APPROXIMATION NUMERIQUE ET OPTIMISATION

G. ALLAIRE

2 Octobre 2018

CHAPITRE III (fin)

- ☞ Problèmes d'évolution, résolution pratique.
- ☞ Problèmes aux valeurs propres, résolution pratique.
- ☞ Algorithmes pour le calcul de valeurs et vecteurs propres.

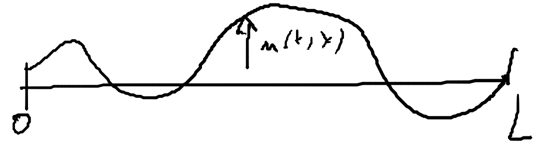
Equation de la chaleur

Soit un terme source $f(t,x)$ et une donnée initiale $u_0(x)$. On cherche la solution $u(t,x)$ de

$$\left\{\begin{array}{ll} \dfrac{\partial u}{\partial t} - \nu \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f & \text{pour } x \in (0,L) \text{ et } t > 0 \\ u(t,0) = u(t,L) = 0 & \text{pour } t > 0 \\ u(t=0,x) = u_0(x) & \text{dans } (0,L) \end{array}\right.$$

avec $L > 0$ et $\nu > 0$.

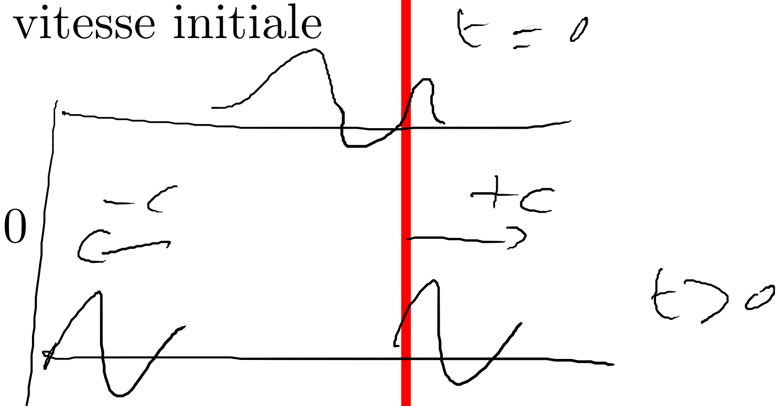
équation des cordes vibrantes



Equation des ondes

Soit un terme source $f(t,x)$, une position initiale $u_0(x)$ et une vitesse initiale $u_1(x)$. On cherche la solution $u(t,x)$ de

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f & \text{pour } x \in (0,L) \text{ et } t > 0 \\ u(t,0) = u(t,L) = 0 & \text{pour } t > 0 \\ u(t=0,x) = u_0(x) & \text{dans } (0,L) \\ \dfrac{\partial u}{\partial t}(t=0,x) = u_1(x) & \text{dans } (0,L) \end{cases}$$



avec $L > 0$ et $c > 0$ (la vitesse de propagation).

Cas particulier on remplace $(0,L)$ par $\mathbb{R}$ et $f=0$

équation $\Longrightarrow$ $\left(\frac{\partial}{\partial t} - c\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial}{\partial t} + c\frac{\partial}{\partial x}\right) u = 0$

toutes les solutions $u(t,x) = v_+(x-ct) + v_-(x+ct)$

Formulation variationnelle

Idée principale: on écrit une formulation variationnelle avec des fonctions tests qui ne dépendent pas du temps.

Conséquences:

- On utilisera des éléments finis en espace.
- On fera des différences finies en temps.

Formulation variationnelle en 1-d

Equation de la chaleur:

$$(C) \quad \begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - \nu \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f & \text{dans } (0,L) \times \mathbb{R}_*^+ \\ u(t,0) = u(t,L) = 0 & \text{pour } t > 0 \\ u(t=0,x) = u_0(x) & \text{dans } (0,L) \end{cases}$$

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

$$(FV) \quad \int_0^L \frac{\partial u}{\partial t}(t,x)\phi(x)\,dx + \nu \int_0^L u'(t,x)\,\phi'(x)\,dx = \int_0^L f(t,x)\,\phi(x)\,dx$$

avec $u'(t,x) = \frac{\partial u}{\partial x}(t,x)$ et la condition initiale $u(0,x) = u_0(x)$.

Proposition. On suppose que $f(t,x)$ et $u_0(x)$ sont continues. Soit $u(t,x) \in C^2(\mathbb{R}^+ \times [0,L])$. Alors u est solution de (C) si et seulement si u est solution de (FV).

Démonstration.

$(C) \Rightarrow (FV)$

$$\int_0^L \left(\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f \quad \times \varphi \right) dx$$ avec $\varphi(x) \in V_0$

$$\int_0^L \frac{\partial u}{\partial t} \varphi \, dx + \nu \int_0^L \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx = \int_0^L f \varphi \, dx$$ et $u(0,x) = u^0(x)$

$(FV) \Rightarrow (C)$ on fait l'intégration dans l'autre sens

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f$$

les conditions limites découlent $u(t,\cdot) \in V_0 \quad \forall t > 0$

Et en plus $u(0,x) = u^0(x)$

Formulation variationnelle en 1-d

Equation des ondes:

$$
(O) \quad \begin{cases}
\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f & \text{dans } (0, L) \times \mathbb{R}_*^+ \\
u(t, 0) = u(t, L) = 0 & \text{pour } t > 0 \\
u(t = 0, x) = u_0(x) & \text{dans } (0, L) \\
\dfrac{\partial u}{\partial t}(t = 0, x) = u_1(x) & \text{dans } (0, L)
\end{cases}
$$

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

$$
(FV) \quad \int_0^L \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(t, x)\phi(x)\, dx + c^2 \int_0^L u'(t, x)\, \phi'(x)\, dx = \int_0^L f(t, x)\, \phi(x)\, dx
$$

avec $u' = \frac{\partial u}{\partial x}$ et les conditions initiales $u(0, x) = u_0(x)$, $\frac{\partial u}{\partial t}(0, x) = u_1(x)$.

Proposition. On suppose que $f(t,x)$, $u_1(x)$ et $u_0(x)$ sont continues. Soit $u(t,x) \in C^2(\mathbb{R}^+ \times [0,L])$. Alors u est solution de (O) si et seulement si u est solution de (FV).

Démonstration.

Point de vue abstrait

On introduit les formes bilinéaires (désormais $\nu = c^2 = 1$)

$$a(u,\phi) = \int_0^L u'(x)\,\phi'(x)\,dx \quad \text{et} \quad \langle u,\phi\rangle_{L^2(\Omega)} = \int_0^L u(x)\,\phi(x)\,dx$$

Formulation variationnelle de la chaleur: trouver $u(t)$ fonction de $[0,T]$ à valeurs dans V_0 telle que

$\int_0^L \frac{\partial u}{\partial t} \varphi \, dx =$

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{d}{dt}\langle u(t),\phi\rangle_{L^2(\Omega)} + a\left(u(t),\phi\right) = \langle f(t),\phi\rangle_{L^2(\Omega)} \quad \forall\,\phi \in V_0, \quad 0 < t < T, \\ u(t=0) = u_0. \end{array} \right.$$

Formulation variationnelle des ondes: trouver $u(t)$ fonction de $[0,T]$ à valeurs dans V_0 telle que

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{d^2}{dt^2}\langle u(t),\phi\rangle_{L^2(\Omega)} + a\left(u(t),\phi\right) = \langle f(t),\phi\rangle_{L^2(\Omega)} \quad \forall\,\phi \in V_0,\ 0 < t < T, \\ u(t=0) = u_0, \quad \dfrac{du}{dt}(t=0) = u_1. \end{array} \right.$$

Approximation variationnelle

On remplace l'espace V_0 par un sous-espace V_0^h de dimension finie.

Approximation variationnelle interne de la chaleur: trouver $u_h(t) : [0,T] \to V_0^h$ tel que

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}\langle u_h(t), \phi_h\rangle_{L^2(\Omega)} + a\left(u_h(t), \phi_h\right) = \langle f(t), \phi_h\rangle_{L^2(\Omega)} \quad \forall\, \phi_h \in V_0^h, \quad 0 < t < T, \\ u_h(t=0) = u_h^0. \end{cases}$$

avec $u_h^0(x) \in V_0^h$ une approximation de $u_0(x)$.

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 d'équations différentielles ordinaires.

Démonstration

$\dim V^0_h < +\infty$

Soit une base $(\varphi_i)_{1\leq i\leq n}$

On cherche la solution $u_h(t,x) = \sum_{i=1}^{n} v_i(t)\,\varphi_i(x)$

$$\frac{d}{dt}\left(\int_0^L u_h \varphi_h\,dx\right) + \int_0^L \frac{\partial u_h}{\partial x}\frac{\partial \varphi_h}{\partial x}\,dx = \int_0^L f\varphi_h\,dx$$

$\varphi_h = \varphi_j(x) \implies \sum_{i=1}^{n} v_i'(t)\int_0^L \varphi_i\varphi_j\,dx + \sum_{i=1}^{n} v_i(t)\int_0^L \varphi_i'\varphi_j'\,dx = \int_0^L f\varphi_j\,dx$

matrice de rigidité $\quad K_h = \left(\int_0^L \varphi_i'\varphi_j'\,dx\right)_{1\leq i,j\leq n}$

matrice de masse $\quad M_h = \left(\int_0^L \varphi_i\varphi_j\,dx\right)_{1\leq i,j\leq n}$

vecteur $\quad b(t) = \left(\int_0^L f(t,x)\varphi_j(x)\right)_{1\leq j\leq n}$

$$\implies \begin{cases} M_h \dfrac{dv}{dt} + K_h\, v = b(t) \\ v(0) = v_0 \end{cases}$$

avec v_0 les coefficients d'une approximation de $u_0(x)$ dans V^0_h.

La matrice M_h est inversible car

$M_h\, v\cdot v = \int_0^L \left(\sum_{i=1}^{n} v_i\,\varphi_i(x)\right)^2 dx = \left\| \sum v_i\,\varphi_i(x)\right\|^2_{L^2(0,L)} \geq c\,\|v\|^2$

$\implies \ker M_h = 0$

Définitions

On appelle matrice de masse

$$\mathcal{M}_h = \left(\int_0^L \phi_i(x)\phi_j(x)\,dx \right)_{1 \le i,j \le N}$$

On appelle matrice de rigidité

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

avec $(\phi_i)_{1 \le i \le N}$ base de V_0^h.

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

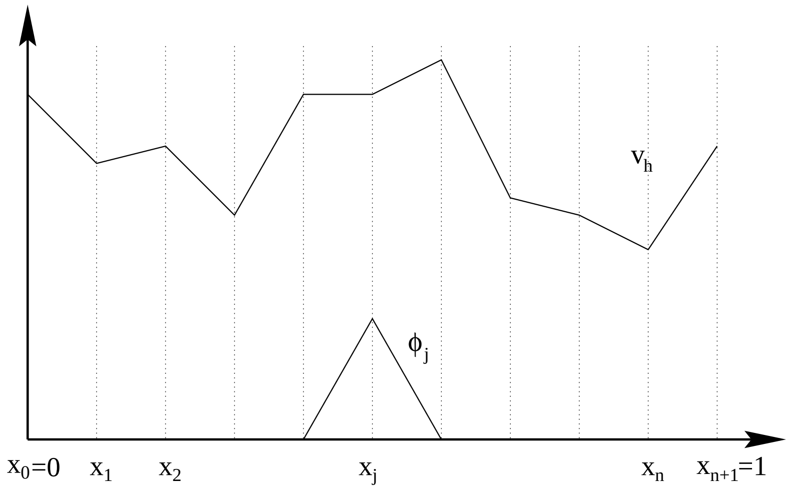
$h = \frac{1}{n+1}$

$x_j = jh$

$0 \le j \le n+1$

$\varphi_j(x) = \varphi\left(\frac{x - x_j}{h}\right)$

$\varphi(x) = \begin{cases} 1-|x| & \text{si } |x| \le 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$



Lemme. Dans ce cas la matrice de masse $\mathcal{M}_h$ est

$$\mathcal{M}_h = h \begin{pmatrix} 2/3 & 1/6 & & & 0 \\ 1/6 & 2/3 & 1/6 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1/6 & 2/3 & 1/6 \\ 0 & & & 1/6 & 2/3 \end{pmatrix}.$$

Condensation de masse

Si on utilise la formule de quadrature "des trapèzes", alors on trouve que

$$\mathcal{M}_h \overset{\sim}{=} h\,\mathrm{Id}$$

On appelle cette procédure la condensation de masse ou "mass-lumping".

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} \theta(x)\,dx \cong \frac{h}{2}\left(\theta(x_{j+1}) + \theta(x_j)\right)$$

$$\int_0^L \varphi_i \varphi_j \,dx \simeq h\,\delta_{ij}$$

Discrétisation totale en espace-temps

L'approximation variationnelle interne conduit à

$$\mathcal{M}_h \frac{dU}{dt}(t) + \mathcal{K}_h U(t) = b(t)$$

pour l'équation de la chaleur et à

$$\mathcal{M}_h \frac{d^2U}{dt^2}(t) + \mathcal{K}_h U(t) = b(t)$$

pour l'équation des ondes (+ conditions initiales).

On fait des différences finies pour les dérivées en temps.

Pas de temps $\Delta t > 0$ et temps discrets $t_n = n\Delta t$.

Equation de la chaleur

Schéma d'Euler explicite (stable sous condition CFL)

$$\mathcal{M}\frac{U^{n+1}-U^n}{\Delta t}+\mathcal{K}U^n=b^n$$

Schéma d'Euler implicite (stable sans condition)

$$\mathcal{M}\frac{U^{n+1}-U^n}{\Delta t}+\mathcal{K}U^{n+1}=b^{n+1}$$

En éléments finis, on préfère généralement les schémas implicites (quitte à résoudre un système linéaire pour $\mathcal{M}$ autant le faire pour $\mathcal{M}+\Delta t\mathcal{K}$).

Equation des ondes

Pour $0 \leq \theta \leq 1/2$ on propose le θ-schéma

$$\mathcal{M}\frac{U^{n+1}-2U^n+U^{n-1}}{(\Delta t)^2} \quad +\mathcal{K}\left(\theta U^{n+1}+(1-2\theta)U^n+\theta U^{n-1}\right)$$

$$= \theta b(t_{n+1}) + (1-2\theta)b(t_n) + \theta b(t_{n-1}).$$

Initialisation: $U^0 = U_0$ et $\frac{U^1-U^0}{\Delta t} = U_1$.

$\theta = 0$ schéma explicite, stable sous condition CFL

$\theta \geq \frac{1}{4}$ schéma implicite stable sans condition

Problème aux valeurs propres

On cherche les couples $(\lambda, u) \in \mathbb{R} \times C^2(0, L)$, avec $u \neq 0$, solutions de

$$\begin{cases} -u'' = \lambda u & \text{dans } (0, L) \\ u(0) = u(L) = 0 \end{cases}$$

$u \equiv u(x)$

Le réel λ est appelé valeur propre, et la fonction $u(x)$ mode propre ou fonction propre.

Motivation: on cherche les solutions d'équations d'évolution par séparation des variables $\mathbf{u}(t, x) = \phi(t)\, u(x)$.

Equation de la chaleur

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} = 0 \quad \text{et} \quad \mathbf{u}(t,x) = \phi(t)\, u(x)$$

$\Rightarrow \varphi' u - \nu \varphi u'' = 0 \iff \dfrac{\varphi'(t)}{\varphi(t)} = \nu \dfrac{u''(x)}{u(x)} = \text{cte} = -\nu\lambda \iff \boxed{u'' = -\lambda u}$

$\varphi' = -\nu\lambda\varphi \quad t \geq 0 \iff \boxed{\varphi(t) = \varphi(0)\, e^{-\nu\lambda t}}$

si $\lambda \geq 0$, solution décroissante exponentiellement

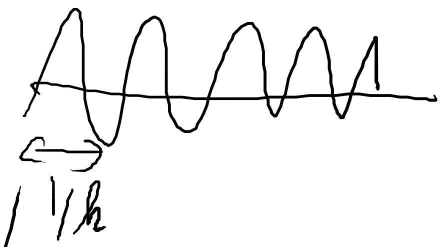
Equation des ondes

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x^2} = 0 \quad \text{et} \quad \mathbf{u}(t,x) = \phi(t)\, u(x)$$

$\Rightarrow \varphi'' u - c^2 \varphi u'' = 0 \iff \dfrac{\varphi''}{\varphi} = c^2 \dfrac{u''}{u} = \text{cte} = -c^2\lambda \iff \boxed{u'' = -\lambda u}$

$\iff \begin{cases} \varphi'' + \lambda c^2 \varphi = 0 \\ \varphi(0) \text{ et } \varphi'(0) \end{cases}$ si $\lambda \geq 0$ alors $\Rightarrow \varphi(t) = A\cos(c\sqrt{\lambda}t) + B\sin(c\sqrt{\lambda}t)$

Exercice



Les solutions non triviales de

$$\begin{cases} -u'' = \lambda u & \text{dans } (0, L) \\ u(0) = u(L) = 0 \end{cases}$$

sont, pour $k \in \mathbb{N}^*$, $\lambda_k = (\pi k/L)^2$ et $u_k(x) = \sin(\pi k x/L)$.

à un coeff multiplicatif près

Si $\lambda < 0$, $\lambda = -\omega^2$ $\quad u'' - \omega^2 u = 0 \iff u = A e^{\omega t} + B e^{-\omega t}$

$u(0) = 0 \Rightarrow A + B = 0$

$u(L) = 0 \Rightarrow A e^{\omega L} + B e^{-\omega L} = 0$ $\quad \Rightarrow A = B = 0$

Si $\lambda \geq 0$, $\lambda = \omega^2$ $\quad u'' + \omega^2 u = 0 \iff u = A \cos \omega t + B \sin \omega t$

$u(0) = 0 \Rightarrow A = 0$

$u(L) = 0 \Rightarrow \sin \omega L = 0 \iff \omega L = k\pi \quad k \in \mathbb{N}^*$

$\omega^2 = \lambda = \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2$

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

Soit $V_0 = \{\varphi \in C^1[0,L] \text{ tq } \varphi(0) = \varphi(L) = 0\}$

(FV) : trouver $u \in V_0$ et $\lambda \in \mathbb{R}$ tel que
$\int_0^L u'\varphi' \, dx = \lambda \int_0^L u \varphi \, dx \quad \forall \varphi \in V_0$

Soit $V_{0h} \subset V_0$ et $\dim V^0_h < +\infty$

trouver $u_h \in V^0_h$ et $\lambda_h \in \mathbb{R}$ tq

$\int_0^L u_h' \varphi_h' \, dx = \lambda_h \int_0^L u_h \varphi_h \, dx \quad \forall \varphi_h \in V^0_h$

Soit $(\varphi_i)_{1 \le i \le n}$ base de V^0_h

$u_h(x) = \sum_{i=1}^{n} u_i \varphi_i(x)$

Discrétisation

1. Formulation variationnelle
2. Approximation variationnelle interne
3. Eléments finis $\mathbb{P}_1$ de Lagrange

On obtient un problème matriciel aux valeurs propres: trouver $\lambda \in \mathbb{R}$, $U \in \mathbb{R}^N$, $U \neq 0$

$\cancel{N}$

$$\mathcal{K}_h U = \lambda_h \mathcal{M}_h U$$

Lemme. Les matrices $\mathcal{K}$ et $\mathcal{M}$ étant symétriques, définies positives, il existe N valeurs propres et vecteurs propres formant une base de $\mathbb{R}^N$.

On ne calcule que N valeurs propres correspondants aux plus basses fréquences propres.

On ne peut pas voir sur le maillage les oscillations de $\sin \frac{\pi k}{L} x$ pour k grand !

Algorithmes pour le calcul de valeurs et vecteurs propres

Méthode de la puissance pour calculer la plus grande valeur propre d'une matrice K.

Nous faisons l'hypothèse que K est symétrique réelle, de valeurs propres $(\lambda_1, \cdots, \lambda_n)$ et de vecteurs propres $(e_1, \cdots, e_n)$, et qu'il existe une valeur propre dominante simple

$$\lambda_n > |\lambda_i| \quad \text{pour tout } 1 \leq i \leq n-1.$$

Algorithme

1. Initialisation: $x_0 \in \mathbb{R}^n$ tel que $x_0 \cdot e_n \neq 0$ et $\|x_0\| = 1$.
2. Itérations: pour $k \geq 1$
   1. $y_k = K x_{k-1}$
   2. $x_k = y_k / \|y_k\|$
   3. test de convergence: si $\|x_k - x_{k-1}\| \leq \varepsilon$, on arrête.

Dans le test de convergence, ε est typiquement égal à 10^{-6}.

Si $\delta_k = x_k - x_{k-1}$ est petit, alors x_k est un vecteur propre approché de K de valeur propre approchée $\|y_k\|$ car

$$K x_k - \|y_k\| x_k \; = \; K \delta_k \; \approx \; 0 \, .$$

Proposition. Si la matrice K est symétrique réelle et admet une unique valeur propre dominante, alors la méthode de la puissance converge, c'est-à-dire que

$$\lim_{k\to+\infty} \|y_k\| = \lambda_n, \quad \lim_{k\to+\infty} x_k = \pm e_n.$$

De plus, la vitesse de convergence est proportionnelle au rapport $|\lambda_{n-1}|/\lambda_n$.

Preuve. Rappelons que K est diagonalisable dans la base orthonormée des vecteurs propres $(e_1, \cdots, e_n)$ correspondant aux valeurs propres $(\lambda_1, \cdots, \lambda_n)$. Soit $x_0 = \sum_{i=1}^n \beta_i e_i$ le vecteur initial avec $\beta_n \neq 0$. Une récurrence facile montre que

$$x_k = \frac{K^k x_0}{\|K^k x_0\|} = \frac{\sum_{i=1}^n \beta_i (\lambda_i)^k e_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^n \beta_i^2 (\lambda_i)^{2k}}} = \operatorname{sign}(\beta_n) \frac{e_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\beta_i}{\beta_n} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_n}\right)^k e_i}{\sqrt{1 + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\beta_i^2}{\beta_n^2} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_n}\right)^{2k}}}.$$

Comme $|\lambda_i| < \lambda_n$, x_k converge vers $\pm e_n$. Comme $y_k = K x_k$ converge vers $\pm \lambda_n e_n$, on en déduit que $\|y_k\|$ converge vers λ_n.

Algorithme de la puissance “inverse”

But: calculer la **plus petite** valeur propre d’une matrice A.

1. Initialisation: $x_0 \in \mathbb{R}^n$ tel que $x_0 \cdot e_1 \neq 0$.
2. Itérations: pour $k \geq 1$
   1. résoudre $Ay_k = x_{k-1}$
   2. $x_k = y_k / \|y_k\|$
   3. test de convergence: si $\|x_k - x_{k-1}\| \leq \varepsilon$, on arrête.

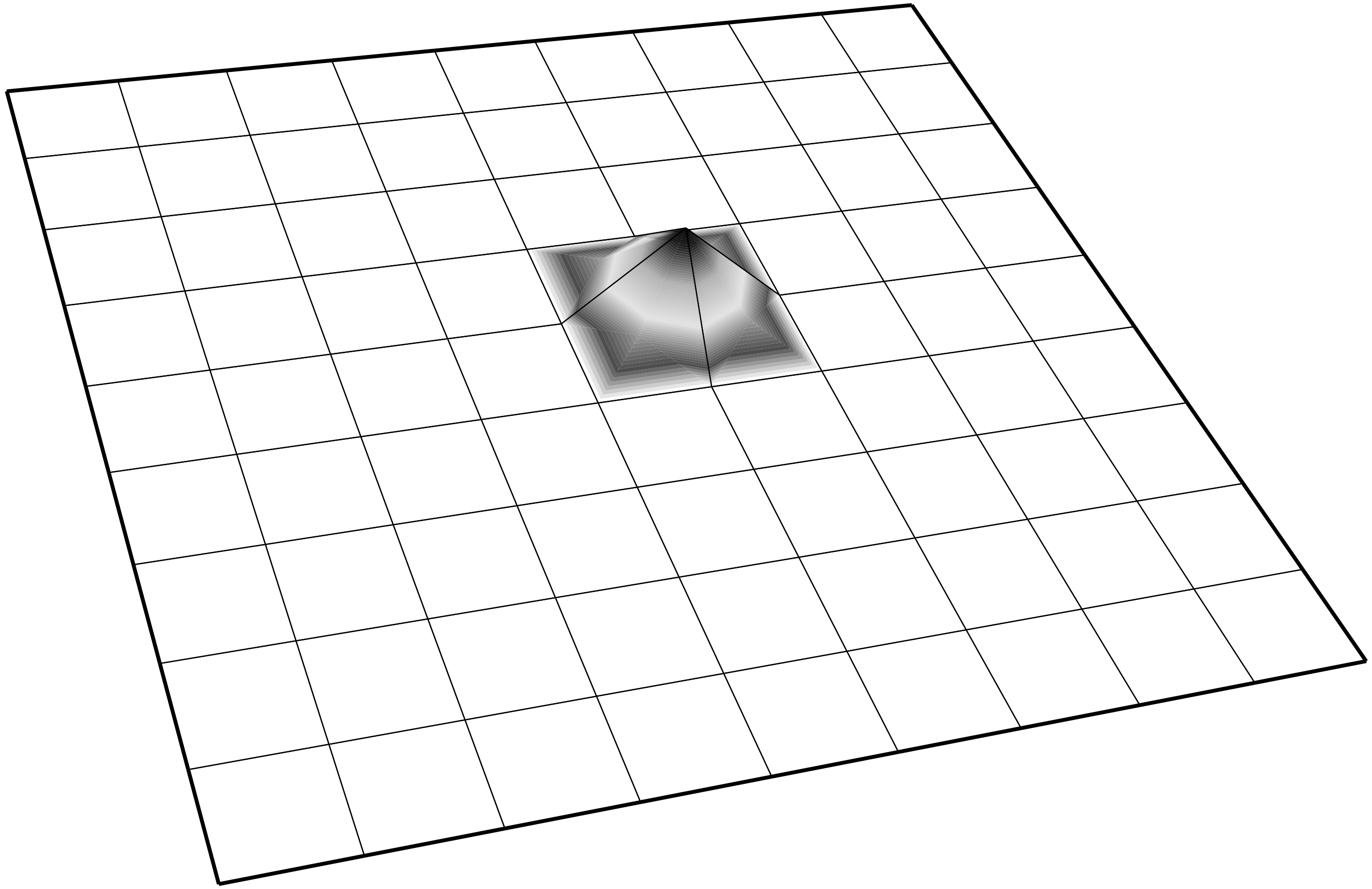
Si $\delta_k = x_k - x_{k-1}$ est petit, alors x_{k-1} est un vecteur propre approché de valeur propre approchée $1/\|y_k\|$ car

$$Ax_{k-1} - \frac{x_{k-1}}{\|y_k\|} \;=\; -A\delta_k\,.$$

Ouverture vers les dimensions supérieures

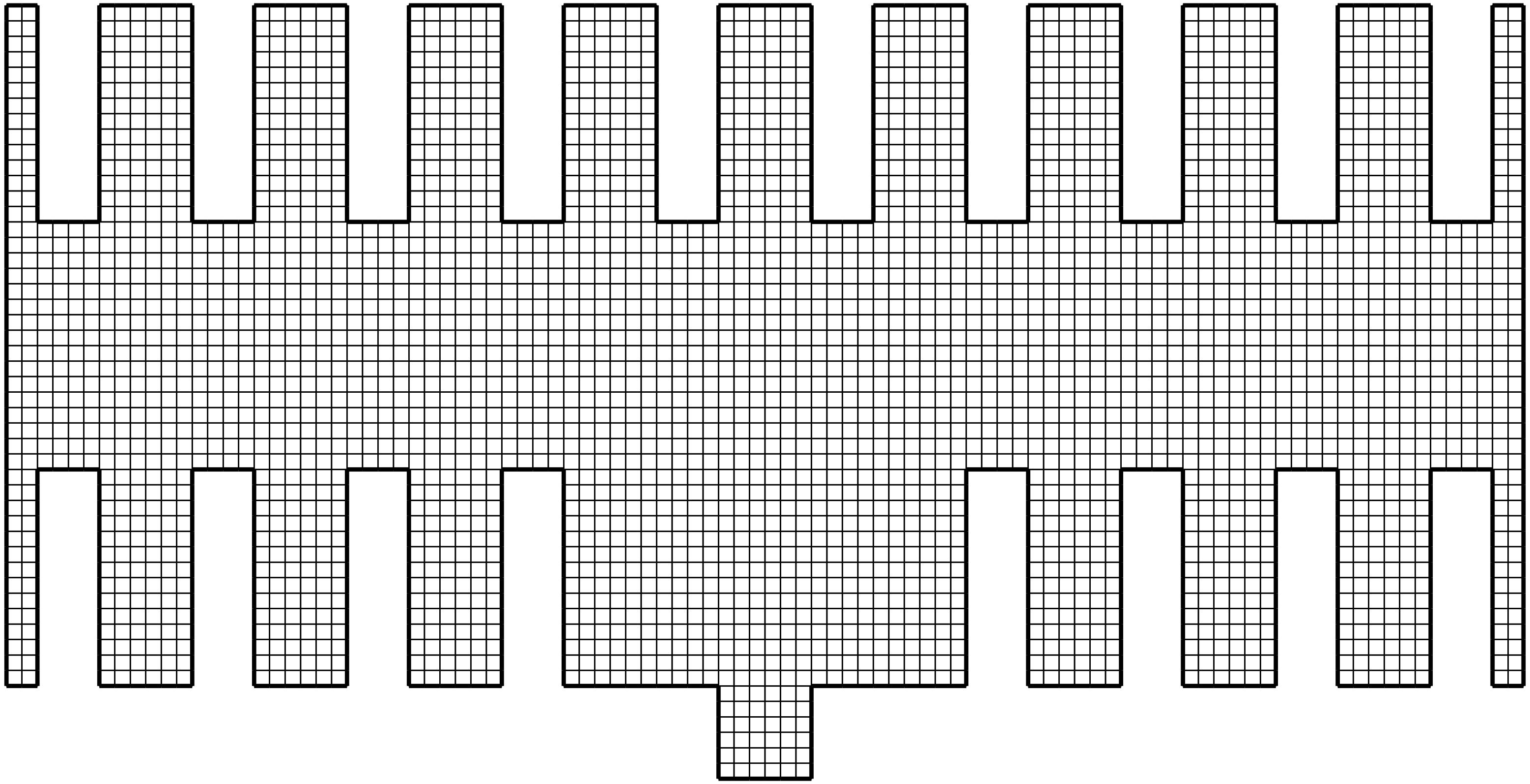
- ☞ Toujours l'idée fondamentale: formulation variationnelle.
- ☞ Plus de maths ! Espaces de Sobolev.
- ☞ Gros avantage: maillage de géométrie quelconque.
- ☞ Eléments finis de Lagrange: représentation d'une fonction par ses valeurs aux noeuds.

Elements finis rectangulaires $\mathbb{Q}_1$



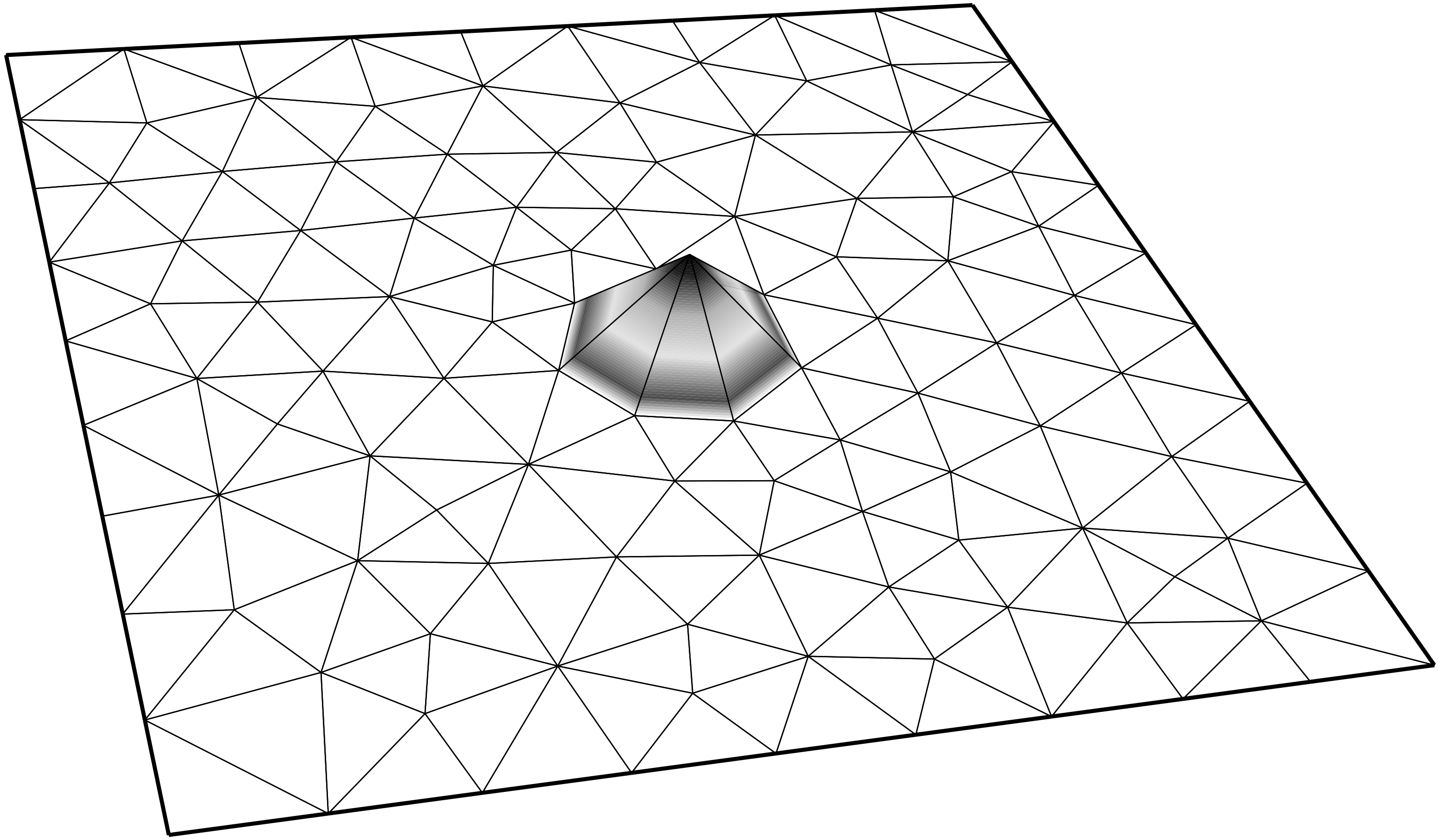
Fonctions de base obtenues par tensorisation $1-d \times 1-d$:

$p(x) = (a_1 + b_1 x_1)(a_2 + b_2 x_2) = \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \alpha_3 x_1 x_2.$



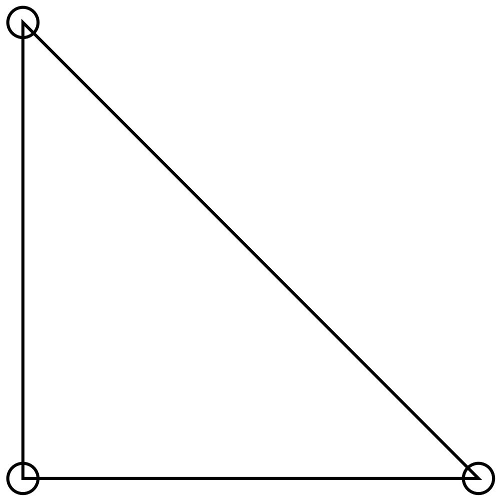
Forte restriction des domaines que l'on peut mailler par des rectangles.

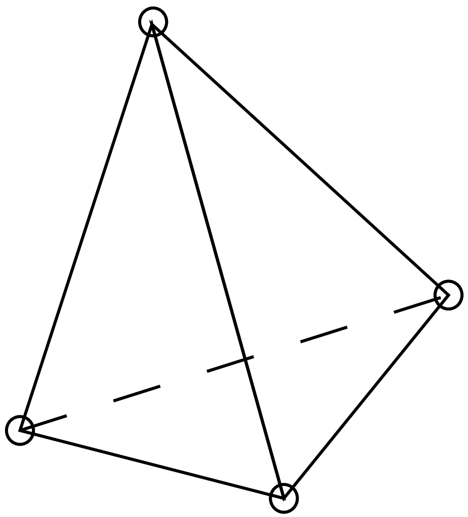
Elements finis triangulaires $\mathbb{P}_1$



Fonctions de base affines par maille: $p(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2$.

Mailles





Les mailles sont des simplexes (triangles en 2-D, tétraèdres en 3-D).