Quelques notions concernant les PCs

Ce document n'a pas pour but de remplacer le cours et les PCs. Il présente uniquement certaines idées générales (souvent incomplètes) pour avoir une vision globale sur le cours et les notions nécessaires pour résoudre les problèmes.

1 Différences finies

- Prouver l'existence et unicité des solutions pour un équation différentielle en temps : utiliser le théorème de Cauchy-Lipschitz
- Comment prouver qu'une énergie liée à une EDP est constante ou monotone en temps : essayez de dériver l'énergie et de prouver (en utilisant l'EDP) que la dérivée a bien le signe attendu. Pour interchanger l'intégrale et la dérivée on il est suffisant que la fonction sous l'intégrale soit de classe C^1.
- Comment prouver q'un schéma numérique de type différences finies converge ?
  - D'abord il faut écrire le schéma sous la forme d'une récurrence vectorielle : voir les PC1, PC2, PC3. Observer les différences entre les termes explicites et implicites. Toutes les dérivées en espace devront être aussi écrites comme produits matrice vecteur.

    La relation de récurrence va permettre d'avoir une expression de l'erreur : voir PC1-2-3. Observez les différences entre les termes implicites et explicites.
  - **Stabilité :** prouver que les normes des puissances des matrices impliquées dans la récurrence vectorielle ont une borne supérieure indépendante de n.
    - Stabilité L^∞ : dans les exercices traités on a toujours eu une relation qui permettait d'exprimer les éléments de U^{n+1} comme une combinaison convexe des éléments de U^n. Voir chapitre 1 dans le cours ou la feuille PC 3.
    - Stabilité L^2 : dans le cas des conditions aux limites periodiques il est possible d'obtenir des estimations sur la norme L^2 en utilisant la transformée de Fourier. La procédure utilisée a été décrite dans les PC 2-3. Pour plus des détails voir les corrections des feuilles PC 2-3 et le Chapitre 2 du cours.
    - si la stabilité n'a pas besoin d'une certaine relation entre les pas de temps et d'espace on dit que le schéma est **inconditionnellement stable**. En général une inégalité disant que le pas de temps Δt doit être plus petit qu'une expression contenant Δx est nécessaire. Cette inégalité est appelée **condition CFL** (Courant-Friedrichs-Lewy)
  - **Consistance :** prouver (sous hypothèses de régularité) que l'erreur de troncature tend vers zéro quand les pas de temps et espace tendent vers 0. C'est ici qu'on utilise des développements de Taylor. En général il est bien de faire le développement de tous les termes autour du même point (disons (x_j, t^n)) pour pouvoir récupérer l'EDP évaluée en (x_j, t^n)
  - **Convergence :** combiner les résultats décrits ci-dessus pour conclure que l'erreur tend vers zéro. La stabilité va permettre de borner les puissances des matrices qui apparaissent dans l'expression de l'erreur et la consistance permet de voir que les erreurs de troncature tendent vers zéro.
  - L'ordre de la méthode en temps et en espace est établi par les restes que vous obtenez en faisant les développements de Taylor.

2 Éléments finis

- Formulation variationnelle
  - D'abord il faut choisir l'espace de fonctions test: on a vu l'espace des fonctions C^1 par morceaux et le même espace avec la condition supplémentaire que les fonctions s'annulent au bord. En général les conditions de type Dirichlet vont être incluses dans l'espace des fonctions test.
  - Pour obtenir la formulation variationnelle $a(u,v) = L(v) \;\; \forall v \in V(\Omega)$ on multiplie l'EDP (EDO) par une fonction test et on intègre par parties. La forme bilineaire va regrouper tous les termes qui contient u et v et la partie linéaire, tous les termes en v. On utilise les éventuelles conditions au bord pour simplifier les expressions.
  - Pour montrer que la formulation variationnelle implique la formulation EDP (EDO) on intègre par parties dans l'autre sens à partir de la formulation variationnelle. En général, il y a besoin de supposer que la solution est assez régulière pour pouvoir faire l'IPP.

    Une fois l'IPP effectuée, on regroupe toutes les intégrales contre v pour obtenir une expression $\int gv = 0$ pour tout v dans l'espace des fonctions test. En choisissant v à support compact, il est possible d'utiliser le lemme 3.1.7 du cours qui permet de conclure que $g \equiv 0$. Parfois (voir l'exercice 3 de la feuille sur les éléments finis) il est necessaire de choisir v avec support compact dans une sous-intervalle, pour obtenir une partie de l'équation.

    Une fois que vous prouvez que le terme intégral est nul, les autres termes (si il en restent) vont donner les conditions au bord. Pour les obtenir on choisit v égal à 1 au point qui nous intéresse et zéro aux autres points du bord.

- Espaces éléments finis
  - Éléments finis $\mathbb{P}_1$: approximation par des fonctions continues, affines sur chaque maille. Pour simplifier les calculs on choisit une base convenable des fonctions φ_i qui s'annulent au tous les nœuds sauf x_i ou $\varphi_i(x_i) = 1$.
  - Éléments finis $\mathbb{P}_2$: approximation par des polynômes de degré 2 sur chaque maille. Cette fois-ci on a besoin d'un point intermédiaire sur chaque maille pour créer une base convenable. Voir le cours pour plus de détails.

- Matrices de masse et rigidité :
  - **Matrice de masse:** Si φ_i, $i = 1, ..., N$ est une base de l'espace d'elements finis alors la matrice de masse correspondante est $\mathcal{M} = (\int \varphi_i \varphi_j)_{i,j=1,...,N}$. Une propriété essentielle de cette matrice est que si $u_h = \sum_{i=1}^N U_i \phi_i$ et $v_h = \sum_{i=1}^N V_i \phi_i$ alors
$$\int u_h v_h = U^t \mathcal{M} V.$$
  - **Matrice de rigidité:** Si φ_i, $i = 1, ..., N$ est une base de l'espace d'éléments finis alors la matrice de rigidité correspondante est $\mathcal{K} = (\int \varphi_i' \varphi_j')_{i,j=1,...,N}$. Une propriété essentielle de cette matrice est que si $u_h = \sum_{i=1}^N U_i \phi_i$ et $v_h = \sum_{i=1}^N V_i \phi_i$ alors
$$\int u_h' v_h' = U^t \mathcal{K} V.$$
  - **écriture d'un système linéaire à partir d'une formulation variationnelle** Si le problème variationnel discret est $a(u_h, v_h) = L(v_h)$ pour tout $v_h \in V_h$ alors en remplaçant u_h, v_h par leurs coefficients dans une base (φ_i) on obtient
$$(V_h)^t \mathcal{A} U_h = (V_h)^t b_h$$

pour tout $V_h \in \mathbb{R}^N$. La matrice $\mathcal{A}$ est défini par $\mathcal{A} = (a(\varphi_i, \varphi_j)_{i,j=1,...,N}$ et peut souvent être exprimée a l'aide des matrices de masse et rigidité pour des problèmes pour lesquels la formulation variationnelle contient au plus de dérivées premières. Le vecteur b_h contient les éléments $L(\varphi_i)$ qui sont calculées en utilisant des formules de quadrature.

- Convergence
  - **Lemme de Céa** : (ces notes n'ayant pas pour but de remplacer le cours, je rappelle uniquement le principe) ce lemme permet de voir que l'erreur entre la solution exacte et la solution approchée est bornée par une constante dépendant du problème (contenant les constantes de continuité et de coercivité) multipliée par **la distance entre la solution et l'espace discret**. Ceci est l'analogue de la **stabilité** pour les différences finies : les erreurs numériques ne vont pas "exploser" quand le pas de discrétisation tend vers 0 tant que l'espace éléments finis choisis est raisonnable.
  - **Lemme d'interpolation** : ce lemme permet de choisir un certain élément de l'espace discret et de continuer l'estimation donnée par le lemme de Céa. L'élément à choisir est souvent une certaine interpolation de la solution en utilisant l'espace discret. Pour les espaces d'éléments finis $\mathbb{P}^1$, sous certaines hypothèses de régularité, on obtient une convergence d'ordre 1 pour la norme $\|f\|_V^2 = \|f\|_{L^2}^2 + \|f'\|_{L^2}^2$ et d'ordre 2 en L^2. Si on augmente le degré d'approximation, l'ordre de convergence s'améliore (si on a assez de régularité).
  - **Implémentation numérique:** comme nous avons pu observer dans les simulations numériques, pour atteindre l'ordre de convergence obtenu dans les résultats numériques il faut faire attention à l'implémentation: il faut que le calcul des intégrales soit assez précis pour ne pas perdre de la précision quand on construit le système linéaire. En général, il est souhaitable d'avoir des formules de quadrature qui sont exactes pour des polynômes de degré assez haut : ordre 5 dans le notebook Python fourni.

3 Optimisation

Rappel : ci-dessous vous avez les idées générales. Pour une description complète des hypothèses et résultats voir le cours !

La partie optimisation du cours contient des aspects concernant l'optimisation théorique et numérique en dimension finie. L'avantage de la dimension finie est le fait qu'on peut récupérer relativement facilement des propriétés de compacité. Tout problème d'optimisation est équivalent à la formulation suivante:

$$m = \inf_{x \in V} J(x) \tag{1}$$

Si l'infimum est atteint alors on peut changer $\inf$ en $\min$.

$\star$ **Dérivée Fréchet :** Pour voir si J est derivable on peut proceder ainsi :

- Écrire $J(v+h) = J(v) + \mathcal{L}(v)(h) + \mathcal{Q}(v)(h)$ où $\mathcal{L}$ contient les termes linéaires et $\mathcal{Q}$ contient les termes d'ordre plus élevé.
- On dit que J est derivable au sens du Frechet si $\mathcal{L}$ est linéaire et **continue** et, en plus, le reste $\mathcal{Q}(v)(h)$ est $o(\|h\|)$ quand $\|h\| \to 0$.
- souvent la continuité et le fait que le reste est $o(\|h\|)$ reviennent aux questions concernant la continuité des formes bilinéaires. Pensez souvent à des inégalités type Cauchy-Schwarz ou des inégalités basiques concernant les normes matricielles.

⋆ **Convexité :** Vérifier la convexité avec la définition n'est pas la plus rapide solution si J est dérivable.

- Utilisez le résultat du cours qui vous dit que J est convexe si et seulement si

  $$J(v+h) \geq J(v) + J'(v)(h)$$

  pour toutes choix de v et h. La strictement convexité revient à avoir une inégalité stricte quand $h \neq 0$.

- souvent le calcul de $J(v+h)$ fait pour la dérivée sert aussi pour montrer la convexité

1. **Existence des solutions:**
   - Cas classique. Si V est compacte et J est continue, alors J atteint son infimum.
   - Si $V \subset \mathbb{R}^n$ est un ensemble fermé alors l'existence des solutions n'est pas automatique. Pour empecher l'existence des suites minimisantes qui vont vers l'infini on peut imposer que J soit *infinie à l'infini*. Par conséquence, si J est continue et ∞ à l'infini on a l'existence d'une solution.
   - Cas convexe. Quand la fonction J est convexe et $V = \mathbb{R}^n$ alors l'existence d'une solution revient à regarder si la l'équation $J'(u) = 0$ admet une solution. (voir plus bas)
2. **Unicité des solutions:** Il y a une seule situation qui permet d'avoir l'unicité : la fonction J doit être strictement convexe et l'ensemble K convexe.
3. **Conditions d'optimalité** : on suppose que J est dérivable.
   - si J admet un minimum qui est à l'intérieur de V (condition vérifiée automatiquement si $V = \mathbb{R}^n$, par exemple) alors $J'(u) = 0$. **Cette condition est aussi suffisante si J est convexe**
   - si V est convexe et u est un minimiseur de J sur V alors $J'(u)(v-u) \geq 0$ pour $v \in K$. Cette condition est aussi suffisante si J est convexe.
4. **Contraintes d'égalité:** voir le cours pour les détails. L'idée est que si au point de minimum les contraintes et la fonctionnelle sont dérivables et en plus les dérivées des contraintes sont linéairement indépendantes alors la dérivée de J est une combinaison linéaire des dérivées des contraintes. Les coefficients sont appelles les multiplicateurs de Lagrange.
5. **Contraintes d'inégalité:**
   - vérifier quelles sont les contraintes actives : celles qui réalisent l'égalité à l'optimum. C'est uniquement ces contraintes qui vont apparaître avec des multiplicateurs de Lagrange non-nuls.
   - **qualification des contraintes:** les dérivées des contraintes actives doivent être linéairement indépendantes à l'optimum. Si vous avez **que des contraintes affines** elles sont automatiquement qualifiées
   - sous ces hypothèses on a la même conclusion que pour les contraintes d'égalité mais avec des multiplicateurs de Lagrange positifs
   - **complémentarité, écarts complémentaires :** soit la contrainte est active (donc on a égalité) soit le multiplicateur de Lagrange associé est nul
6. **Kuhn-Tucker:** voir le cours pour les détails.

- Si la fonctionnelle J et les contraintes **d'inégalité** sont convexes, la stationnarité du Lagrangien (i.e. la relation des multiplicateurs de Lagrange) est aussi une condition suffisante.
- **Attention!!!** ce théorème s'applique uniquement pour des contraintes d'inégalité.
- **Exception:** une contrainte d'égalité affine peut être écrite comme deux contraintes d'inégalité affines, donc convexes. Ceci permet d'appliquer Kuhn-Tucker.
- **Attention!!!** le Lagrangien doit être défini sur un voisinage de l'ensemble des contraintes (souvent il est défini sur tout l'espace). Voir le dernier exercice sur les feuilles 8-9 et le premier du feuille 10.