Discrétisation temporelle, Méthodes de splitting

S. Descombes [2] **T. Dumont** [1]
V. Louvet [1] **M. Massot** [3]

[1] Institut Camille Jordan - Université Claude Bernard Lyon 1
[2] Laboratoire J.A. Dieudonné, Université de Nice-Sophia Antipolis
[3] Laboratoire EM2C - Ecole Centrale Paris

Ecole d'automne d'informatique scientifique

Plan

Plan

Motivation, les systèmes de réaction-diffusion

d, m étant deux entiers naturels, on étudie un système sous forme général :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - \Delta u + F(u) = 0, & x \in \mathbb{R}^d,\ t > 0, \\ u(0, x) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}^d, \end{cases} \tag{1}$$

u étant un vecteur de $\mathbb{R}^m$.
On désire résoudre numériquement ce système, on se place sur un domaine borné en on utilise un discrétisation en espace.

Motivation, les systèmes de réaction-diffusion

On passe donc d'un système posé dans tout l'espace et continu en espace :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + F(u), & x \in \mathbb{R}^d,\ t > 0, \\ u(0,x) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}^d, \end{cases} \tag{2}$$

à une équation différentielle ordinaire (A est la matrice du Laplacien discrétisé) :

$$\begin{cases} \mathrm{U}'(\mathrm{t}) = \mathrm{A}\mathrm{U}(\mathrm{t}) + \mathrm{F}_{\mathrm{disc}}(\mathrm{U}(\mathrm{t})), \mathrm{t} > 0, \\ \mathrm{U}(0) = \mathrm{U}_0. \end{cases} \tag{3}$$

On se retrouve dans un contexte équation différentielle ordinaire.

Plan

Panorama

- Méthode des lignes : on utilise un solveur d'équations différentielles ordinaires.
  - Même si F_{disc} n'est pas raide, la raideur liée au Laplacien discret "interdit" une méthode explicite avec des pas de temps raisonnables. Pire si F_{disc} est raide...
  - La taille du système est telle qu'une méthode implicite qui demande des itérations de Newton est aussi "interdite". Penser à l'exemple en 3D avec une trentaine d'inconnues en chaque point du maillage.
- Schémas multipas implicite/explicite, le Laplacien discret est traité en implicite, le reste en explicite...
- Méthodes de splitting ou décomposition d'opérateur.

Panorama

- Méthode des lignes : on utilise un solveur d'équations différentielles ordinaires.
  - Même si F_{disc} n'est pas raide, la raideur liée au Laplacien discret "interdit" une méthode explicite avec des pas de temps raisonnables. Pire si F_{disc} est raide...
  - La taille du système est telle qu'une méthode implicite qui demande des itérations de Newton est aussi "interdite". Penser à l'exemple en 3D avec une trentaine d'inconnues en chaque point du maillage.
- Schémas multipas implicite/explicite, le Laplacien discret est traité en implicite, le reste en explicite...
- Méthodes de splitting ou décomposition d'opérateur.

Panorama

- Méthode des lignes : on utilise un solveur d'équations différentielles ordinaires.
  - Même si F_{disc} n'est pas raide, la raideur liée au Laplacien discret "interdit" une méthode explicite avec des pas de temps raisonnables. Pire si F_{disc} est raide...
  - La taille du système est telle qu'une méthode implicite qui demande des itérations de Newton est aussi "interdite". Penser à l'exemple en 3D avec une trentaine d'inconnues en chaque point du maillage.
- Schémas multipas implicite/explicite, le Laplacien discret est traité en implicite, le reste en explicite...
- Méthodes de splitting ou décomposition d'opérateur.

Panorama

- Méthode des lignes : on utilise un solveur d'équations différentielles ordinaires.
  - Même si F_{disc} n'est pas raide, la raideur liée au Laplacien discret "interdit" une méthode explicite avec des pas de temps raisonnables. Pire si F_{disc} est raide...
  - La taille du système est telle qu'une méthode implicite qui demande des itérations de Newton est aussi "interdite". Penser à l'exemple en 3D avec une trentaine d'inconnues en chaque point du maillage.
- Schémas multipas implicite/explicite, le Laplacien discret est traité en implicite, le reste en explicite...
- Méthodes de splitting ou décomposition d'opérateur.

Plan

Schémas multipas

On reprend notre équation différentielle ordinaire

$$y' = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0.$$

Partant de l'idée que

$$y(t_n + h) = y(t_n) + h \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(s, y(s)) ds,$$

on va remplacer la fonction à intégrer par un polynôme de degré $k - 1$ qui satisfait

$$p(t_j) = f(t_j, y_j), \quad j = n, n-1, \cdots, n-k+1.$$

Cette procédure est licite car les valeurs de la solution approchée y_j sont connues.

Schémas multipas

On obtient ainsi les méthodes d'Adams explicites :

- $k = 1$,
  $$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n),$$
  on retrouve le schéma d'Euler explicite,
- $k = 2$,
  $$y_{n+1} = y_n + \frac{3}{2}hf(t_n, y_n) - \frac{h}{2}f(t_{n-1}, y_{n-1}).$$

Légère difficulté : Il faut calculer y_1 par une autre méthode (plus généralement, il faut calculer y_1, y_2,...).
On peut aussi utiliser la valeur en t_{n+1} qui est une inconnue.

Schémas multipas

On obtient ainsi les méthodes d'Adams explicites :

- $k = 1$,
$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n),$$
on retrouve le schéma d'Euler explicite,
- $k = 2$,
$$y_{n+1} = y_n + \frac{3}{2}hf(t_n, y_n) - \frac{h}{2}f(t_{n-1}, y_{n-1}).$$

Légère difficulté : Il faut calculer y_1 par une autre méthode (plus généralement, il faut calculer y_1, y_2,...).
On peut aussi utiliser la valeur en t_{n+1} qui est une inconnue.

Schémas multipas

On obtient ainsi les méthodes d'Adams implicites :

- $k = 1$,
$$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1}),$$
on retrouve le schéma d'Euler implicite,
- $k = 2$,
$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} f(t_n, y_n) + \frac{h}{2} f(t_{n+1}, y_{n+1}).$$

Pour calculer y_{n+1}, on utilise une méthode de prédiction-correction.
A part ces deux méthodes, les méthodes d'Adams ont un petit domaine de stabilité, elles sont donc rarement utilisées.

Schémas multipas

On obtient ainsi les méthodes d'Adams implicites :

- $k = 1$,
$$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1}),$$
on retrouve le schéma d'Euler implicite,
- $k = 2$,
$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} f(t_n, y_n) + \frac{h}{2} f(t_{n+1}, y_{n+1}).$$

Pour calculer y_{n+1}, on utllise une méthode de prédiction-correction.
A part ces deux méthodes, les méthodes d'Adams ont un petit domaine de stabilité, elles sont donc rarement utilisées.

Schémas multipas, BDF

On se tourne vers les méthodes de différentiation rétrograde (BDF en anglais).
On cherche un polynôme de degré k noté q satisfaisant

$$q(t_j) = y_j, \quad j = n+1, n, \cdots, n-k+1$$

et on détermine y_{n+1} de façon que

$$q'(t_{n+1}) = f(t_{n+1}, q(t_{n+1})) = f(t_{n+1}, y_{n+1}).$$

- $k = 1$,
$$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1}),$$
on retrouve le schéma d'Euler implicite,
- $k = 2$,
$$\frac{3}{2}y_{n+1} - 2y_n + \frac{1}{2}y_{n-1} = hf(t_{n+1}, y_{n+1}).$$

Schémas multipas, BDF

On se tourne vers les méthodes de différentiation rétrograde (BDF en anglais).
On cherche un polynôme de degré k noté q satisfaisant

$$q(t_j) = y_j, \quad j = n+1, n, \cdots, n-k+1$$

et on détermine y_{n+1} de façon que

$$q'(t_{n+1}) = f(t_{n+1}, q(t_{n+1})) = f(t_{n+1}, y_{n+1}).$$

- $k = 1$,
  $$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1}),$$
  on retrouve le schéma d'Euler implicite,
- $k = 2$,
  $$\frac{3}{2}y_{n+1} - 2y_n + \frac{1}{2}y_{n-1} = hf(t_{n+1}, y_{n+1}).$$

Schémas multipas, BDF

On se tourne vers les méthodes de différentiation rétrograde (BDF en anglais).
On cherche un polynôme de degré k noté q satisfaisant

$$q(t_j) = y_j, \quad j = n+1, n, \cdots, n-k+1$$

et on détermine y_{n+1} de façon que

$$q'(t_{n+1}) = f(t_{n+1}, q(t_{n+1})) = f(t_{n+1}, y_{n+1}).$$

- $k = 1$,
  $$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1}),$$
  on retrouve le schéma d'Euler implicite,
- $k = 2$,
  $$\frac{3}{2}y_{n+1} - 2y_n + \frac{1}{2}y_{n-1} = hf(t_{n+1}, y_{n+1}).$$

Schémas multipas, BDF

- Ordre des méthodes : $p = k$.
- Méthodes A-stables pour $k = 1, 2$.
- Jusqu'à l'ordre 6, une bande centrée autour de l'axe réel négatif est contenue dans le domaine de stabilité.

Schémas multipas, BDF

- Ordre des méthodes : $p = k$.
- Méthodes A-stables pour $k = 1, 2$.
- Jusqu'à l'ordre 6, une bande centrée autour de l'axe réel négatif est contenue dans le domaine de stabilité.

Schémas multipas, BDF

- Ordre des méthodes : $p = k$.
- Méthodes A-stables pour $k = 1, 2$.
- Jusqu'à l'ordre 6, une bande centrée autour de l'axe réel négatif est contenue dans le domaine de stabilité.

Schémas multipas, BDF

On revient à notre problème, pour $F_{disc} = 0$, on considère le schéma

$$\frac{3}{2}U_{n+1} - 2U_n + \frac{1}{2}U_{n-1} = hAU_{n+1}.$$

Pour $F_{disc} \neq 0$, on peut construire une méthode d'ordre 2 donnée par :

$$\frac{3}{2}U_{n+1} - 2U_n + \frac{1}{2}U_{n-1} = hAU_{n+1} + 2hF_{disc}(U_n) - hF_{disc}(U_{n-1})$$

Sur des exemples où le terme non linéaire est très raide, assurer la stabilité sur la partie linéaire ne suffit pas à stabiliser le schéma !

Schémas multipas, BDF

On revient à notre problème, pour $F_{disc} = 0$, on considère le schéma
$$\frac{3}{2}U_{n+1} - 2U_n + \frac{1}{2}U_{n-1} = hAU_{n+1}.$$
Pour $F_{disc} \neq 0$, on peut construire une méthode d'ordre 2 donnée par :

$$\frac{3}{2}U_{n+1} - 2U_n + \frac{1}{2}U_{n-1} = hAU_{n+1} + 2hF_{disc}(U_n) - hF_{disc}(U_{n-1})$$

Sur des exemples où le terme non linéaire est très raide, assurer la stabilité sur la partie linéaire ne suffit pas à stabiliser le schéma !

Schémas multipas, BDF

On revient à notre problème, pour $F_{disc} = 0$, on considère le schéma

$$\frac{3}{2}U_{n+1} - 2U_n + \frac{1}{2}U_{n-1} = hAU_{n+1}.$$

Pour $F_{disc} \neq 0$, on peut construire une méthode d'ordre 2 donnée par :

$$\frac{3}{2}U_{n+1} - 2U_n + \frac{1}{2}U_{n-1} = hAU_{n+1} + 2hF_{disc}(U_n) - hF_{disc}(U_{n-1})$$

Sur des exemples où le terme non linéaire est très raide, assurer la stabilité sur la partie linéaire ne suffit pas à stabiliser le schéma !

Plan

Splitting, introduction

On revient à notre problème continue en espace, notons $X^t v_0$ la solution de

$$\begin{cases} \dfrac{\partial v}{\partial t} = \Delta v, \\ v(0) = v_0. \end{cases}$$

et $Y^t w_0$ la solution de l'équation différentielle ordinaire paramétrée par x

$$\begin{cases} \dfrac{dw}{dt} = F(w), \\ w(0) = w_0. \end{cases}$$

Deux problèmes que l'on sait traiter par des solveurs dédiés

Splitting, introduction

On va utiliser des méthodes numériques qui vont à un moment donné résoudre uniquement l'un des deux problèmes.

Diviser pour mieux régner (Dr Thierry Dumont)

Splitting, introduction

On va utiliser des méthodes numériques qui vont à un moment donné résoudre uniquement l'un des deux problèmes.

Diviser pour mieux régner (Dr Thierry Dumont)

Formules de Lie

La formule de Lie est définie par

$$L^t u_0 = X^t Y^t u_0,$$

ou par

$$L^t u_0 = Y^t X^t u_0,$$

et correspond à une composition des flots précédents. Si on note $T^t u_0$ la solution à l'instant t, on a

$$L^t u_0 - T^t u_0 = O(t^2).$$

Méthodes d'ordre 1...

Formules de Lie

La formule de Lie est définie par

$$L^t u_0 = X^t Y^t u_0,$$

ou par

$$L^t u_0 = Y^t X^t u_0,$$

et correspond à une composition des flots précédents. Si on note $T^t\, u_0$ la solution à l'instant t, on a

$$L^t\, u_0 - T^t\, u_0 = O(t^2).$$

Méthodes d'ordre 1...

Formules de Strang

Une approximation d'ordre deux est donnée par la formule de Strang définie par

$$S^t u_0 = X^{t/2} Y^t X^{t/2} u_0,$$

ou par

$$S^t u_0 = Y^{t/2} X^t Y^{t/2} u_0,$$

qui gagne en ordre grâce à une meilleure symétrie que celle de la formule de Lie.

Formules de Lie/Strang - Etude sur un cas simple

Etudier l'ordre de ces méthodes dans des cas très simples, comme celui où on considère que les deux opérateurs sont simplement des matrices, revient à faire un développement en série. En notant $[A, B] = AB - BA$, le commutateur de A et B, nous avons les formules suivantes pour t petit

$$e^{t(A+B)} - e^{tA}e^{tB} = \frac{t^2}{2}[B, A] + O(t^3) \tag{4}$$

et

$$e^{t(A+B)} - e^{tA/2}e^{tB}e^{tA/2} = \frac{t^3}{24}([A, [A, B]] - 2[B, [A, B]]) + O(t^4) \tag{5}$$

Formules de Lie/Strang - Mise en œuvre

D'un point de vue algorithmique :

- Choix du solveur pour la partie diffusive en préservant l'ordre,
- Choix du solveur pour la partie réactive en préservant l'ordre pour chaque noeud du maillage et avec des pas de temps eventuellement différents,
- Astuce : Strang presque au même prix que Lie !

Formules de Lie/Strang - Mise en œuvre

D'un point de vue algorithmique :

- Choix du solveur pour la partie diffusive en préservant l'ordre,
- Choix du solveur pour la partie réactive en préservant l'ordre pour chaque noeud du maillage et avec des pas de temps eventuellement différents,
- Astuce : Strang presque au même prix que Lie !

Formules de Lie/Strang - Mise en œuvre

D'un point de vue algorithmique :

- Choix du solveur pour la partie diffusive en préservant l'ordre,
- Choix du solveur pour la partie réactive en préservant l'ordre pour chaque noeud du maillage et avec des pas de temps eventuellement différents,
- Astuce : Strang presque au même prix que Lie !

Retour au cas matriciel

Nous allons maintenant faire un estimation d'erreur précise, on a le résultat suivant

$$L^t = e^{t(A+B)} + \int_0^t \int_0^s e^{(t-s)(A+B)} e^{(s-r)A}[A, B] e^{rA} e^{sB} \, dr \, ds. \tag{6}$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(AA^*)}.$$

A, B, définie négatives,

$$\left\| e^{t(A+B)} u_0 - L^t u_0 \right\|_2 \leq \frac{t^2}{2} \|[A, B] u_0\|_2 . \tag{7}$$

Retour au cas matriciel

Nous allons maintenant faire un estimation d'erreur précise, on a le résultat suivant

$$L^t = e^{t(A+B)} + \int_0^t \int_0^s e^{(t-s)(A+B)} e^{(s-r)A} [A, B] e^{rA} e^{sB} \, dr \, ds. \tag{6}$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(AA^*)}.$$

A, B, définie négatives,

$$\left\| e^{t(A+B)} u_0 - L^t u_0 \right\|_2 \leq \frac{t^2}{2} \left\| [A, B] u_0 \right\|_2 . \tag{7}$$

Retour au cas matriciel

Nous allons maintenant faire un estimation d'erreur précise, on a le résultat suivant

$$L^t = e^{t(A+B)} + \int_0^t \int_0^s e^{(t-s)(A+B)} e^{(s-r)A} [A, B] e^{rA} e^{sB} \, dr \, ds. \tag{6}$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(AA^*)}.$$

A, B, définie négatives,

$$\left\| e^{t(A+B)} u_0 - L^t u_0 \right\|_2 \leq \frac{t^2}{2} \, \|[A, B] u_0\|_2 \, . \tag{7}$$

Effet régularisant...

Cas du commutateur dominé par la racine carrée de l'opposé d'une des deux matrices :

Il existe une constante explicite $\theta > 0$ telle que pour $t \leq \theta$, l'erreur de la méthode de Lie se comporte comme t^2 et pour $t \geq \theta$, comme $t\sqrt{t}$.

Il est donc important d'avoir une idée de l'asymptotique dans lequel on se trouve...

Effet régularisant...

Cas du commutateur dominé par la racine carrée de l'opposé d'une des deux matrices :

Il existe une constante explicite $\theta > 0$ telle que pour $t \leq \theta$, l'erreur de la méthode de Lie se comporte comme t^2 et pour $t \geq \theta$, comme $t\sqrt{t}$.

Il est donc important d'avoir une idée de l'asymptotique dans lequel on se trouve...

Effet régularisant...

Cas du commutateur dominé par la racine carrée de l'opposé d'une des deux matrices :

Il existe une constante explicite $\theta > 0$ telle que pour $t \leq \theta$, l'erreur de la méthode de Lie se comporte comme t^2 et pour $t \geq \theta$, comme $t\sqrt{t}$.

Il est donc important d'avoir une idée de l'asymptotique dans lequel on se trouve...

Perturbation singulière

Considérons le système suivant

$$\begin{cases} \partial_t u^\varepsilon - \Delta u^\varepsilon = f(u^\varepsilon, v^\varepsilon), & x \in \mathbb{R}^d,\ t > 0, \\ \partial_t v^\varepsilon - \Delta v^\varepsilon = \dfrac{g(u^\varepsilon, v^\varepsilon)}{\varepsilon}, & x \in \mathbb{R}^d,\ t > 0, \\ u^\varepsilon(0,x) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}^d, \\ v^\varepsilon(0,x) = v_0(x), & x \in \mathbb{R}^d, \end{cases}$$

en supposant toute la régularité voulue et en supposant que ε est petit. Ce système par la présence du petit paramètre est raide. La présence de ce petit paramètre «force» la quantité $g(u^\varepsilon, v^\varepsilon)$ à être petite.

Quelle est l'influence sur l'erreur commise ?

Perturbation singulière - Cas ultra simplifié

Nous considérons le cas d'une équation différentielle ordinaire très simple dans $\mathbb{R}^3$. Soient A et P les deux matrices suivantes

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad et \;\; P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Nous considérons le système suivant

$$\begin{cases} \dot{U}_\varepsilon = AU_\varepsilon - \dfrac{P}{\varepsilon} U_\varepsilon, \\ U_\varepsilon(0) = U_0, \end{cases} \tag{8}$$

de solution exacte

$$U_\varepsilon(t) = e^{t(A-P/\varepsilon)} U_0.$$

Il est important de noter que pour ε petit, U_ε est astreint à rester très proche du noyau de P.

Perturbation singulière

Les formules de Lie et Strang sont, dans ce cas, données par

$$L_{1\varepsilon}(t) = e^{tA}e^{-tP/\varepsilon}U_0, \; L_{2\varepsilon}(t) = e^{-tP/\varepsilon}e^{tA}U_0,$$
$$S_{1\varepsilon}(t) = e^{tA/2}e^{-tP/\varepsilon}e^{tA/2}U_0, \; S_{2\varepsilon}(t) = e^{-tP/2\varepsilon}e^{tA}e^{-tP/2\varepsilon}U_0.$$

Introduisons alors la matrice Q définie par $P + Q = Id$.

Theorem

Soit $t > 0$. Pour ε suffisamment petit tel que $\varepsilon << t$, nous avons les estimations suivantes

$$U_\varepsilon(t) - L_{1\varepsilon}(t) = -\,tPAQU_0 + O(e^{-t/\varepsilon})$$
$$U_\varepsilon(t) - L_{2\varepsilon}(t) = -\,tQAPU_0 + O(e^{-t/\varepsilon})$$
$$U_\varepsilon(t) - S_{1\varepsilon}(t) = t(2QAQ - QA - AQ)U_0/2 + O(e^{-t/\varepsilon})$$
$$U_\varepsilon(t) - S_{2\varepsilon}(t) = -\,t^2QAPAQU_0/2 + O(e^{-t/\varepsilon})$$

Perturbation singulière

Nous avons par définition

$$e^{-tP/2\varepsilon} = \begin{pmatrix} e^{-t/2\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & e^{-t/2\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

ainsi

$$e^{-tP/2\varepsilon} = e^{-t/2\varepsilon}P + Q,$$

d'où nous déduisons que

$$S_{2\varepsilon}(t) = Qe^{tA}QU_0 + O(e^{-t/2\varepsilon}). \tag{9}$$

Pour le système (8) puisque nous avons la décomposition

$$A - P/\varepsilon = \begin{pmatrix} 1-1/\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 1-1/\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = C + D,$$

avec $[C, D] = 0$,

Perturbation singulière

nous en déduisons que

$$e^{t(A-P/\varepsilon)} = e^{tD}e^{tC}.$$

Finalement

$$U_\varepsilon(t) = e^t e^{tD} Q U_0 + O(e^{-t/\varepsilon}),$$

et comme $e^t e^{tD} Q U_0 = e^{tQAQ} Q U_0$, nous avons

$$U_\varepsilon(t) = e^{tQAQ} Q U_0 + O(e^{-t/\varepsilon}). \tag{10}$$

Grâce à (9) et (10), nous obtenons

$$\begin{aligned} U_\varepsilon(t) - S_{2\varepsilon}(t) &= e^{tQAQ} Q U_0 - Q e^{tA} Q U_0 + O(e^{-t/\varepsilon}) \\ &= U_0 - U_0 + t(QAQ - QAQ) Q U_0 \\ &\quad + \frac{t^2}{2}(QAQAQU_0 - QA^2Q) Q U_0 + O(e^{-t/\varepsilon}). \end{aligned}$$

Perturbation singulière

et cela nous donne

$$U_\varepsilon(t) - S_{2\varepsilon}(t) = -\frac{t^2}{2} QAPAQU_0 + O(e^{-t/\varepsilon})$$

qui correspond bien au résultat recherché.