

TP2 : Solving the Laplacian equation with Boundary conditions through the pseudospectral method

David Loureiro

29 mai 2007

Table des matières

1	Méthode pseudospectrales	2
1.1	Contexte, préambule et point de vue adopté	2
1.2	Procédure pour la résolution d'une équation différentielle avec conditions aux limites	2
2	Les polynômes de Tchebychev	2
2.1	Polynômes orthogonaux et quadratures	2
2.2	Généralités et propriétés principales des polynômes de Tchebychev	3
2.3	Quadratures et points de collocation associés aux polynômes de Tchebychev	3
2.4	Poids des quadratures et points de collocation associés	3
2.4.1	Quadrature de Gauss-Lobatto	4
2.5	Représentation d'une fonction sur les polynômes de Tchebychev	4
3	Matrice de passage pour les points de collocation de Gauss-Lobatto	4
3.1	Formules générales	4
3.2	Expression des éléments des matrices de passage pour les points de collocation de Gauss-Lobatto	5
4	Dérivation numérique via le développement sur les polynômes de Tchebychev	5
4.1	Dérivée physique et dérivée spectrale	5
4.2	Matrice de dérivation spectrale	6
4.3	Liens entre matrices de dérivation physique et spectrale	6
4.4	Dérivées d'ordres supérieurs	6
5	Matrice de dérivation aux points de Gauss-Lobatto	6
5.1	Contexte	6
5.2	Expressions des matrices de dérivation première dans l'espace physique sur les points de collocation de Gauss-Lobatto	7
5.3	Dérivées d'ordre supérieur	7
6	Bibliographie	7

1 Méthode pseudospectrales

1.1 Contexte, préambule et point de vue adopté

L'objectif, lorsqu'il s'agit de résoudre numériquement une équation différentielle, est d'évaluer (aussi précisément que possible) les valeurs prises par la solution (les valeurs nodales) en un certain nombre de points (les points de collocation). L'idée maîtresse sur laquelle repose cette approche est que, la solution numérique (celle obtenue aux points de collocation) tend vers la solution exacte du problème différentiel traité, l'approchant d'autant mieux que le nombre de valeurs nodales résolues est grand.

Dans le cadre de la méthode des différences finies, le degré d'approximation locale est fixe (typiquement d'ordre 2 ou 4) et la convergence, avec l'augmentation du nombre de points de collocation, vers la solution exacte est due au fait qu'une approximation de degré donné est d'autant plus précise que l'intervalle (la distance entre points de collocation voisins) sur lequel elle est construite est petit.

C'est sur ce point que diffère la méthode pseudospectrale : au lieu de figer le degré d'approximation local en chaque point de collocation et d'augmenter le nombre de ceux-ci, on construit une approximation globale (c.-à-d. basée sur l'ensemble de points de collocation). Cette approximation (polynomiale), de degré d'autant plus élevé que le nombre de point sur lequel elle est construite est grand, sera ainsi d'autant plus précise que le nombre de points de collocation employés est grand.

1.2 Procédure pour la résolution d'une équation différentielle avec conditions aux limites

La résolution numérique d'une équation différentielle linéaire, avec conditions aux limites, se résume à trois grandes étapes :

- La discrétisation du problème, c'est à dire le choix des points de collocation sur lesquels sera approximé l'équation différentielle. De ces points découle les expressions des dérivées (en ces mêmes points) qui permettent de construire le système linéaire liant les valeurs nodales entre elles.
- La prise en compte des conditions aux limites du problème : Au même titre que celles-ci complètent l'équation différentielle, leurs approximations numériques, injectées dans le système linéaire (relatif aux valeurs nodales) complètent ce dernier.
- La résolution du système linéaire liant les valeurs nodales entre elles.

2 Les polynômes de Tchebychev

2.1 Polynômes orthogonaux et quadratures

Connaissant les valeurs prises par une fonction $f(x)$ sur un jeu de $(N + 1)$ points de collocation x_i , on peut construire un polynôme d'interpolation de degré N : $P_N(x)$. Disposant d'une base de polynômes orthogonaux $B_k(x)$ (de degrés k), on peut développer $P_N(x)$ sur celle-ci ; c'est-à-dire comme une somme pondérée des $B_k(x)$:

$$P_N(x) = \sum_{k=0}^N a_k B_k(x) \quad \text{avec} \quad a_k = \frac{(f, B_k)}{(B_k, B_k)}$$

Où la notation $(., .)$ correspond à un produit scalaire discret entre les deux quantités concernées.

Sans rentrer dans les détails, disons simplement que toute la difficulté de ce développement réside, une fois le jeu de polynômes orthogonaux choisi, dans l'évaluation des coefficients a_k . La détermination de ceux-ci se ramène en fait à l'évaluation d'une intégrale impliquant $f(x)$

(généralement inconnue). le problème se réduit alors à celui de l'utilisation d'une quadrature (c.-à-d. de déterminer l'intégrale en tant que somme pondérée de $f(x)$ aux points de collocation) aussi efficace que possible.

Le choix d'une quadrature optimale (telles que celles de Gauss, Gauss-Radau et Gauss-Lobatto qui seront présentés plus bas) impose l'utilisation de jeux de points de collocation bien précis.

2.2 Généralités et propriétés principales des polynômes de Tchebychev

Les polynômes de Tchebychev (de première espèce) $T_k(x)$, sont tels que :

$$T_k(x) = \cos(k \arccos(x)) \quad , \quad x \in [-1, 1] \text{ et } k \in 0, 1, \dots$$

Les T_k sont des polynômes de degrés k liés par triplets par récurrence :

$$T_0(x) = 1 \tag{1}$$

$$T_1(x) = x \tag{2}$$

$$T_{k+1} = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x), k \geq 1 \tag{3}$$

Ces polynômes sont, sur l'intervalle $[-1; 1]$ et vis-à-vis de la fonction poids $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$, orthogonaux :

$$\int_{-1}^1 \frac{T_k(x)T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \begin{cases} 0 & \text{si } k \neq m \\ \pi & \text{si } k = m = 0 \\ \frac{\pi}{2} & \text{si } k = m \neq 0 \end{cases}$$

2.3 Quadratures et points de collocation associés aux polynômes de Tchebychev

La décomposition d'une fonction sur des polynômes orthogonaux demande d'évaluer des produits scalaires. Ces produits prennent la forme d'intégrales d'une fonction $f(x)$ (qui n'est a priori connue qu'au travers des valeurs qu'elle prend en $N+1$ points) par une fonction poids $w(x)$ connue.

On sait par ailleurs évaluer, de manière exacte, une telle intégrale, à condition que $f(x)$ soit un polynôme de degré au plus égal à N , et ceci quel que soient les abscisses x_i employées. Partant de ce constat, on peut se demander si il n'existe pas quelques jeux de points particuliers sur lesquels l'évaluation numérique de l'intégrale soit exacte pour des polynômes de degré supérieur à N . Une telle optimisation est effectivement possible ; c'est la quadrature de Gauss décrite ci-dessous.

2.4 Poids des quadratures et points de collocation associés

Le but de la manoeuvre est de déterminer les abscisses x_i et poids w_i tels que la relation :

$$\int_{-1}^1 f(x)w(x) dx = \sum_{i=0}^N w_i g(x_i)$$

soit exacte lorsque $f(x)$ est un polynôme de degré le plus élevé possible.

Remarque :

Dans le cadre d'un développement sur les polynômes de Tchebychev, la fonction "poids" dans l'intégrale est $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$. Les w_i apparaissant dans la somme sont par analogie, qualifiés de "poids de quadrature".

2.4.1 Quadrature de Gauss-Lobatto

En décomposition Tchebychev, la quadrature de Gauss-Lobatto, exacte pour des polynômes de degré $2N - 1$ ou moins, impose que les points de collocation soient les zéros de $(1 - x^2)T'_N(x)$. Ces points ont pour abscisses :

$$x_i = -\cos\left(\frac{i\pi}{N}\right) \quad \text{pour } i \in \llbracket 0, N \rrbracket$$

Et les poids de cette quadrature sont alors :

$$w_0 = w_N = \frac{\pi}{2N} \quad (4)$$

$$w_i = \frac{\pi}{N} \quad \text{pour } i \in \llbracket 1, N - 1 \rrbracket \quad (5)$$

2.5 Représentation d'une fonction sur les polynômes de Tchebychev

Sur $(N + 1)$ points de collocation répartis sur l'intervalle $[-1; 1]$, le polynôme d'interpolation $f_N(x)$ d'une fonction $f(x)$ est :

$$f_N(x) = \sum_{k=0}^N c_k T_k(x)$$

Où il est évident que (pour $f_N(x)$ donné), les coefficients spectraux c_k sont fixés. Toute manipulation de $f_N(x)$, en particulier des opérations de dérivation, intégration et interpolation numériques, se ramène à des manipulations des polynômes de Tchebychev $T_k(x)$, dont les propriétés et particularités sont bien connues.

Connaissant les valeurs prises par $f(x)$ aux points de collocation x_i , $y_i = f(x_i)$, on voit que la relation ci-dessus peut s'écrire sous la forme d'un produit matrice vecteur : $Pc = y$, où c est le vecteur des coefficients spectraux c_k et P est la matrice de passage dont les éléments sont $P(i, j) = T_j(x_i)$.

En d'autres termes, connaissant les valeurs nodales y_i , on a accès aux coefficients spectraux c_i (par multiplication du vecteur y par l'inverse de P) et réciproquement.

Terminologie :

On qualifie la matrice P de matrice de passage de l'espace spectral à l'espace physique (puisque son application sur les coefficients spectraux permet d'obtenir les valeurs nodales). Son inverse, P^{-1} , permettant l'opération inverse (l'obtention des coefficients spectraux à partir des valeurs nodales), est qualifiée de matrice de passage de l'espace physique à l'espace spectral.

3 Matrice de passage pour les points de collocation de Gauss-Lobatto

3.1 Formules générales

Les éléments de la matrice de passage P et de son inverse P^{-1} sont tels que :

$$P_{ij} = T_j(x_i) \quad (6)$$

$$P_{ij}^{-1} = T_i(x_j) \frac{w_i}{(T_i, T_i)_N} \quad (7)$$

Où les x_i sont les points de collocation, les w_i sont les poids et $(.,.)_N$ le produit scalaire discret de la quadrature considérée.

Pour un jeu de points de collocation donné, ces quantités sont aisément déterminées, en particulier en tirant parti de la relation :

$$T_k(x) = \cos(k \arccos(x)), x \in [-1, 1] \text{ et } k = 0, 1, \dots$$

pour construire les P_{ij} , et du fait que le terme $T_i(x_j)$, nécessaire pour construire l'élément P_{ij-1} , est simplement P_{ji} .

On peut toutefois déterminer les éléments des matrices de passage plus rapidement (et plus précisément, puisqu'avec un minimum d'opérations numériques intermédiaires) en insérant l'expression des points de collocation dans ces relations, puis en remaniant le tout à l'aide des identités trigonométriques usuelles.

3.2 Expression des éléments des matrices de passage pour les points de collocation de Gauss-Lobatto

Matrice de passage (de l'espace physique à l'espace spectral) P :

$$P_{ij} = (-1)^j \cos\left(\frac{ij\pi}{N}\right) \quad (8)$$

$$\text{On pose } k = [ij]\%[2N] \quad (9)$$

$$\text{pour } k \in [0, N] = P_{ij} = (-1)^{j+1} x_k \quad (10)$$

$$\text{pour } k \in]N, 2N[= P_{ij} = (-1)^j x_{k-N} \quad (11)$$

Les éléments de la matrice sont les points de collocation adéquatement redistribués.

Matrice de passage (de l'espace spectral à l'espace physique) P^{-1} :

$$P_{ij}^{-1} = P_{ji} \frac{2}{N q_i q_j} \quad (12)$$

$$\text{avec } \begin{cases} q_0 = 2 \\ q_n = 1 \\ q_N = 2 \end{cases} \text{ pour } n \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket \quad (13)$$

4 Dérivation numérique via le développement sur les polynômes de Tchebychev

4.1 Dérivée physique et dérivée spectrale

Le polynôme d'interpolation de degré N (construit sur $N+1$ points de collocation x_i de l'intervalle $[-1; 1]$) $f_N(x)$, d'une fonction $f(x)$, a pour développement sur les polynômes de Tchebychev :

$$f_N(x) = \sum_{k=0}^N c_k T_k(x)$$

Où les coefficients spectraux c_k sont complètement déterminés.

Pour évaluer la dérivée de $f(x)$, Il faut calculer celle de $f_N(x)$. Lorsqu'il s'agit d'évaluer cette dérivée aux points de collocation, on peut écrire les relations entre dérivées nodales $y'_i = f'_N(x_i)$ et valeurs nodales $y_i = f_N(x_i)$ sous la forme d'un système linéaire $D'_N y' = y$

De ce point de vue, on qualifie la matrice D'_N de matrice de dérivation dans l'espace physique, puisqu'elle exprime le lien entre les valeurs aux points de collocation et les valeurs des dérivées en ces mêmes points.

On peut adopter un point de vue complémentaire : La dérivée peut, tout comme le polynôme d'interpolation, être considérée du point de vue de son développement sur les polynômes de Tchebychev. Il existe ainsi une relation entre les coefficients spectraux de chacun de ces développements

qui se met sous la forme d'un système linéaire : $D'_{S,N}c' = c$, où c est le vecteur des coefficients spectraux c_k de $f_N(x)$, c' le vecteur des coefficients spectraux c'_k de $f'_N(x)$ et $D'_{S,N}$ la matrice de dérivation dans l'espace spectral.

4.2 Matrice de dérivation spectrale

La dérivée de $f_N(x)$ est égale à celle de son développement. Or les dérivées des polynômes de Tchebychev sont telles que :

$$T'_0(x) = 0 \quad (14)$$

$$T'_1(x) = 1 = T_0(x) \quad (15)$$

$$T'_2(x) = 4x = 4T_1(x) \quad (16)$$

$$\frac{T'_{k+1}(x)}{k+1} = 2T_k(x) + \frac{T'_{k-1}(x)}{k-1} \quad \text{pour } k \geq 2 \quad (17)$$

A l'aide de ces relations, on montre que les éléments de la matrice de dérivation spectrale $D'_{S,N}$ sont :

$$D'_{S,N}{}_{ij} = \begin{cases} j & \text{si } i = 0 \text{ et } j = 1, 3, 5, \dots \\ 2j & \text{si } i \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket \text{ et } j = i+1, i+3, \dots \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

En d'autres termes, la matrice $D'_{S,N}$ est triangulaire supérieure, à diagonale nulle, et bien creuse (la moitié des éléments de la partie triangulaire sont nuls).

4.3 Liens entre matrices de dérivation physique et spectrale

En partant des relations (via les matrices de passage P et son inverse P^{-1}) entre valeurs nodales et coefficients spectraux : $Pc = y$ et $P^{-1}y = c$, qui par ailleurs lient également valeurs nodales et coefficients spectraux de la dérivée : $Pc' = y'$ et $P^{-1}y' = c'$, et en tenant compte des relations de dérivation : $D'_N y' = y$ et $D'_{S,N} c' = c$, on montre que :

$$D'_N = PD'_{S,N}P^{-1}$$

Relation particulièrement utile puisqu'elle permet de construire la matrice de dérivation physique D'_N à partir des matrices de passage P et P^{-1} , et de la matrice de dérivation spectrale $D'_{S,N}$.

Il existe d'autre part des procédures pour construire cette matrice de dérivation plus directement.

4.4 Dérivées d'ordres supérieurs

En suivant des raisonnements similaires à ceux donnés ci-dessus, on montre que les matrices de dérivation (aussi bien spectrale que physique) d'ordre n sont simplement égales au produit de la matrice de dérivation première par elle-même. En clair, $D''_{S,N} = D'_{S,N}D'_{S,N}$, $D''_N = D'_N D'_N$, $D'''_{S,N} = D'_{S,N}D''_{S,N}$, $D'''_N = D'_N D''_N \dots$

5 Matrice de dérivation aux points de Gauss-Lobatto

5.1 Contexte

En développant les produits ci-dessus, et en remaniant le tout à l'aide de relations trigonométriques, on montre que les éléments des matrices D'_N peuvent être construit en bien moins d'opérations, et de plus, uniquement à partir des abscisses du jeu de points de collocation considéré.

5.2 Expressions des matrices de dérivation première dans l'espace physique sur les points de collocation de Gauss-Lobatto

Pour le jeu de points de collocation de Gauss-Lobatto :

$$x_i = -\cos\left(\frac{i\pi}{N}\right) \text{ pour } i \in \llbracket 0, N \rrbracket$$

Les éléments de la matrice de dérivation première D'_N sont :

$$D'_N{}_{ij} = \begin{cases} \frac{-(2N^2 + 1)}{6} & \text{pour } i = j = 0 \\ \frac{-x_i}{2(1 - x_i^2)} & \text{pour } i, j \in \llbracket 1, N - 1 \rrbracket \\ \frac{2N^2 + 1}{6} & \text{pour } i = j = N \\ (-1)^{i+j} \frac{q_i}{q_j} \frac{1}{x_i - x_j} & \text{pour } i \neq j \end{cases}$$

avec

$$q_k = \begin{cases} 2 & \text{pour } k = 0 \\ 1 & \text{pour } k \in \llbracket 1, N - 1 \rrbracket \\ 2 & \text{pour } k = N \end{cases}$$

5.3 Dérivées d'ordre supérieur

Les matrices de dérivation d'ordre k , $D_N^{(k)}$, s'obtiennent simplement en tant que produits (k fois) de la matrice de dérivation première D'_N du jeu de points de collocation considéré.

6 Bibliographie

Pour compléter ce cours, voici une petite bibliographies des livres intéressants sur ce sujet, mais aussi d'un point de vue de l'analyse numérique et de la programmation en Fortran de façon général.

En ce qui concerne les méthodes pseudospectrales, vous pouvez consulter [2], pour ce qui touche plus généralement à l'analyse nuémrique, vous pouvez vous reporter à [1] où vous trouverez des codes MATLAB implémentant les solutions proposées ainsi que des exercices. Vous trouverez aussi un grand nombre d'informations dans [4] et [5], le premier reprenant la théorie ainsi que les méthodes directes, et le second s'étendant plus sur les méthodes itératives.

Finalement pour un livre complet sur le Fortran 90, vous pourrez consulter [3].

Références

- [1] Riccardo Sacco Alfio Quarteroni and Fausto Saleri. *Méthodes numériques pour le calcul scientifique*. Springer, 2000.
- [2] John P. Boyd. *Chebyshev and Fourier spectral method*. Dover Publications, 2001.
- [3] Claude Delannoy. *Programmer en Fortran 90. Guide complet*. Eyrolles, 2002.
- [4] Patrick Lascaux and Raymond Théodor. *Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur : Méthodes directes*. Dunod, 2004.
- [5] Patrick Lascaux and Raymond Théodor. *Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur : Méthodes itératives*. Dunod, 2004.