modèle d'EDP comme par exemple la LES (simulations aux grandes échelles), choix des composantes et paramètres du modèle) et choix de la **régularisation** pour des problèmes raides ou dégénérés (forme, paramètres) ;
- l'**adaptivité multiéchelle** ;
- la **quantification d'incertitudes** ;
- l'apport d'outils nouveaux, tels que ceux en lien avec le **machine learning**, au service du contrôle des simulations numériques.

Enfin, pour contribuer au **transfert** des outils de recherche vers l'**industrie**, les applications suivantes vont être considérées :

- mécanique des fluides visqueux ;
- diffusion et transport simplifié en neutronique ;
- mécanique du solide ;
- écoulements complexes en milieux poreux (stockage des déchets, séquestration géologique du CO_2).

Organisation pratique

- Matins de lundi–jeudi : exposition en détail des idées de base des Sections 1–3. Cours dispensés par des experts internationaux.
- Après-midis de lundi–jeudi : mise en œuvre informatique des idées de base des Sections 1–3. Travaux pratiques encadrés par des assistants.
- Soirées de lundi–jeudi : idées avancées. Séminaires scientifiques par des invités experts.
- Vendredi : séminaires scientifiques & discussion des expériences industrielles liées à la Section 4.
- Chaque participant arrive avec un ordinateur portable (il y aura un nombre limité d'ordinateurs à prêter). La mise en œuvre informatique se fera dans un code de calcul que chacun installe au préalable. Très probablement FreeFem++.

Références

[1] AINSWORTH, M., AND ODEN, J. T. *A posteriori error estimation in finite element analysis.* Pure and Applied Mathematics (New York). Wiley-Interscience [John Wiley & Sons], New York, 2000.

[2] BECKER, R., CAPATINA, D., AND LUCE, R. Local flux reconstructions for standard finite element methods on triangular meshes. *SIAM J. Numer. Anal. 54*, 4 (2016), 2684–2706.

[3] DÖRFLER, W. A convergent adaptive algorithm for Poisson's equation. *SIAM J. Numer. Anal. 33*, 3 (1996), 1106–1124.

[4] ERN, A., AND VOHRALÍK, M. Adaptive inexact Newton methods with a posteriori stopping criteria for nonlinear diffusion PDEs. *SIAM J. Sci. Comput. 35*, 4 (2013), A1761–A1791.

[5] ERN, A., AND VOHRALÍK, M. Polynomial-degree-robust a posteriori estimates in a unified setting for conforming, nonconforming, discontinuous Galerkin, and mixed discretizations. *SIAM J. Numer. Anal. 53*, 2 (2015), 1058–1081.

[6] GEORGE, P. L., BOROUCHAKI, H., ALAUZET, F., LAUG, P., LOSEILLE, A., AND MARÉCHAL, L. *Meshing, geometric modeling and numerical simulation. 2.* Numerical Methods in Engineering Series. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, 2019. Metrics, meshes and mesh adaptation, Geometric modeling and applications set. Vol. 2.

[7] HABERL, A., PRAETORIUS, D., SCHIMANKO, S., AND VOHRALÍK, M. Convergence and quasi-optimal cost of adaptive algorithms for nonlinear operators including iterative linearization and algebraic solver. *Numer. Math. 147*, 3 (2021), 679–725.

[8] HEID, P., AND WIHLER, T. P. Adaptive iterative linearization Galerkin methods for nonlinear problems. *Math. Comp. 89*, 326 (2020), 2707–2734.

[9] LADEVÈZE, P., AND CHAMOIN, L. Calculation of strict error bounds for finite element approximations of non-linear pointwise quantities of interest. *Internat. J. Numer. Methods Engrg. 84*, 13 (2010), 1638–1664.

[10] LADEVÈZE, P., AND PELLE, J.-P. *Mastering calculations in linear and nonlinear mechanics.* Mechanical Engineering Series. Springer-Verlag, New York, 2005. Translated from the 2001 French original by Theofanis Strouboulis.

[11] LE, A. H., AND OMNES, P. An *a posteriori* error estimation for the discrete duality finite volume discretization of the Stokes equations. *ESAIM Math. Model. Numer. Anal. 49*, 3 (2015), 663–693.

[12] MORIN, P., SIEBERT, K. G., AND VEESER, A. A basic convergence result for conforming adaptive finite elements. *Math. Models Methods Appl. Sci. 18*, 5 (2008), 707–737.

[13] NOCHETTO, R. H., SIEBERT, K. G., AND VEESER, A. Theory of adaptive finite element methods : an introduction. In *Multiscale, nonlinear and adaptive approximation.* Springer, Berlin, 2009, pp. 409–542.

[14] PAPEŽ, J., RÜDE, U., VOHRALÍK, M., AND WOHLMUTH, B. Sharp algebraic and total a posteriori error bounds for h and p finite elements via a multilevel approach. Recovering mass balance in any situation. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 371* (2020), 113243.

[15] STEVENSON, R. Optimality of a standard adaptive finite element method. *Found. Comput. Math. 7*, 2 (2007), 245–269.

[16] VERFÜRTH, R. *A posteriori error estimation techniques for finite element methods.* Numerical Mathematics and Scientific Computation. Oxford University Press, Oxford, 2013.