APPROXIMATION NUMERIQUE ET OPTIMISATION

G. ALLAIRE

5 Décembre 2017

CHAPITRE III (fin)

- ☞ Problèmes d'évolution, résolution pratique.
- ☞ Problèmes aux valeurs propres, résolution pratique.
- ☞ Algèbre linéaire pour la résolution de systèmes linéaires et pour le calcul de valeurs et vecteurs propres.

Equation de la chaleur

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

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

Sans les CL, la solution générale de l'éq. des ondes s'écrit sous la forme $u(t,x) = W^+(x-ct) + W^-(x+ct)$

Equation des ondes

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

avec $L > 0$ et $c > 0$.

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:

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

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 $\forall \phi \in V_0$

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

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. $(E) \Longrightarrow (FV)$

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f \quad \times \varphi(x)$$

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

$\varphi \in V_0$

$\varphi(0) = \varphi(L) = 0$

$(FV) \Longrightarrow (C)$ même calcul

Formulation variationnelle en 1-d

Equation des ondes:

$$
(O) \quad \left\{
\begin{array}{ll}
\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \cancel{0}\, f & \text{dans } (0, L) \times \mathbb{R}_*^+ \\[2ex]
u(t, 0) = u(t, L) = 0 & \text{pour } t > 0 \\[2ex]
u(t = 0, x) = u_0(x) & \text{dans } (0, L) \\[2ex]
\dfrac{\partial u}{\partial t}(t = 0, x) = u_1(x) & \text{dans } (0, L)
\end{array}
\right.
$$

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 $\forall \phi \in V_0$

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

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. exercice !

Point de vue abstrait

1 si chaleur
c^2 si ondes

On introduit les formes bilinéaires

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

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

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

$$\|$$

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

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

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

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

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

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

par exemple $u_h^0 = \Pi_h u^0$

opérateur d'interpolation

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

Lemme. On suppose que la forme bilinéaire est coercive

$$\exists \nu > 0 \text{ tel que } a(v, v) \geq \nu \|v\|^2 \quad \forall v \in V_0$$

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.

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

$$u^h(t,x) = \sum_{i=1}^{n} u_i(t)\,\varphi_i(x)$$

$$\frac{d}{dt}\langle u^h, \varphi_j\rangle + a(u^h, \varphi_j) = \langle f, \varphi_j\rangle$$

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{du_i}{dt}(t)\,\langle \varphi_i, \varphi_j\rangle + \sum_{i=1}^{n} u_i(t)\, a(\varphi_i, \varphi_j) = \langle f, \varphi_j\rangle \quad \forall j$$

$$M\,\frac{dv}{dt}(t) + K\,v(t) = b(t)$$

M, K matrices $n\times n$

$$v = (u_i)_{1\le i\le n}$$

$$v(0) = (u^0_h(i))_{1\le i\le n}$$

Définitions

2 matrices sym et déf ≥ 0

On appelle matrice de masse

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

On appelle matrice de rigidité

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

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

$$M_h v.v = \int_0^L \left(\sum_{i=1}^n u_i \phi_i\right)^2 dx = \|u_h\|^2_{L^2(0,L)} \geq c\|v\|^2$$

$c > 0$

par équivalence des normes en dim finie

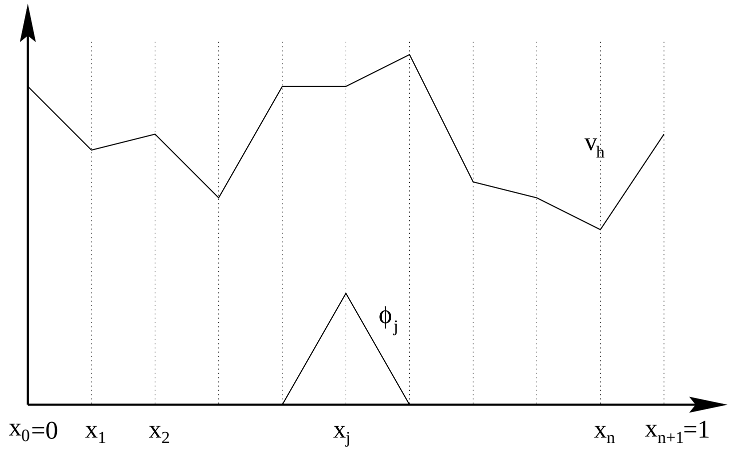
$\Rightarrow M_h$ est déf > 0 donc inversible

$\phi_j(x) = \phi\left(\frac{x - x_j}{h}\right)$

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

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

$x_j = jh$ et $h = \frac{1}{n+1}$



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

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

$$K_h = \frac{1}{h} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & 0 \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\int_0^L f(x)\,dx \simeq \sum_{j=1}^{m} h\, f(x_j) + \frac{1}{2} h \left(f(x_0) + f(x_{m+1}) \right)$$

$$\int_0^L \varphi_i \varphi_j \,dx \simeq \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases}$$

Condensation de masse

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

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

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

Discrétisation totale en espace-temps

L'approximation variationnelle interne conduit à

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

pour l'équation de la chaleur et à

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

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

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

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

$\theta = 0$ schéma explicite (au moins si on utilise la condensation de masse)

Problème aux valeurs propres

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

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

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

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

$\phi' u - \nu \phi u'' = 0 \iff \frac{\phi'}{\phi}(t) = \nu \frac{u''}{u}(x) = \lambda$ cste !

$\phi(t) = \alpha e^{\lambda t}$

$u - \frac{\nu}{\lambda} u''(x) = 0$ dans $(0,L)$

$u(0) = u(L) = 0$

Equation des ondes

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

$\phi'' u - c^2 \phi u'' = 0 \iff \frac{\phi''}{\phi}(t) = c^2 \frac{u''}{u}(x) = \lambda$ cste !

Exercice Vérifier que $\lambda \leq 0$

$\phi(t) = \alpha e^{\sqrt{\lambda} t} + \beta e^{-\sqrt{\lambda} t}$ si $\lambda \geq 0$

$= \alpha \cos \sqrt{-\lambda}\, t + \beta \sin \sqrt{-\lambda}\, t$ si $\lambda \leq 0$

$u'' = \lambda u$

$u(0) = u(L) = 0$

Si $\lambda \geq 0 \Rightarrow u = a e^{\sqrt{\lambda} x} + b e^{-\sqrt{\lambda} x}$

$u(0) = 0$
$u(L) = 0$

$\begin{cases} a + b = 0 \\ a e^{\sqrt{\lambda} L} + b e^{-\sqrt{\lambda} L} = 0 \end{cases} \Leftrightarrow a = b = 0$

pas bien!
(pas de solution)

Si $\lambda < 0$ $\quad u = a \cos \sqrt{-\lambda}\, x + b \sin(\sqrt{-\lambda}\, x)$

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

$u(L) = 0 \quad \sin(\sqrt{-\lambda} L) = 0$

$$\boxed{L = \frac{k\pi}{\sqrt{-\lambda}}}$$

$$\boxed{\lambda = -\frac{k^2 \pi^2}{L^2}} \quad \forall k \in \mathbb{N}$$

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 $\lambda \in \mathbb{R}$, $U \in \mathbb{R}^N$, $U \neq 0$

$$\mathcal{K}U = \lambda \mathcal{M}U$$

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

Remarque: nbre de valeurs propres est fini! Seules les plus petites valeurs propres sont bien approchées

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

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

eq $\times\ \varphi \in V_0 \implies \int_0^L u'\varphi'\,dx - \underbrace{u'(L)\varphi(L) + u'(0)\varphi(0)}_{=0} = \lambda \int_0^L u\varphi\,dx$

$$\boxed{\text{Trouver } \lambda \in \mathbb{R},\ u_{\neq 0} \in V_0 \text{ tel que } \int_0^L u'\varphi'\,dx = \lambda \int_0^L u\varphi\,dx \quad \forall \varphi \in V_0}$$

Approximation variationnelle interne V_h^0 de base $(\varphi_i)_{1\leq i\leq n}$

Trouver $\lambda_h \in \mathbb{R}$, $u_h \in V_h^0$ tel que $\int_0^L u_h'\varphi_h'\,dx = \lambda_h \int_0^L u_h\varphi_h\,dx$

$\forall \varphi_h \in V_h^0$

$$K_h U = \lambda_h M_h U$$

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).

[illegible] = gausse

$Ax = b$

$\Updownarrow$

$Ly = b$ "descente"

$Ux = y$ "remonté"

$\sum_{i=2}^{n} (i-1) \simeq \frac{n^2}{2}$

$Ux = y$ coût $\simeq \frac{n^2}{2}$

Méthodes directes

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

Coût $\sum_{k=1}^{n} \sum_{j=k}^{n} (n-k) \simeq \left(\frac{n^3}{3}\right)$

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

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

$$A = BB^*$$

coût $\simeq \frac{n^3}{6}$

Résolution par remontée-descente: on résout successivement (et facilement !) $Ly = b$ (descente) puis $Ux = y$ (remontée).

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

$\boxed{\text{Méthodes itératives}}$

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

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

$x_{k+1} = M^{-1}Nx_k + M^{-1}b$

Si $x_{k+1} \xrightarrow[k \to +\infty]{} x$

$Mx = Nx + b$

$\Updownarrow$

$Ax = b$

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 !

Convergence ssi $\rho(M^{-1}N) < 1$

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 $\rho(M^{-1}N) < 1$.

Remarque. • on espère converger après un nombre d'itérations "petit" par rapport à n (car le coût d'une itération est n^2)
• on gagne en mémoire pour les grandes matrices

$C^{-1}A = \tilde{M} - \tilde{N}$

$\rho(\tilde{M}^{-1}\tilde{N}) < \rho(M^{-1}N)$?

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.

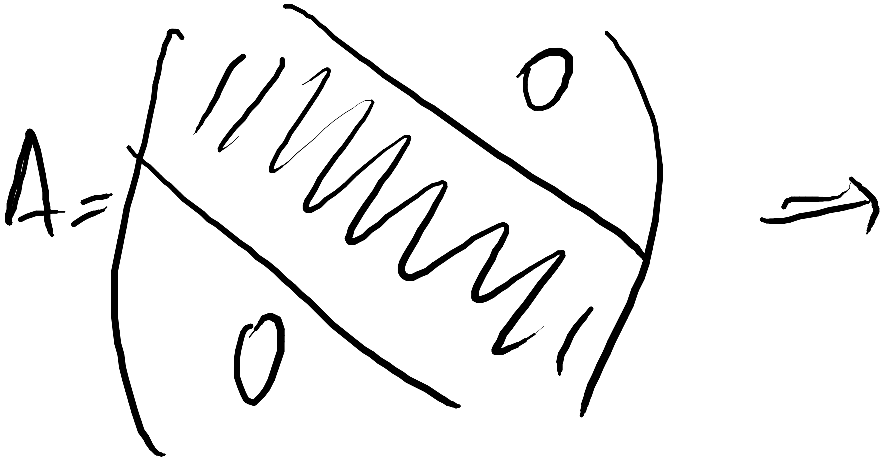
Exemple: $C = diag(A)$ ou bien $C =$ approximation de LU.

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.

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

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

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 $Ax = b$.