Les méthodes spectrales

Bastien DI PIERRO

Université Claude Bernard Lyon 1

15 avril 2021

Formalisme

Soit $\mathscr{L}(.)$ un opérateur différentiel définit sur Ω tel que

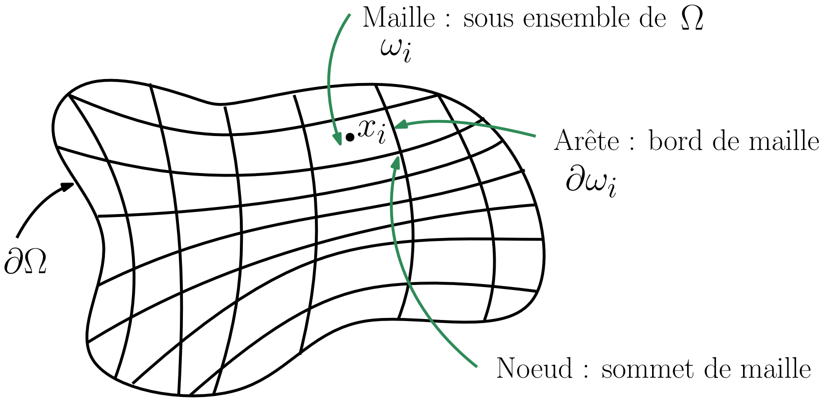
$$\mathscr{L}(u(x)) = \sum_{i=0}^{M} \alpha_i \frac{d^i u(x)}{dx^i}$$

et soit $u(x) \in C^M$ tel que

$$\mathscr{L}(u(x)) = f(x)$$

Discrétisation et maillage

Soient x_i un ensemble de N points <u>discrets</u> représentant Ω



Discrétisation et maillage

On définit la solution discrète u_i comme solution approchée de la solution exacte $u(x)$

$$u_i \approx u(x_i)$$

de $\mathscr{L}(u(x)) = f(x)$ par l'opérateur discret

$$\mathscr{L}_h(u_i) = f_i$$

Différences finies : idée

On utilise le théorème des accroissements finis pour estimer les dérivées :

$$\left.\frac{du(x)}{dx}\right|_{x_0} = \lim_{h\to 0} \frac{u(x_0+h) - u(x_0)}{h}$$

De façon générale :

$$\left.\frac{du(x)}{dx}\right|_{x_0} = \frac{1}{h} \sum_{k=-\zeta}^{\lambda} \alpha_k u(x_0 + kh)$$

avec $\kappa = \lambda + \zeta$ le support.

Différences finies : ordre 1

- Décentré droite :

$$\left.\frac{du(x)}{dx}\right|_{x_i} \approx \frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{x_{i+1} - x_i} = \frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i}$$

- Décentré gauche :

$$\left.\frac{du(x)}{dx}\right|_{x_i} \approx \frac{u(x_i) - u(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} = \frac{u_i - u_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$$

- Centrées :

$$\left.\frac{du(x)}{dx}\right|_{x_i} \approx \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1})}{x_{i+1} - x_{i-1}} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}$$

Différences finies : ordre 1

- Avantages :
  - simple
  - efficace
  - ordre élevé facile
- Inconvénients :
  - Domaine assez régulier
  - Conditions aux limites (préservation de l'ordre)

Élements finis : idées

- Le domaine est discrétisé en éléments
- La solution est interpolée sur chaque élément
- Éléments finis = interpolation (de la solution) + discrétisation
  - On se donne $\{\phi_j(x)\}$ les polynomes d'interpolations (Lagrange)
  - On interpole

$$u_i(x) = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \phi_j x, \quad x \in \text{élément i}$$

Éléments finis

- On construit le résidu

$$R(u_i) = R_i = \mathscr{L}_h(u_i(x)) - f(x_i)$$

- et on le minimise

$$0 =< R_i, w_j >= \int_{\omega_i} R(u_i) w_j d\omega_i \quad \forall j = 0 \ldots N$$

$$\Rightarrow \sum_k \alpha_k \int_{\omega_i} \mathscr{L}_h(\phi_k(x)) w_j d\omega_i = \int_{\omega_i} f(x_i) w_j d\omega_i \quad \forall j = 0 \ldots N$$

- Choix des w_j = choix de la méthode (pour calculer les intégrales exactes)

Éléments finis

- Avantages :
  - Géométrie complexe
  - Ordre élevé facile (=ordre d'interpolation)
  - Conditions aux limites "incluent" dans la formulation
- Inconvénients :
  - Méthode intégrale
  - Résolution matricielle

Volumes finis : idée

- On écrit $\mathscr{L}_h$ sous forme conservative :

$$\mathscr{L}_h(u_i(x)) = \nabla \cdot (\mathscr{F}_h(u_i))$$

- On construit un volume de contrôle $= \omega_i$
- On construit le résidu

$$R(u_i) = R_i = \mathscr{L}_h(u_i(x)) - f(x_i)$$

- et on l'annule en moyenne

$$0 = \int_{\omega_i} \mathscr{L}_h(u_i(x)) - f(x_i) d\omega_i$$

Volumes finis : discrétisation

- Formulation intégrale :

$$\int_{\partial\omega_i} \mathscr{F}_h(u_i) \cdot \vec{n}\, d(\partial\omega_i) = \int_{\omega_i} f(x_i) d\omega_i$$

- Discrétisation

$$\sum_k \mathscr{F}_h(u_i) \cdot \vec{n_k} S_k = \int_{\omega_i} f(x_i) d\omega_i \approx V_i f(x_i)$$

S_k : surface du bord de maille, V_i : volume de la maille

Volumes finis

- Avantages
  - Géométrie complexe
  - Formulation conservative
  - Formulation simple
- Inconvénients
  - On résoud les valeurs moyennes (à ω_i)
  - Limité aux bas ordres (≤ 2)

Méthodes spectrales : idée

- Appartient à la méthode des résidus pondérés (comme E.F.)
- On se donne un produit scalaire

$$< u, v >_w = \int_\alpha^\beta u(x)v(x)w(x)dx$$

avec u et v 2 fonctions C^∞ sur $[\alpha, \beta]$, w une fonction poid.

- On décompose les champs

$$u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{u}_k \psi_k(x)$$

tel que $< \psi_i, \psi_j >_w = \delta_{ij}$

Méthodes spectrales : idée

- On introduit l'approximation

$$u_N(x) = \sum_{k=0}^{N} \hat{u}_k \psi_k(x)$$

telle que $\lim_{N\to\infty} u_N(x) = u(x)$

- On introduit un résidu R_N

$$R_N(x) = u_N(x) - u(x) \quad \text{ou} \quad R_N(x) = \mathscr{L}(u_N) - f(x)$$

- que l'on cherche à annuler

$$< R_N, \Psi_i >_w = \int_\alpha^\beta R_N(x)\Psi_i(x)w(x) = 0$$

avec Ψ_i une fonction test et w le poid associé à ψ_i.

Méthode de collocation

On a

$$\Psi_i(x) = \delta(x - x_i), \quad w(x) = 1$$

avec x_i les points de collocations (à déterminer)

$$\int R_N(x)\delta(x - x_i)dx = 0 \quad \forall i = 0...N$$

$$\Rightarrow R_N(x_i) = 0$$

Le résidu est nul en chaque point de collocation :

$$u(x_i) = u_N(x_i) = \sum_{k=0}^{N} \hat{u}_k \psi_k(x) \quad \forall i = 0...N$$

Il s'agit donc d'une interpolation de $u(x)$ aux points x_i sur les fonction $\psi_k(x)$!

Méthode de Galerkin

Fonctions test = fonctions de base $\Psi_i(x) = \psi_i(x)$

$$
\begin{aligned}
< R_N, \psi_i > &= \int R_N(x)\psi_i(x)w(x)dx \\
&= \int_\alpha^\beta \left(u(x) - \sum_k \hat{u}_k \psi_k(x) \right) \psi_i(x)w(x)dx = 0
\end{aligned}
$$

et on décompose $R_N(x) = \sum_k \hat{r}_k \phi_k(x)$, on a donc

$$\sum_k \hat{r}_k \int \phi_k(x)\psi_i(x) = 0$$

ce qui donne une formulation exacte pour les $\hat{u}_k$

$$\hat{u}_k = \frac{1}{c_k} \int u(x)\psi_k(x)w(x)dx \quad \forall k = 0 \ldots N$$

Problème type

- Equation à coefficient constant

$$\mathscr{L}(u(x)) = \sum_k a_k \frac{d^k}{dx^k} u(x) = f(x) \quad \alpha < x < \beta$$

- avec conditions aux limites

$$\sum_k \delta_k \left.\frac{d^k u(x)}{dx^k}\right|_{x=\alpha} = g_- \quad , \quad \sum_k \gamma_k \left.\frac{d^k u(x)}{dx^k}\right|_{x=\beta} = g_+$$

Méthode de Galerkin

- Applicable uniquement en homogène $g_+ = g_- = 0$
- On pose $u(x) = \zeta(x) + v(x)$ avec $v(x)$ satisfait les C.L. homogènes, $\zeta(x)$ satisfait les C.L. du problème.
- On résoud donc :

$$\mathscr{L}(v(x)) = f(x) - \mathscr{L}(\zeta(x)) = g(x) \quad \alpha < x < \beta$$

avec

$$\sum_k \delta_k \left.\frac{d^k v(x)}{dx^k}\right|_{x=\alpha} = 0 \quad , \quad \sum_k \gamma_k \left.\frac{d^k v(x)}{dx^k}\right|_{x=\beta} = 0$$

Méthode de Galerkin

On a

$$V_N = \sum_k \hat{v}_k \psi_k(x)$$

et

$$R_N = \mathscr{L}(v(x)) - g(x) \text{ tel que } \quad < R_N, \psi_i >_w = 0$$

et donc :

$$\begin{aligned} \sum_k \hat{v}_k < \mathscr{L}(\psi_k(x)), \psi_i(x) >_w &= < g(x), \psi_i(x) >_w \\ &= \int g(x)\psi_i(x) w(w) dx = C_i \hat{g}_i \end{aligned}$$

Méthode de Galerkin

Or

$$< \mathscr{L}(\psi_k(x)), \psi_i(x) >_w = < \sum_k a_k \frac{d^k}{dx^k} \psi_k(x)), \psi_i(x) >_w$$

et les dérivées de $\psi_k(x)$ est aussi décomposable sur la base !

$$\frac{d^l}{dx^l} \psi_k(x) = \sum_j \beta_j \psi_j(x)$$

On obtient :

$$\sum_k \hat{v}_k < \mathscr{L}(\psi_k(x)), \psi_i(x) >_w = \sum_k \hat{v}_k < \sum_j \beta_j \psi_j(x), \psi_i(x) >_w$$

et finalement :

$$\sum_k \hat{v}_k \alpha_{ik} Ck = Ci \hat{g}_i$$

Méthode de collocation

Les inconnues sont ici les $u_i = u_N(x_i) = \sum_k \hat{u}_k \psi_k(x_i)$

$$\frac{du(x_i)}{dx} = \sum_{k=1}^{N} \hat{u}_k \frac{d\psi_k(x_i)}{dx}$$

et on a explicitement les coefficients :

$$\hat{u}_k = \frac{1}{c_k} \sum_{j=1}^{N} u(x_j)\phi_k(x_j)$$

On obtient :

$$\frac{du(x_i)}{dx} = \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{c_k} \sum_{j=1}^{N} u(x_j)\phi_k(x_j) \frac{d\psi_k(x_i)}{dx} = \sum_{k=1}^{N} d_{ik} u_N(x_i)$$

Méthode de collocation

Il s'agit donc d'un système matriciel

$$\frac{d}{dx}\begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{pmatrix}$$

où D est une matrice (à priori pleine).
On peut généraliser à la dérivée d'ordre n :

$$\frac{d^n u_N(x_i)}{dx^n} = D^n u_N(x_i)$$

Méthode de Fourier

On discrétise la transformée de Fourier

$$u_N(x) = \sum_{k=-\kappa}^{\kappa} \hat{u}_k e^{ikx}$$

On a alors

$$< u, v >= \int_0^{2\pi} u(x)\bar{v}(x) dx$$

et donc

$$< \psi_i, \psi_l >= \int_0^{2\pi} e^{ikx} e^{-ilx} dx = 2\pi\delta_{il}$$

et finalement :

$$\hat{u}_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u(x) e^{-ikx} dx \approx \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N} u(x_j) e^{-ikx_j}, \qquad x_j = \frac{2\pi j}{N}$$

Méthode de Fourier

- Fourier Galerkin

$$\left(\widehat{\frac{du}{dx}}\right)_k = ik\hat{u}_k \qquad \left(\widehat{\frac{d^n u}{dx^n}}\right)_k = (ik)^n\hat{u}_k$$

- Fourier Collocation

$$D_{kj} = \frac{(-1)^{k+j}}{2\sin(x_k - x_j)}(1 - \delta_{kj})$$

- Erreur et convergence Si $u(x) \in C^m$, alors $\hat{u}_k = O(|k|^- m)$ et

$$||u(x) - u_N(x)|| \leq CN^{-m}||u^{(m)}(x)||$$

$\Rightarrow$ décroissance exponentielle si $m \to \infty$

Méthode de Tchebychev

On introduit les polynômes de Tchebychev :

$$T_k(x) = \cos(k cos^{-1}(x)), \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

ou encore

$$\begin{aligned}
T_k(x) &= \frac{k}{2}\sum_{m=0}^{k/2}(-1)^m\frac{(k-m-1)!}{m!(k-2m)!}(2x)^{k-2m} \\
T_0(x) &= 1 \\
T_1(x) &= x \\
T_2(x) &= 2x^2-1 \\
T_3(x) &= 4x^3-3x
\end{aligned}$$

Polynômes de Tchebychev : quelques propriétés

- Symétrie : $T_k(-x) = (-1)^k T_k(x)$
- Récurence : $T_{k+1}(x) + T_{k-1}(x) = 2xT_k(x)$
- Récurence 2 :

$$\frac{1}{k+1}\frac{dT_{k+1}(x)}{dx} - \frac{1}{k-1}\frac{dT_{k-1}(x)}{dx} = 2T_k(x) \quad (k > 1)$$

- Annulation : $T_k(x_i) = 0 \quad$ si $\; x_i = \cos\left(\left(i + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{k}\right)$
- Annulation 2 (points de Gauss-Lobatto) :

$$\left.\frac{dT_k(x)}{dx}\right|_{x=x_i} = 0 \quad \text{si} \quad x_i = \cos\left(i\frac{\pi}{k}\right)$$

Méthode de Tchebychev

On introduit la série tronquée :

$$u_N(x) = \sum_{k=0}^{N} \hat{u}_k T_k(x) \tag{1}$$

avec le produit scalaire :

$$< u, v >_w = \int_{-1}^{1} u(x)v(x)w(w)dx \quad \text{avec} w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$$

menant à

$$< T_k, T_l >_w = \int_{-1}^{1} \frac{T_k(x) T_l(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{\pi}{2} c_k \delta_{kl}$$

avec $c_k = 2$ si $k = 0$, 1 sinon

Méthode de Tchebychev

- Tchebychev Collocation (points de Gauss-Lobatto):

$$D_{ij} = \frac{\bar{c}_i}{\bar{c}_j} \frac{(-1)^{i+j}}{x_i - x_j} \quad 0 \leq i, j \leq N, \quad i \neq j$$

$$D_{ii} = \frac{-x_i}{2(1 - x_i^2)} \qquad D_{00} = -D_{NN} = \frac{2N^2 + 1}{6}$$

- Tchebychev Galerkin :

$$\frac{dT_{k+1}(x)}{dx} = 2(k+1)\,T_k(x) + \frac{k+1}{k-1} \frac{dT_{k-1}(x)}{dx}$$
$$= \frac{2k}{\bar{c}_k} \sum_j T_{k-2j-1}$$

Equation de convection diffusion stationnaire

- On cherche à résoudre

$$V\frac{du}{dx} + \nu\frac{d^2u}{dx^2} = f(x)$$

- Fourier Galerkin (CL périodiques)

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi}\left(V\frac{du}{dx} + \nu\frac{d^2u}{dx^2} - f(x)\right)e^{-ikx}dx &= 0 \\ \Rightarrow (ikV - Dk^2)\hat{u}_k &= \hat{f}_k \end{aligned}$$

Equation de convection diffusion stationnaire

- On cherche à résoudre

$$V\frac{du}{dx} + \nu\frac{d^2u}{dx^2} = f(x)$$

- Tchebychev collocation (CL homogènes)

$$\int_0^{2\pi}\left(V\frac{du}{dx} + D\frac{d^2u}{dx^2} - f(x)\right)\delta(x - x_i)dx \quad = \quad 0$$

$$\Rightarrow [VD + \nu D^2]\begin{pmatrix}\vdots\\ u_i\\ \vdots\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\vdots\\ f_i\\ \vdots\end{pmatrix}$$

Conclusion

Formalisme mathématique LOURD !

Implémentation pas si compliquée