Inscription pour les projets numériques avant demain !

APPROXIMATION NUMERIQUE ET OPTIMISATION

G. ALLAIRE

4 Septembre 2018

CHAPITRE II (début)

☞ Différences finies pour l'équation de la chaleur.

☞ Consistance, précision, stabilité (analyse de Fourier et principe du maximum).

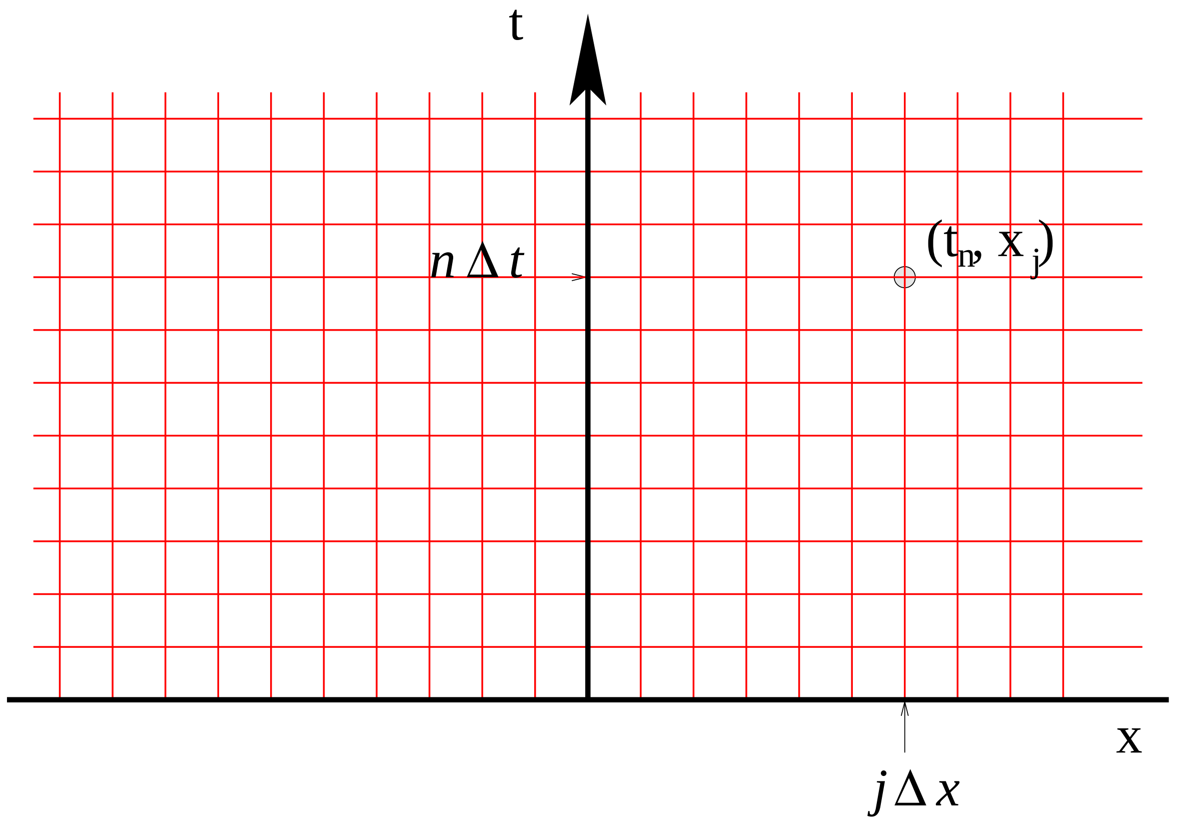
☞ Convergence (théorème de Lax).

$$\boxed{\text{Equation de la chaleur}}$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \dfrac{\partial u}{\partial t} - \nu \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 & \text{dans } (0,1) \times \mathbb{R}_*^+ \\ u(t,0) = u(t,1) = 0 & \text{sur } \mathbb{R}_*^+ \\ u(t=0,x) = u_0(x) & \text{dans } (0,1) \end{array} \right.$$

Remarque. On verra d'autres modèles la semaine prochaine...

Différences finies



Maillage: discrétisation de l'espace et du temps

$$(t_n, x_j) = (n\Delta t, j\Delta x) \quad \text{pour} \quad n \geq 0, j \in \mathbb{Z}$$

$\Delta t =$ pas de temps, $\Delta x =$ pas d'espace (supposés "petits").

Principe des différences finies

On calcule des approximations

$$u_j^n \approx u(t_n, x_j)$$

On remplace les dérivées par des différences finies (pas d'unicité des formules d'approximation).

On utilise des formules de Taylor. Par exemple

$$\begin{aligned} -u(t, x - \Delta x) + 2u(t, x) - u(t, x + \Delta x) = \quad & -(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) \\ & - \frac{(\Delta x)^4}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(t, x) + \mathcal{O}\Big((\Delta x)^6\Big) \end{aligned}$$

On en déduit la formule centrée (en espace)

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t_n, x_j) \approx \frac{-u_{j-1}^n + 2u_j^n - u_{j+1}^n}{(\Delta x)^2}$$

Exemples de schémas pour l'équation de la chaleur

➪ **schéma d'Euler explicite:**

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \nu \frac{-u_{j-1}^n + 2u_j^n - u_{j+1}^n}{(\Delta x)^2} = 0$$

➪ **schéma d'Euler implicite:**

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \nu \frac{-u_{j-1}^{n+1} + 2u_j^{n+1} - u_{j+1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} = 0$$

➪ **θ-schéma:**

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \theta\nu \frac{-u_{j-1}^{n+1} + 2u_j^{n+1} - u_{j+1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + (1-\theta)\nu \frac{-u_{j-1}^n + 2u_j^n - u_{j+1}^n}{(\Delta x)^2} = 0$$

➪ **schéma de Gear:**

$$\frac{3u_j^{n+1} - 4u_j^n + u_j^{n-1}}{2\Delta t} + \nu \frac{-u_{j-1}^{n+1} + 2u_j^{n+1} - u_{j+1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} = 0$$

Quelques notations

On note $F(u) = 0$ une équation aux dérivées partielles.

Pour des indices n, j, un schéma aux différences finies est noté

$$F_{\Delta t, \Delta x}\left(\{u_{j+k}^{n+m}\}_{m^- \le m \le m^+,\ k^- \le k \le k^+}\right) = 0$$

où les entiers m^-, m^+, k^-, k^+ définissent la largeur du stencil.

Consistance et précision

Définition. Un schéma aux différence finies est dit **consistant** avec l'EDP $F(u) = 0$, si, pour toute solution $u(t,x)$ suffisamment régulière, **l'erreur de troncature** du schéma, définie par

$$F_{\Delta t, \Delta x}\left(\{u(t+m\Delta t, x+k\Delta x)\}_{m^- \le m \le m^+,\ k^- \le k \le k^+}\right),$$

tend vers zéro lorsque Δt et Δx tendent vers zéro **indépendemment**.

On dit que le schéma est **précis** à l'ordre p en espace et à l'ordre q en temps si

$$F_{\Delta t, \Delta x}\left(\{u(t+m\Delta t, x+k\Delta x)\}_{m,k}\right) = \mathcal{O}\Big((\Delta x)^p + (\Delta t)^q\Big)$$

lorsque Δt et Δx tendent vers zéro.

Remarque. **Attention** à une possible ambiguïté dans la définition du schéma !

Pour une fonction $u(t,x)$ **qui n'est pas solution**, il faut que

$$\lim_{\Delta t, \Delta x \to 0} F_{\Delta t, \Delta x} \left(\{ u(t + m\Delta t, x + k\Delta x) \}_{m,k} \right) \neq 0.$$

Sinon, on pourrait multiplier n'importe quel schéma par $(\Delta x)^p$ et $(\Delta t)^q$ (avec p, q grands) pour qu'il soit consistant.

Exemple

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \nu \frac{-u_{j-1}^n + 2u_j^n - u_{j+1}^n}{(\Delta x)^2} = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad u_j^{n+1} = c\, u_{j-1}^n + (1 - 2c)\, u_j^n + c\, u_{j+1}^n \qquad c = \frac{\nu \Delta t}{(\Delta x)^2}$$

Exemple

Lemme. Le schéma de Crank-Nicolson (θ-schéma avec $\theta = 1/2$) est consistant et précis à l'ordre 2 en t et x.

Preuve.

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \nu \frac{-u_{j-1}^{n+1} + 2u_j^{n+1} - u_{j+1}^{n+1}}{2(\Delta x)^2} + \nu \frac{-u_{j-1}^n + 2u_j^n - u_{j+1}^n}{2(\Delta x)^2} = 0$$

On choisit astucieusement le point $(t^{n+1/2}, x_j)$ autour duquel on fait un DL de Taylor

Erreur de troncature : $E_{\Delta t, \Delta x} = \frac{u(t^{n+1}, x_j) - u(t^n, x_j)}{\Delta t} + \frac{\nu}{2(\Delta x)^2}\left[-u(t^{n+1}, x_{j-1}) + 2u(t^{n+1}, x_j) - u(t^{n+1}, x_{j+1})\right]$
$+ \frac{\nu}{2(\Delta x)^2}\left[\underline{\qquad\qquad} (t^n)\right]$

$u(t^{n+1}, x_j) = u(t^{n+\frac{1}{2}}, x_j) + \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial u}{\partial t}(t^{n+\frac{1}{2}}, x_j) + \frac{1}{2}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(-) + O(\Delta t)^3$

$u(t^n, x_j) = \underline{\qquad\qquad} - \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + O(\Delta t)^3$

$\Rightarrow \frac{u(t^{n+1}, x_j) - u(t^n, x_j)}{\Delta t} = \frac{\partial u}{\partial t}(t^{n+\frac{1}{2}}, x_j) + O(\Delta t)^2 \Rightarrow E_{\Delta t, \Delta x} = \frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(\Delta t)^2 + O(\Delta x)^2$

Stabilité

On utilise deux normes

$$\|u^n\|_2 = \left(\sum_{j=1}^{N} \Delta x |u_j^n|^2 \right)^{1/2} \qquad \text{et} \qquad \|u^n\|_\infty = \max_{1 \le j \le N} |u_j^n|$$

Définition. Un schéma aux différences finies est dit **stable** pour la norme $\| \; \|$, s'il existe une constante $K > 0$ indépendante de Δt et Δx telle que

$$\|u^n\| \le K \|u^0\| \text{ pour tout } n \ge 0,$$

quelle que soit la donnée initiale u^0.

Si cette inégalité n'a lieu que pour des pas Δt et Δx astreints à certaines inégalités, on dit que le schéma est **conditionnellement stable**.

Remarque. Il suffit d'une seule donnée initiale u^0 pour prouver l'instabilité.

Remarque. La stabilité pour une norme n'implique pas celle pour une autre !

Stabilité en norme L^∞, $\|u^n\|_\infty$

La méthode classique pour obtenir la stabilité L^∞ est le principe du maximum discret.

Définition. Un schéma aux différences finies vérifie le **principe du maximum discret** si pour tout $n \geq 0$ et tout $1 \leq j \leq N$ on a

$$\min\left(0, \min_{0\leq j\leq N+1} u_j^0\right) \leq u_j^n \leq \max\left(0, \max_{0\leq j\leq N+1} u_j^0\right)$$

quelle que soit la donnée initiale u^0.

Remarque. Il y a un 0 dans les min et max à cause des conditions aux limites de Dirichlet.

Lemme 1. Le schéma explicite est stable en norme L^∞ si et seulement si la condition CFL $2\nu\Delta t \leq (\Delta x)^2$ est satisfaite.

Voir le premier amphi pour la preuve.

Lemme 2. Le schéma implicite est stable en norme L^∞ quel que soit les pas de temps Δt et d'espace Δx.

Preuve. $\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \nu \frac{-u_{j-1}^{n+1} + 2u_j^{n+1} - u_{j+1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} = 0$ Soit $c = \frac{\nu \Delta t}{(\Delta x)^2}$

$(1+2c)u_j^{n+1} = u_j^n + c\left(u_{j-1}^{n+1} + u_{j+1}^{n+1}\right)$

Soit $M = \max_j u_j^n$ et $M' = \max_j u_j^{n+1}$.

Soit j_0 l'indice tel que $u_{j_0}^{n+1} = M' \Rightarrow u_{j_0-1}^{n+1}$ et $u_{j_0+1}^{n+1} \leq u_{j_0}^{n+1}$

$(1+2c)\,u_{j_0}^{n+1} \leq u_{j_0}^n + 2c\,u_{j_0}^{n+1} \Rightarrow u_{j_0}^{n+1} = M' \leq u_{j_0}^n \leq M$

$\Rightarrow \boxed{M' \leq M}$

$\Rightarrow \max_j u_j^n \leq \max(0, \max_j u_j^0)$

Même chose pour le min.

Stabilité en norme L^2, $\|u^n\|_2$

La méthode classique pour obtenir la stabilité L^2 est l'analyse de Fourier.

Pour l'appliquer, on considère toujours des conditions aux limites de périodicité.

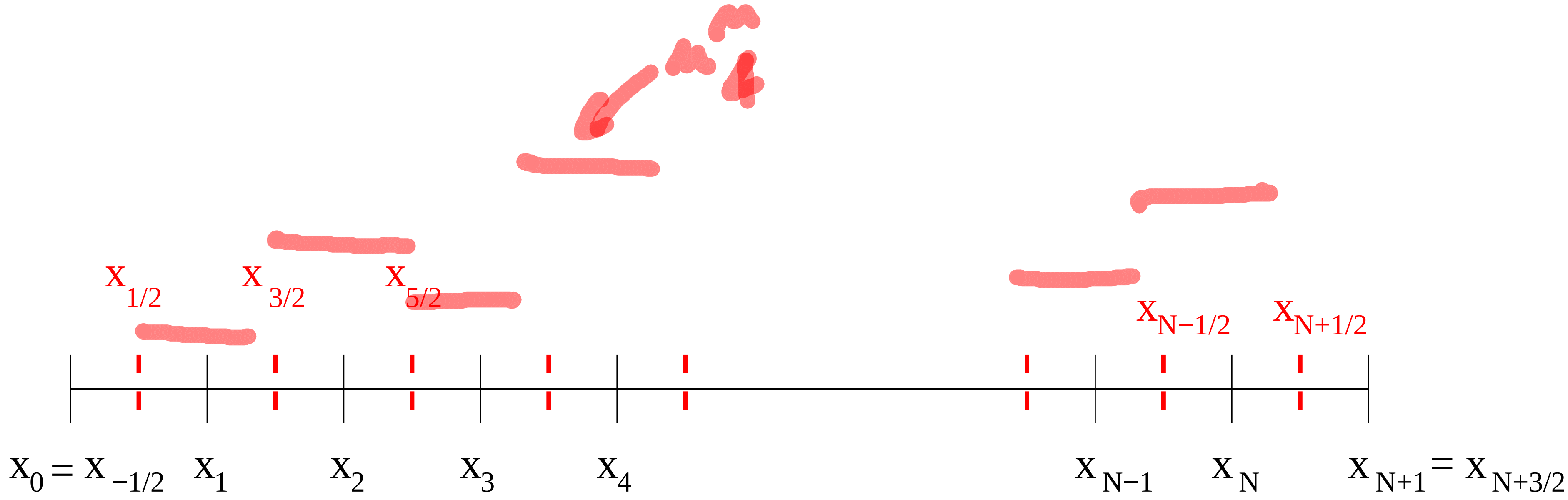
$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - \nu \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 & \text{dans } [0,1] \times \mathbb{R}_*^+ \\ u(t, x+1) = u(t,x) & \text{sur } \mathbb{R} \times \mathbb{R}_*^+ \\ u(t=0, x) = u_0(x) & \text{dans } (0,1) \end{cases}$$

Numériquement, la condition aux limites de périodicité est:

$$u_j^n = u_{N+1+j}^n$$

avec $\Delta x = 1/(N+1)$ et $x_j = j\Delta x$.

Transformée de Fourier du schéma



Pour $(u_j^n)_{0\leq j\leq N+1}$, avec $u_0^n = u_{N+1}^n$ on associe une fonction $u^n(x)$, périodique de période 1, définie sur $[0,1]$ par

$\int_0^1 |u^n(x)|^2 dx = \|u^n\|_2^2$

$$u^n(x) = u_j^n \quad \text{si} \quad x_{j-1/2} < x < x_{j+1/2}$$

avec $x_{j+1/2} = (j+1/2)\Delta x$ pour $0 \leq j \leq N$, $x_{-1/2} = 0$ et $x_{N+1+1/2} = 1$.

Transformée de Fourier du schéma (suite)

On peut décomposer une fonction périodique $u^n(x)$ en une série de Fourier

$$u^n(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \hat{u}^n(k) \exp(2i\pi kx),$$

$\in \mathbb{C}$ même si $u^n(x) \in \mathbb{R}$

avec $\hat{u}^n(k) = \int_0^1 u^n(x) \exp(-2i\pi kx)\, dx$ et la formule de Plancherel

$$\int_0^1 |u^n(x)|^2\, dx = \sum_{k \in \mathbb{Z}} |\hat{u}^n(k)|^2.$$

Lemme. Soit $v^n(x) = u^n(x + \Delta x)$. Alors $\hat{v}^n(k) = \hat{u}^n(k)\exp(2i\pi k\Delta x)$.

Preuve. $\hat{v}^n(k) = \int_0^1 v^n(x)\, e^{-2i\pi k x}\, dx = \int_0^1 u^n(x+\Delta x)\, e^{-2i\pi k x}\, dx$

Soit $y = x + \Delta x$ $\rightarrow$ $\hat{v}_n(k) = \int_0 u^n(y)\, e^{-2i\pi k(y - \Delta x)}\, dy$

$= \hat{u}^n(k)\, e^{+2i\pi k\Delta x}$

$c = \frac{\nu \Delta t}{(\Delta x)^2}$ $\hat{u}^{n+1}(k) - \hat{u}^n(k) + c\left[-\hat{u}_n(k)\, e^{-2i\pi k \Delta x} + 2\hat{u}_n(k) - \hat{u}_n(k)\, e^{+2i\pi k \Delta x}\right] = 0$

Exemple d'application

Soit le schéma explicite

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \nu \frac{-u_{j-1}^n + 2u_j^n - u_{j+1}^n}{(\Delta x)^2} = 0$$

On peut le réécrire pour $0 \leq x \leq 1$

$$\frac{u^{n+1}(x) - u^n(x)}{\Delta t} + \nu \frac{-u^n(x - \Delta x) + 2u^n(x) - u^n(x + \Delta x)}{(\Delta x)^2} = 0.$$

Par application de la transformée de Fourier, il vient

$$\hat{u}^{n+1}(k) = \underbrace{\left(1 - \frac{\nu \Delta t}{(\Delta x)^2}\left(-\exp(-2i\pi k \Delta x) + 2 - \exp(2i\pi k \Delta x)\right)\right)}_{= A(k)} \hat{u}^n(k).$$

$\Rightarrow \quad \hat{u}^n(k) = A(k)^n\, \hat{u}_0(k)$

Calcul

Lemme. Le schéma explicite est stable en norme L^2 si et seulement si la condition CFL $2\nu\Delta t \leq (\Delta x)^2$ est satisfaite.

Preuve. $A(k) = 1 - c\left(-e^{2i\pi k\Delta x} + 2 - e^{-2i\pi k\Delta x}\right)$

$$= 1 - c(2 - 2\cos 2\pi k\Delta x) = 1 - 4c\sin^2\pi k\Delta x \leq 1$$

Quelle condition pour que $A(k) \geq -1 \quad \forall k \in \mathbb{Z} \quad \forall \Delta x > 0$

$4c\sin^2\pi k\Delta x \leq 2 \Rightarrow \underbrace{2c\sin^2\pi k\Delta x}_{} \leq 1$ vrai si $\underline{\underline{2c \leq 1}}$

Si $2c \leq 1$ (CFL !) $\Rightarrow |A(k)| \leq 1 \Rightarrow |\hat{u}^n(k)| \leq |\hat{u}^0(k)|$

$\|u^n\|_2^2 = \int_0^1 u_n(x)^2 dx = \sum_{k\in\mathbb{Z}} |\hat{u}_n(k)|^2 \leq \sum_{k\in\mathbb{Z}} |\hat{u}_0(k)|^2 = \|u^0\|_2^2$

stable pour $K = 1$

Si $2c > 1$, alors $\exists \Delta x > 0$ petit et k_0 "grand" tel que $k_0\Delta x \approx \frac{1}{2}$ $\quad \sin^2\pi k_0\Delta x \approx 1 \Rightarrow 2c\sin^2\pi k_0\Delta x > 1$

Soit la donnée initiale $u_0(x)$ telle que $\hat{u}_0(k) = 0 \quad \forall k \neq k_0$, $\hat{u}_0(k_0) = 1$ $\Rightarrow |\hat{u}^n(k_0)| \xrightarrow[n\to+\infty]{} +\infty$

Condition de stabilité de Von Neumann

Il s'agit d'une "recette" de calcul pour étudier la stabilité L^2 d'un schéma.

On injecte dans le schéma un mode de Fourier

$$u_j^n = A(k)^n \exp(2i\pi k x_j) \quad \text{avec} \quad x_j = j\Delta x,$$

et on en déduit la valeur du facteur d'amplification $A(k)$ pour que cela soit une solution du schéma. Si

$$|A(k)| \leq 1 \text{ pour tout mode } k \in \mathbb{Z},$$

on dit que le schéma vérifie la condition de stabilité de Von Neumann.

Si la condition n'est pas vérifiée, le schéma est instable.

(C'est une condition **nécessaire** de stabilité, pas forcément **suffisante**.)

Exemple: schéma implicite

$C = \frac{\nu \Delta t}{(\Delta x)^2}$

$x_{j\pm1} = x_j \pm \Delta x$

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \nu \frac{-u_{j-1}^{n+1} + 2u_j^{n+1} - u_{j+1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} = 0$$

On cherche une solution particulière $u_j^n = A(k)^n \, e^{2i\pi k x_j}$

$$A(k)^{n+1} e^{2i\pi k x_j} - A(k)^n e^{2i\pi k x_j} + c\left[A(k)^{n+1} \left(-e^{2i\pi k x_{j-1}} + 2e^{2i\pi k x_j} - e^{2i\pi k x_{j+1}} \right) \right] = 0$$

$$A(k) - 1 + c\,A(k)\left[-e^{-2i\pi k \Delta x} + 2 - e^{+2i\pi k \Delta x} \right] = 0$$

$$A(k)\left[1 + 4c \sin^2 \pi k \Delta x \right] = 1$$

$$0 \leq A(k) = \frac{1}{1 + 4c\sin^2 \pi k \Delta x} \leq 1$$

Vocabulaire

Définitions. Un schéma à deux niveaux est un schéma dont la formule ne fait intervenir que les pas de temps n et $n+1$.

Un schéma linéaire est un schéma dont la formule est linéaire en ses arguments u_j^n.

Notations. $u^n = (u^n_j)_{1 \le j \le N}$

linéaire à 2 niveaux $\Longrightarrow$ $\exists$ matrice A d'itération $u^{n+1} = A u^n$

<u>Lemme</u> schéma stable $\Longleftrightarrow$ $\exists$ $K>0$ indépendant de n tel que $\|A^n\| \le K$

$<+\infty$

Norme matricielle subordonnée : $\|A\| = \sup\limits_{\substack{x \in \mathbb{R}^N \\ x \neq 0}} \dfrac{\|Ax\|}{\|x\|}$ ← norme vectorielle

norme matricielle

En effet : stable $\Longleftrightarrow$ $\|u^n\| \leq K \|u_0\| \quad \forall u_0 \in \mathbb{R}^N$

$$\begin{array}{c} \| \\ A^n u_0 \end{array} \quad \Longrightarrow \quad \frac{\|A^n u_0\|}{\|u_0\|} \leq K$$

$$\sup_{u_0 \in \mathbb{R}^N} \quad \Longleftarrow \quad \|A^n\| \leq K$$

Théorème de Lax (convergence des schémas)

Théorème.

Soit $u(t,x)$ la solution (régulière) de l'équation de la chaleur. Soit u_j^n la solution numérique discrète obtenue par un schéma de différences finies avec la donnée initiale $u_j^0 = u_0(x_j)$. On suppose que le schéma est linéaire, à deux niveaux, consistant, et stable pour une norme $\| \ \|$. Alors le schéma est convergent au sens où

$$\forall\, T > 0, \qquad \lim_{\Delta t, \Delta x \to 0} \left(\sup_{t_n \le T} \|e^n\| \right) = 0,$$

avec e^n le vecteur d'erreur défini par ses composantes $e_j^n = u_j^n - u(t_n, x_j)$.

De plus, si le schéma est précis à l'ordre p en espace et à l'ordre q en temps, alors pour tout temps $T > 0$ il existe une constante $C_T > 0$ telle que

$$\sup_{t_n \le T} \|e^n\| \le C_T \Big((\Delta x)^p + (\Delta t)^q \Big).$$

Démonstration

matrice d'itération

$$\boxed{\text{Consistance} + \text{stabilité} \Longrightarrow \text{Convergence}}$$

Remarque : le schéma linéaire à 2 niveaux $u^{n+1} = A u^n$ n'est pas sous forme "standard" pour la consistance. Il faut diviser par Δt :

$$\frac{u^{n+1}}{\Delta t} = \frac{A}{\Delta t} u^n$$

Soit $\tilde{u}_j^n = u(t^n, x_j)$. On a l'erreur $e_j^n = u_j^n - \tilde{u}_j^n$

Consistance $\quad E_{\Delta t, \Delta x} = \frac{\tilde{u}^{n+1}}{\Delta t} - \frac{A}{\Delta t} \tilde{u}^{n+1} = \varepsilon^n \xrightarrow[\Delta t, \Delta x \to 0]{} 0$ pour u solution

erreur de troncature

$$\frac{e^{n+1}}{\Delta t} - \frac{A}{\Delta t} e^n = -\varepsilon^n \quad \Longrightarrow \quad \boxed{e^{n+1} = A e^n - \Delta t\, \varepsilon^n}$$

$$\Longrightarrow e^n = A^n e^0 - \Delta t \sum_{k=1}^{n} A^{n-k} \varepsilon^k$$

$$e^n = A^n e_0 - \Delta t \sum_{k=1}^{n} A^{n-k} \varepsilon^k$$

$e_0 = 0 \quad \Longrightarrow \quad \| e^n \| \leq \Delta t \sum_{k=1}^{n} \underbrace{\| A^{n-k} \|}_{\leq C \text{ indép de } n \text{ et } k \text{ (stabilité)}} \| \varepsilon^k \|$

$$\Longrightarrow \quad \| e^n \| \leq \Delta t \sum_{k=1}^{n} C \| \varepsilon^k \|$$

$$\leq C \underbrace{n \Delta t}_{\leq T} \max_{1 \leq k \leq n} \| \varepsilon^k \| \longrightarrow 0$$

Si le schéma est précis $\Longrightarrow \max_{1 \leq k \leq n} \| \varepsilon^k \| \leq C \left((\Delta t)^q + (\Delta x)^p \right)$

$$\Longrightarrow \quad \| e^n \| \leq C T \left((\Delta t)^q + (\Delta x)^p \right) \qquad \forall n \text{ tq } t^n \leq T$$