APPROXIMATION NUMERIQUE ET OPTIMISATION

G. ALLAIRE

18 Septembre 2018

CHAPITRE III (début)

- ☞ Formulations variationnelles.
- ☞ Approximation variationnelle.
- ☞ Eléments finis.
- ☞ Résolution de systèmes linéaires.

modèle plus compliqué

$$\begin{cases} -\mathrm{div}\,(\kappa(x)\nabla u) + \alpha(x) u = f & \Omega \\ u = 0 & \partial\Omega \end{cases}$$

Problème aux limites

Comment peut-on résoudre:

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{dans } \Omega \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases}$$

En dimension 1, si $\Omega = (0, L)$, alors

$$u(x) = Cx - \int_0^x \int_0^y f(z)\, dz\, dy \quad \text{avec} \quad C = L^{-1} \int_0^L \int_0^y f(z)\, dz\, dy$$

Mais en dimension plus grande ? Pas de formule explicite...

Idée principale: formulation variationnelle.

Formulation variationnelle en 1-d

Problème aux limites de Dirichlet:

$$(EDP) \quad \begin{cases} -u'' = f & \text{dans } (0, L) \\ u(0) = u(L) = 0 & \text{sur le bord .} \end{cases}$$

Formulation variationnelle: trouver
$u \in V_0 = \left\{\phi \in C^1[0, L] \text{ tel que } \phi(0) = \phi(L) = 0\right\}$ qui vérifie

$$(FV) \quad \int_0^L u'(x)\, \phi'(x)\, dx = \int_0^L f(x)\, \phi(x)\, dx \quad \forall \phi \in V_0.$$

Proposition. Soit $u \in C^2[0, L]$. Alors u est solution de (EDP) si et seulement si $u \in V_0$ est solution de (FV).

Démonstration

(EDP) $\Longrightarrow$ (FV)

Soit $\varphi \in V_0$. On multiplie l'EDP par φ :

$$-\int_0^L u''\varphi\,dx = \int_0^L f\varphi\,dx$$

Par intégration par parties

$$= \int_0^L u'\varphi'\,dx - u'(L)\underset{0}{\underset{\shortparallel}{\varphi(L)}} + u'(0)\underset{0}{\underset{\shortparallel}{\varphi(0)}} \quad \text{car } \varphi \in V_0$$

FV

On en déduit que $\forall \varphi \in V_0$
$$\boxed{\int_0^L u'\varphi'\,dx = \int_0^L f\varphi\,dx}$$

(FV) $\Longrightarrow$ (EDP)

Même calcul à l'envers !

$$\int_0^L u'\varphi'\,dx = -\int_0^L u''\varphi\,dx + u'(L)\underset{0}{\underset{\shortparallel}{\varphi(L)}} - u'(0)\underset{0}{\underset{\shortparallel}{\varphi(0)}} \quad \text{car } \varphi \in V_0$$

$$\Longrightarrow \int_0^L (u''+f)\varphi\,dx = 0 \quad \forall \varphi \in V_0 \Longrightarrow \left.\begin{array}{l} -u'' = f \text{ sur } [0,L] \\ \text{On } u \in V_0 \Longrightarrow u(0) = u(L) = 0 \end{array}\right\} \text{(EDP)}$$

Lemme. Soit $g(x)$ une fonction continue sur $[0, L]$. Si elle vérifie

$$\int_0^L g(x)\,\phi(x)\,dx = 0 \qquad \text{pour tout } \phi \in V_0\,,$$

alors $g \equiv 0$ sur $[0, L]$.

Démonstration. Si $g \not\equiv 0$, alors $\exists\, x_0 \in [0,L]$ tq $g(x_0) \neq 0$. Par exemple $g(x_0) > 0$.
Par continuité, on peut choisir $x_0 \in]0,L[\Rightarrow \exists\, \varepsilon > 0$ tq $]x_0-\varepsilon, x_0+\varepsilon[\subset]0,L[$
Soit φ à support compact dans $]x_0-\varepsilon, x_0+\varepsilon[$, $\varphi \not\equiv 0$ et $\varphi \geq 0$

$$\int_0^L g(x)\varphi(x)\,dx > 0 \quad \text{contradiction} \Longrightarrow \quad g \equiv 0 \text{ sur } [0,L].$$

Remarque. Si on veut résoudre un problème avec des conditions aux limites de Dirichlet non homogènes

$$\begin{cases} -u'' = f & \text{dans } (0, L) \\ u(0) = \alpha,\ u(L) = \beta & \text{sur le bord} \end{cases}$$

alors on pose $u(x) = \tilde{u}(x) + (\alpha(L - x) + \beta x)/L$ et on cherche $\tilde{u}$ solution de

$$\begin{cases} -\tilde{u}'' = f & \text{dans } (0, L) \\ \tilde{u}(0) = \tilde{u}(L) = 0 & \text{sur le bord} \end{cases}$$

-1 $+1$ n 0 L

CL de Neumann $\frac{\partial u}{\partial n} = g$ on $\partial\Omega$

$\nabla u \cdot n$

Condition aux limites de Neumann et Fourier

Condition aux limites de Fourier: étant donné un paramètre $\kappa \geq 0$

$$(EDP) \quad \begin{cases} -u'' = f & \text{dans } (0, L) \\ -u'(0) + \kappa u(0) = \alpha, \;\; u'(L) + \kappa u(L) = \beta & \text{sur le bord .} \end{cases}$$

Les conditions aux limites de Neumman correspondent à $\kappa = 0$.

Formulation variationnelle: trouver $u \in V = C^1[0, L]$ qui vérifie

$$(FV) \quad \int_0^L u'(x)\,\phi'(x)\,dx + \kappa\big(u(L)\phi(L) + u(0)\phi(0)\big) = \int_0^L f(x)\,\phi(x)\,dx + \beta\phi(L) + \alpha\phi(0) \quad \forall \phi \in V.$$

Proposition. Soit $u \in C^2[0, L]$. Alors u est solution de (EDP) si et seulement si $u \in V$ est solution de (FV).

Remarques

- ☞ Dans une formulation variationnelle on a besoin de dériver une fois de moins (pratique !).
- ☞ La condition aux limites de Dirichlet apparait dans la définition de l'espace V_0. On parle de condition aux limites essentielle (ou explicite).
- ☞ La condition aux limites de Neumann ou de Fourier n'apparait pas dans la définition de l'espace V. On parle de condition aux limites naturelle (ou implicite).
- ☞ Dans le cas $\kappa = 0$ (condition aux limites de Neumann), il ne peut exister de solution que s'il y a équilibre des sources

$$\int_0^L f(x)\, dx + \beta + \alpha = 0$$

Démonstration

(EDP) $\Rightarrow$ (FV) Soit $\varphi \in C^1[0,L]$ on multiplie l'équation par φ

$$-\int_0^L u''\varphi\,dx = \int_0^L f\varphi\,dx$$

$$\| $$

$$\int_0^L u'\varphi'\,dx \underbrace{- u'(L)\varphi(L)}_{= +\kappa u(L)\varphi(L) - \beta\varphi(L)} \underbrace{+ u'(0)\varphi(0)}_{= +\kappa u(0)\varphi(0) - \alpha\varphi(0)}$$

On les CL $-u'(0)+\kappa u(0)=\alpha$ et $u'(L)+\kappa u(L)=\beta$

$$\Rightarrow \int_0^L u'\varphi'\,dx + \kappa\big(u(L)\varphi(L)+u(0)\varphi(0)\big) = \int_0^L f\varphi\,dx + \alpha\varphi(0) + \beta\varphi(L) \quad \forall \varphi \in C^1$$

(FV) $\Rightarrow$ (EDP)

$$-\int_0^L u''\varphi\,dx + \big(u'(L)+\kappa u(L)\big)\varphi(L) + \big(-u'(0)+\kappa u(0)\big)\varphi(0) = \int_0^L f\varphi\,dx + \alpha\varphi(0) + \beta\varphi(L)$$

Soit $\varphi \in C^1_c[0,L]$ (à support compact) en particulier $\varphi(0)=\varphi(L)=0$

$$\Rightarrow \int_0^L (u''+f)\varphi\,dx = 0 \Longrightarrow \text{(lemme précédent)} \quad u''+f=0 \text{ sur } [0,L]$$

$\forall \varphi \in C^1 \Rightarrow u'(L)+\kappa u(L)=\beta$ et $-u'(0)+\kappa u(0)=\alpha$

Formulation variationnelle abstraite

Dans tous les cas une formulation variationnelle (FV) se met sous la forme générale suivante: trouver $u \in V$ tel que

$$a(u, \phi) = L(\phi) \quad \forall \phi \in V$$

avec

- ☞ V un espace vectoriel réel,
- ☞ $L(\cdot)$ une forme linéaire sur V (c'est-à-dire une application linéaire de V dans $\mathbb{R}$).
- ☞ $a(\cdot, \cdot)$ une forme bilinéaire sur V (c'est-à-dire une application de $V \times V$ dans $\mathbb{R}$, linéaire par rapport à chacun de ses deux arguments).
- ☞ Dans ce cours on ne démontre pas l'existence d'une solution de la FV.

Dans le cas Dirichlet on a $V = V_0 = \big\{\phi \in C^1[0,L]$ tel que $\phi(0) = \phi(L) = 0\big\}$,

$$a(u,\phi) = \int_0^L u'(x)\phi'(x)\,dx \quad \text{et} \quad L(\phi) = \int_0^L f(x)\,\phi(x)\,dx,$$

tandis que pour Fourier/Neumann on a $V = C^1[0,L]$,

$$a(u,\phi) = \int_0^L u'(x)\,\phi'(x)\,dx + \kappa\big(u(L)\phi(L) + u(0)\phi(0)\big)$$

et

$$L(\phi) = \int_0^L f(x)\,\phi(x)\,dx + \beta\phi(L) + \alpha\phi(0)$$

Remarque (importante pour les éléments finis). Les formulations variationnelles sont toujours bien définies si on remplace $C^1[0,L]$ par $\{\phi \in C^0[0,L]$ dérivable par morceaux $\}$.

Approximation variationnelle

Soit une formulation variationnelle: trouver $u \in V$ tel que $a(u, \phi) = L(\phi)$ pour tout $\phi \in V$.

Soit V_h un sous-espace vectoriel de V, de dimension finie.

On appelle **approximation variationnelle interne** le problème: trouver $u_h \in V_h$ tel que

$$a(u_h, \phi_h) = L(\phi_h) \quad \forall \phi_h \in V_h$$

Lemme. On suppose que la forme bilinéaire est coercive

$$\exists \nu > 0 \text{ tel que } a(v, v) \geq \nu \|v\|^2 \quad \forall v \in V.$$

Alors il existe une unique solution de l'approximation variationnelle interne qui, de plus, s'obtient en résolvant un système linéaire.

Démonstration

Trouver $u_h \in V_h$ telque $a(u_h, \varphi_h) = L(\varphi_h) \quad \forall \varphi_h \in V_h$

$\dim V_h < +\infty \Rightarrow \exists$ une base $(\varphi_i)_{1 \le i \le n}$ de V_h

on décompose $u_h = \sum_{i=1}^{n} u_i \varphi_i$. On choisit $\varphi_h = \varphi_j$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{n} u_i \, a(\varphi_i, \varphi_j) = L(\varphi_j)$$

On introduit $b = (L(\varphi_j))_{1 \le j \le n} \in \mathbb{R}^n$

$U = (u_i)_{1 \le i \le n} \in \mathbb{R}^n$

matrice $K = (a(\varphi_j, \varphi_i))_{1 \le i,j \le n}$

$$\Rightarrow \boxed{KU = b} \Leftrightarrow (FV) \text{ sur } V_h$$

Remarque $a(v,v) = KV \cdot V \geq c\|v\|^2 \geq c\|V\|^2$ avec $v = \sum_{i=1}^{n} v_i \varphi_i$

$c > 0$ et équivalence des normes en dim finie

$$\Rightarrow \ker K = \{0\} \Leftrightarrow K \text{ inversible}$$

Analogie en dim finie

$x, b \in \mathbb{R}^n$, A une matrice $n \times n$

Résoudre $Ax = b$ est équivalent à $Ax \cdot y = b \cdot y \quad \forall y \in \mathbb{R}^n$

Comme une EDP

Comme une FV

Erreur d'approximation

Lemme de Céa. On suppose que la forme bilinéaire est coercive mais aussi continue au sens où

$$\exists M > 0 \ \text{ tel que } \ |a(v,w)| \leq M\|v\|\|w\| \quad \forall v,w \in V.$$

Soit u la solution de la formulation variationnelle et soit u_h la solution de l'approximation variationnelle interne. On a

$$\|u - u_h\| \leq \frac{M}{\nu} \inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\|.$$

Démonstration

Eléments finis en 1-d

En 1-d, un maillage du segment $(0, 1)$ est une collection de points (appelés sommets ou noeuds) $(x_j)_{0 \leq j \leq n+1}$ tels que

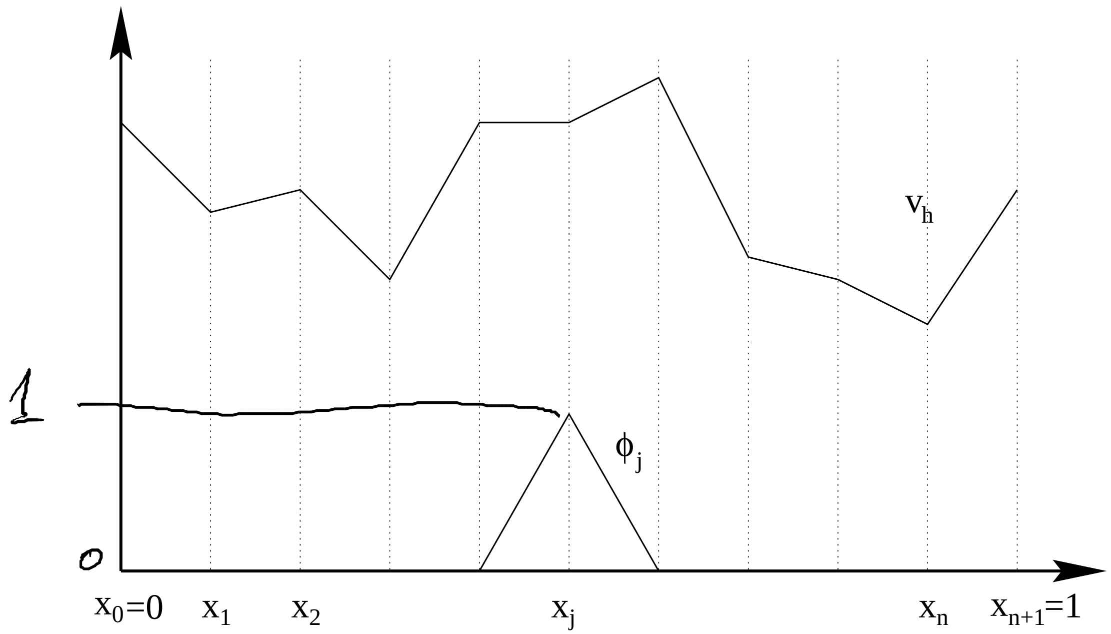
$$x_0 = 0 < x_1 < ... < x_n < x_{n+1} = 1.$$

Le maillage est dit uniforme si les points x_j sont équidistants, c'est-à-dire que

$$x_j = jh \quad \text{avec} \quad h = \frac{1}{n+1}, \; 0 \leq j \leq n+1.$$

On note $\mathbb{P}_k$ l'ensemble des polynômes réels de degré inférieur ou égal à k.

Eléments finis de Lagrange $\mathbb{P}_1$



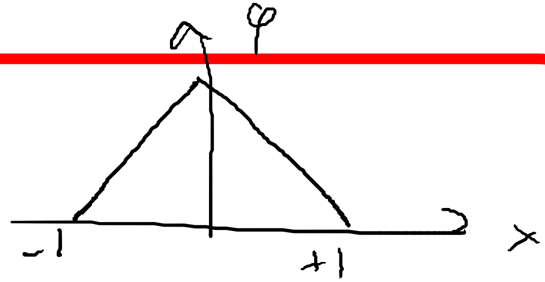
La méthode des éléments finis $\mathbb{P}_1$ est la méthode d'approximation variationnelle interne avec

$$V_h = \left\{ v \in C[0,1] \text{ tel que } v\Big|_{[x_j, x_{j+1}]} \in \mathbb{P}_1 \text{ pour tout } 0 \leq j \leq n \right\},$$

et son sous-espace

$$V_{0h} = \{ v \in V_h \text{ tel que } v(0) = v(1) = 0 \}.$$

Base de V_h



Soit la "fonction chapeau" $\quad \phi(x) = \begin{cases} 1 - |x| & \text{si } |x| \leq 1, \\ 0 & \text{si } |x| > 1. \end{cases}$

Pour un maillage uniforme, on définit les fonctions de base

$$\phi_j(x) = \phi\left(\frac{x - x_j}{h}\right) \quad 0 \leq j \leq n + 1.$$

Lemme. L'espace V_h est un espace vectoriel de dimension $n + 2$, et toute fonction $v_h \in V_h$ est définie de manière unique par ses valeurs aux sommets

$$\boxed{v_h(x) = \sum_{j=0}^{n+1} v_h(x_j)\phi_j(x)} \quad \forall x \in [0, 1].$$

Lagrange

De même, V_{0h} est un espace vectoriel de dimension n, et toute fonction $v_h \in V_{0h}$ vérifie $v_h(x) = \sum_{j=1}^{n} v_h(x_j)\phi_j(x) \quad \forall x \in [0, 1]$.

Démonstration

$$\begin{cases} -u'' = f \text{ dans } (0,1) \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases}$$

Résolution pratique

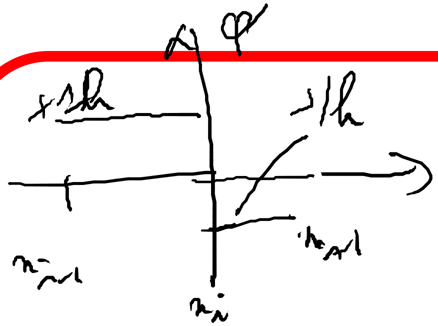
Trouver $u_h \in V_{0h} = \{ \varphi \in C[0,1] \quad \varphi|_{[x_j, x_{j+1}]} \in \mathbb{P}_1 \text{ et } \varphi(0) = \varphi(1) = 0 \}$ tel que

$$a(u_h, \varphi) = L(\varphi) \quad \forall \varphi \in V_{0h}$$

$$L(\varphi) = \int_0^1 f\varphi\, dx \quad \text{et} \quad a(u,v) = \int_0^1 u'v'\, dx \overset{\text{sym.}}{=} a(v,u)$$

$$(FV_h) \iff KU = b \qquad K = \left(a(\varphi_j, \varphi_i) \right)_{1 \le i,j \le n} \qquad b_i = \int_0^1 f\varphi_i\, dx$$

$$a(\varphi_i \varphi_j) = \begin{cases} 0 \text{ si } |i-j| > 1 \\ x(?) \text{ si } |i-j| \le 1 \end{cases}$$



$$a(\varphi_i,\varphi_i) = \int_{x_i-h}^{x_i+h} |\varphi_i'|^2\,dx = \frac{2h}{h^2} = \frac{2}{h}$$

Matrice de rigidité

$$a(\varphi_i,\varphi_{i+1}) = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{-1}{h}\times\frac{1}{h}\,dx = \frac{-1}{h}$$

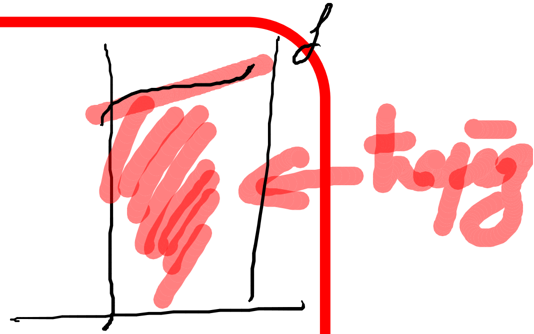
On définit la matrice de rigidité

$$\mathcal{K}_h = \left(\int_0^1 \phi_j'(x)\phi_i'(x)\,dx\right)_{1\le i,j\le n},$$

Lemme. La matrice $\mathcal{K}_h$ est tridiagonale

$$\mathcal{K}_h = h^{-1}\left.\underbrace{\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & 0 \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ 0 & & & -1 & 2 \end{pmatrix}}_{n}\right\} n \, .$$

Démonstration



Aspects pratiques

Formules de quadrature, résolution de système linéaire...

= calcul d'intégrale approchée (par exemple pour calculer $\int_0^1 f \varphi_i \, dx$)

1°) formule des trapèzes $\int_{x_j}^{x_{j+1}} \varphi(x)\,dx \simeq \frac{h}{2}\left(\varphi(x_j)+\varphi(x_{j+1})\right)$ ⟵ avantage

2°) formule de Stirling ...

3°) formule du point milieu $\int_{x_j}^{x_{j+1}} \varphi(x)\,dx \simeq h\,\varphi\left(\frac{x_j+x_{j+1}}{2}\right)$

Résolution des systèmes linéaires

$$Ax = b$$

- ☞ Problème crucial en temps CPU et place mémoire dans le calcul scientifique.
- ☞ On ne calcule jamais la matrice inverse A^{-1} !
- ☞ Deux classes de méthodes: directes et itératives.
- ☞ On ne stocke pas toute la matrice A qui est souvent creuse (contient beaucoup d'éléments nuls).

Méthodes directes

Méthode d'élimination de Gauss: si on ne pivote pas, on obtient une factorisation $A = LU$ avec

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{2,1} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ l_{n,1} & \dots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} u_{1,1} & \dots & \dots & u_{1,n} \\ 0 & u_{2,2} & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & u_{n,n} \end{pmatrix}$$

Méthode de Cholesky: si la matrice A est symétrique définie positive, alors il existe une matrice triangulaire inférieure B telle que

$O(\frac{n^2}{2})$ $Ax = b$

$$A = BB^*$$

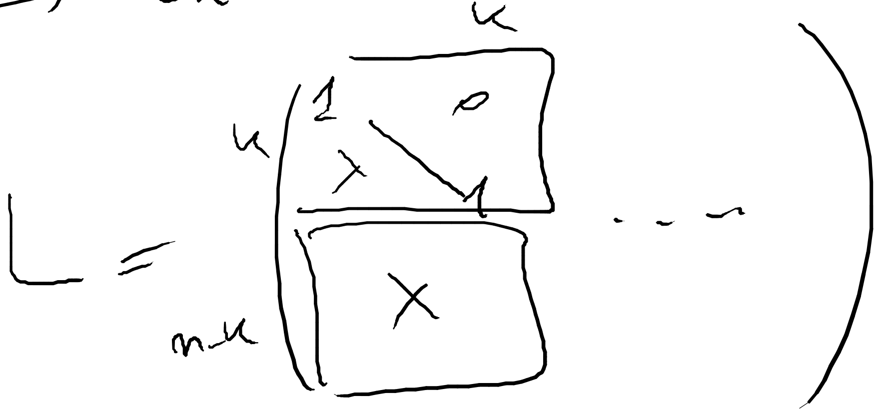
Résolution par remontée-descente: on résout successivement (et facilement !) $Ly = b$ (descente) puis $Ux = y$ (remontée). $O(\frac{n^2}{2})$

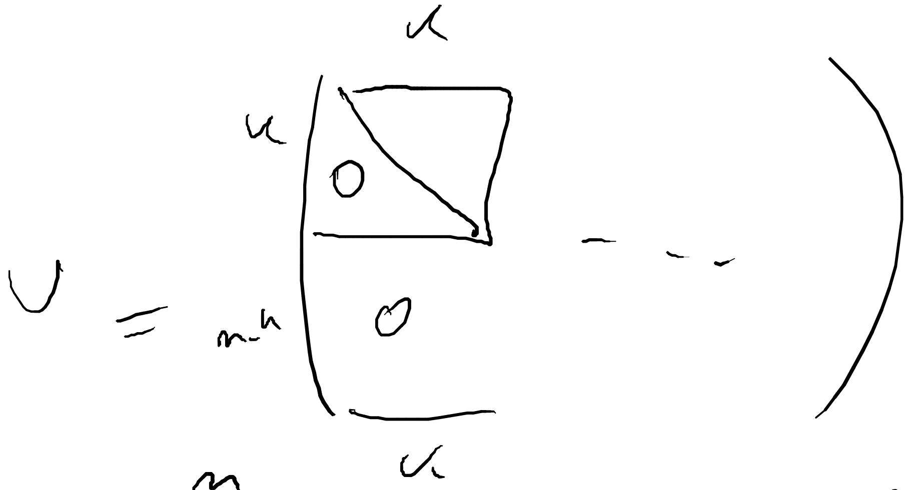
Compte d'opérations: Gauss $N_{op} \approx n^3/3$, Cholesky $N_{op} \approx n^3/6$.

Calcul de la factorisation LU, colonne par colonne

L_1 et U_1 = 1ère colonnes de L et U

→ L_k et U_k





kème colonne de L × U → $\displaystyle\sum_{i=1}^{k} i + \sum_{i=k+1}^{n} k \simeq \frac{k^2}{2} + k(n-k)$

$$\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{k^2}{2} + k(n-k)\right)$$

$$= O\left(\frac{n^3}{3}\right)$$

Méthodes itératives

Soit A une matrice inversible avec $A = M - N$ et M inversible. Pour résoudre $Ax = b$ on définit une méthode itérative basée sur la décomposition (M, N) par

$$\begin{cases} x_0 \text{ donné dans } \mathbb{R}^n, \\ M x_{k+1} = N x_k + b \quad \forall k \geq 1. \end{cases}$$

Exemples:

- ☞ Jacobi: $M = diag(A)$ et $N = diag(A) - A$
- ☞ Gauss-Seidel: si $A = D - E - F$ avec D diagonal, E triangulaire inférieur et F triangulaire supérieur, alors $M = D - E$ et $N = F$.
- ☞ Gradient conjugué: plus compliqué !

Méthodes itératives

Définition. Une méthode itérative est dite convergente si, pour tout vecteur initial $x_0 \in \mathbb{R}^n$, la suite x_k converge vers la solution exacte x.

Lemme. La méthode itérative converge si et seulement si le rayon spectral de la matrice d'itération $M^{-1}N$ vérifie $\rho(M^{-1}N) < 1$.

Préconditionnement

Idée cruciale !

Soit une matrice inversible C proche de A mais plus facile à inverser. Comme

$$Ax = b \; \Leftrightarrow \; C^{-1}Ax = C^{-1}b,$$

on applique une méthode itérative à $C^{-1}A$ en espérant que $\rho(M^{-1}N)$ sera plus petit pour $C^{-1}A$ que pour A.

Exemple: $C = diag(A)$ ou bien $C =$ approximation de LU.

Matrices bandes ou creuses

Une matrice A est dite bande, de demie largeur de bande p, si ses éléments vérifient $a_{i,j} = 0$ pour $|i - j| > p$.

Lemme. Les factorisations LU et de Cholesky conservent la structure bande des matrices.

$O(np^2)$

Une matrice A est stockée sous forme creuse si on ne garde en mémoire que ses éléments non nuls.

Gradient conjugué

Soit A une matrice symétrique définie positive, et $x_0 \in \mathbb{R}^n$. Soit (x_k, r_k, p_k) trois suites définies par les relations de récurrence

$$p_0 = r_0 = b - Ax_0, \text{ et pour } 0 \leq k \begin{cases} x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \\ r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k \\ p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k \end{cases}$$

avec

$$\alpha_k = \frac{\|r_k\|^2}{Ap_k \cdot p_k} \quad \text{et} \quad \beta_k = \frac{\|r_{k+1}\|^2}{\|r_k\|^2}.$$

Alors, la suite (x_k) de la méthode du gradient conjugué converge en moins de n itérations vers la solution du système linéaire $Ax = b$.