

INTRODUCTION AUX MÉTHODES SPECTRALES

Jérôme Novak

Jerome.Novak@obspm.fr

Laboratoire Univers Théories (LUTH)
CNRS / Observatoire de Paris, France

en collaboration avec

Éric Gourgoulhon & Philippe Grandclément

10 décembre 2007

Introduction aux méthodes spectrales

Jérôme Novak

Principes de base

Opérateurs différentiels

Exemple : Équation d'advection

Champs 3D

Équation de Poisson

Relativité numérique

- 1 PRINCIPES DE BASE : EXEMPLE AVEC LES POLYNÔMES DE TCHEBYCHEV
- 2 OPÉRATEURS DIFFÉRENTIELS
- 3 EXEMPLE : ÉQUATION D'ADVECTION
- 4 CHAMPS 3D
- 5 ÉQUATION DE POISSON
- 6 RELATIVITÉ NUMÉRIQUE

Introduction aux
méthodes
spectrales

Jérôme Novak

Principes de base

Opérateurs
différentiels

Exemple :
Équation
d'advection

Champs 3D

Équation de
Poisson

Relativité
numérique

1

Principes de base

Introduction aux
méthodes
spectrales

Jérôme Novak

Principes de base

Opérateurs
différentiels

Exemple :
Équation
d'advection

Champs 3D

Équation de
Poisson

Relativité
numérique

Comment représenter une fonction sur un ordinateur ?

- ⇒ à l'aide de ses valeurs en un nombre fini de points de l'intervalle,
- ⇒ à l'aide d'un nombre fini de fonctions prédéfinies.

Comment manipuler une fonction sur un ordinateur ?

Évaluation, opérations algébriques, calculs de dérivées, ...

- ⇒ en utilisant ses valeurs connues : schémas *aux différences finies*
- ⇒ en utilisant les propriétés des fonctions utilisées : relations entre les coefficients

QUELLES FONCTIONS “PRÉDÉFINIES” ?

Introduction aux
méthodes
spectrales

Jérôme Novak

Principes de base

Opérateurs
différentiels

Exemple :
Équation
d'advection

Champs 3D

Équation de
Poisson

Relativité
numérique

- Fonctions relativement simples,
- Algorithmes rapides de calcul des coefficients

⇒ fonctions trigonométriques (séries de Fourier) : on utilise le *spectre* d'une fonction périodique,
 ⇒ polynômes orthogonaux (Tchebychev, Legendre, Hermitte,...)
 dans le cas de fonctions non-périodiques : le degré des polynômes généralise la fréquence.

Dans le cas des polynômes orthogonaux, les coefficients s'obtiennent à partir d'intégrales ⇒ calculs par quadrature de Gauss (Lobatto / Radau / ...)
 ⇒ Utilisation de *Fast Fourier Transform (FFT)* dans certains cas.

Les polynômes de Tchebychev sont tels que : $T_n(\cos \theta) = \cos(n\theta)$, polynôme de degré n :

$$T_0(x) = 1, T_1(x) = x, T_2(x) = 2x^2 - 1, T_3(x) = 4x^3 - 3x, \dots$$

On approxime $f : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ par

$$f(x) \simeq \sum_{i=0}^N u_i T_i(x)$$

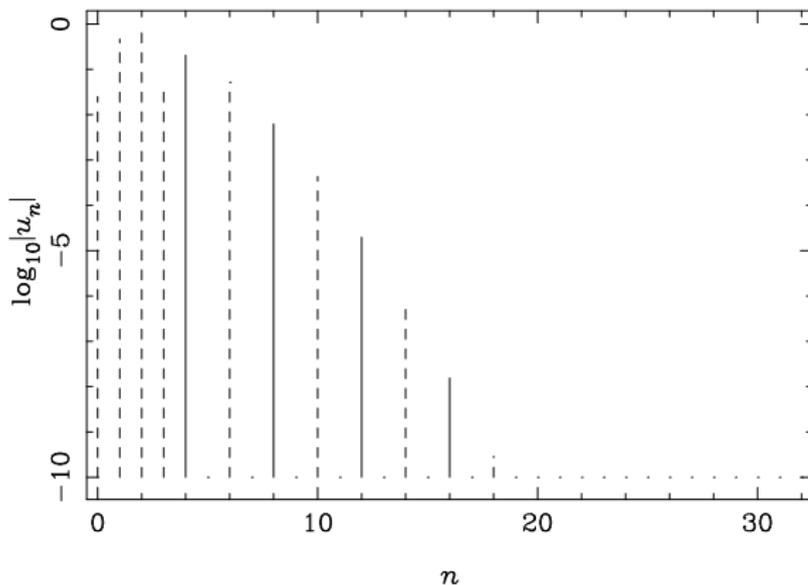
En connaissant $f(x_i)_{i=0\dots N}$ (avec $x_i = -\cos(i\pi/N)$), on peut calculer les $(u_i)_{i=0\dots N}$ par une FFT.

Remarque : les $(x_i)_{i=0\dots N}$ sont les racines de T_N et "s'accumulent" près des bords de l'intervalle.

EXEMPLE DE DÉCOMPOSITION

$$f(x) = \cos^3\left(\frac{\pi}{2}x\right) - \frac{1}{8}(x+1)^3$$

Chebyshev coefficients



EXEMPLE DE DÉCOMPOSITION INTERPOLATION

Introduction aux méthodes spectrales

Jérôme Novak

Principes de base

Opérateurs différentiels

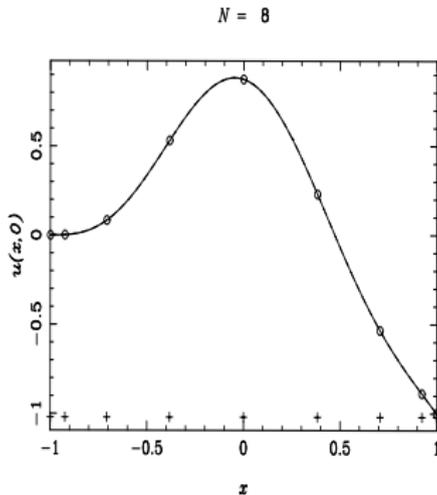
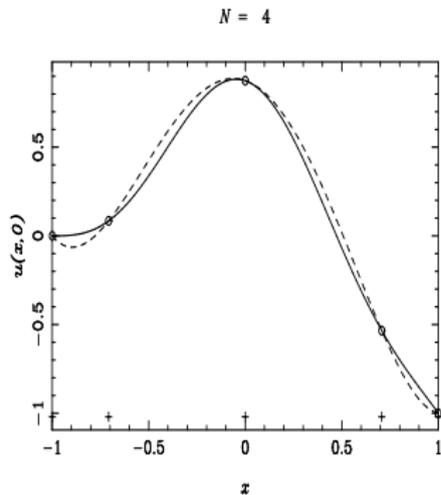
Exemple : Équation d'advection

Champs 3D

Équation de Poisson

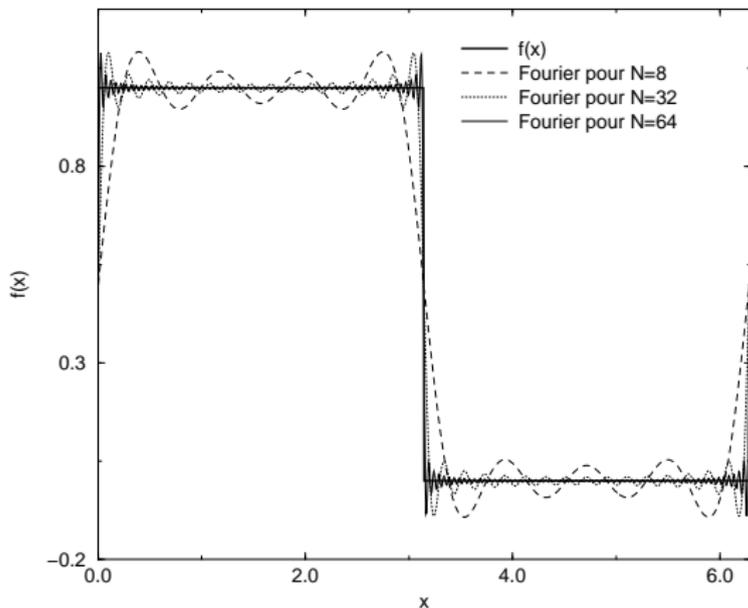
Relativité numérique

$$f(x) = \cos^3\left(\frac{\pi}{2}x\right) - \frac{1}{8}(x+1)^3$$



L'erreur décroît comme e^{-N} !!

Il n'y a pas convergence de la série pour une fonction discontinue.
 Pour une fonction C^p , l'erreur décroît comme $1/N^{p+1}$.



Introduction aux
méthodes
spectrales

Jérôme Novak

Principes de base

Opérateurs
différentiels

Exemple :
Équation
d'advection

Champs 3D

Équation de
Poisson

Relativité
numérique

2

Opérateurs “différentiels”

COMMENT CALCULER UNE DÉRIVÉE ?

En utilisant des relations de récurrence sur les polynômes de Tchebychev :

$$\forall n > 1, \quad \frac{dT_{n+1}(x)}{dx} = 2(n+1)T_n(x) + \frac{n+1}{n-1} \frac{dT_{n-1}(x)}{dx}$$

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \quad T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$

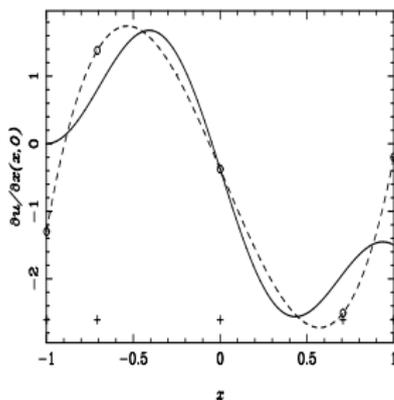
Qui peut se traduire par une formule de récurrence sur les coefficients de la décomposition spectrale de la fonction :

$$u'_n = 2(n+1)u_{n+1} + u'_{n+2} \quad n \leq N-2,$$

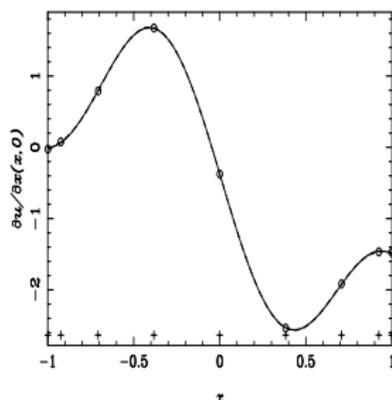
en commençant avec $u'_N = 0$ et $u'_{N-1} = 2Nu_N$.

$$f(x) = \cos^3\left(\frac{\pi}{2}x\right) - \frac{1}{8}(x+1)^3$$

$N = 4$



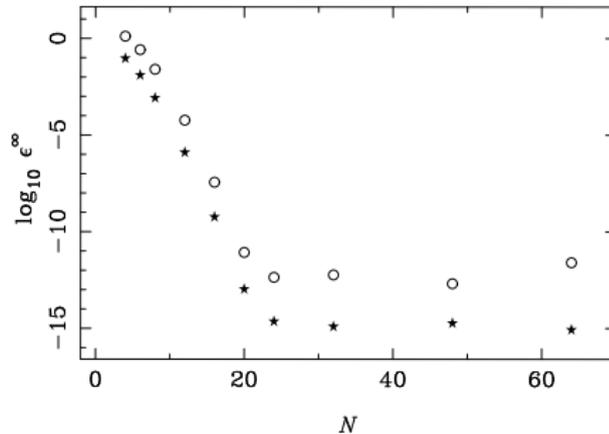
$N = 8$



Approximation de la dérivée $f'(x)$.

ERREUR COMMISE...

$$f(x) = \cos^3\left(\frac{\pi}{2}x\right) - \frac{1}{8}(x+1)^3$$



Pour comparaison : plus de 10^5 points nécessaires avec un schéma d'ordre 3 en différences finies...

Une fonction f est représentée par un vecteur de $N + 1$ coefficients.

$\frac{\partial}{\partial x}$ ou $\frac{1}{x} \iff$ multiplication matricielle

$$\frac{\partial}{\partial x} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 3 & 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 8 & 0 & 12 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 12 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} .$$

Inversion de ces "opérateurs" \iff inversion de matrices de taille ~ 30 .

$$\frac{\partial}{\partial x} f_N = g_N, \quad f_N(1) = x_0$$

$$\frac{\partial^*}{\partial x} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 3 & 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 8 & 0 & 12 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 12 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Solution *particulière* + $\lambda \times$ solution *homogène*

\Rightarrow résolution des équations différentielles "linéaires"

Introduction aux
méthodes
spectrales

Jérôme Novak

Principes de base

Opérateurs
différentiels

Exemple :
Équation
d'advection

Champs 3D

Équation de
Poisson

Relativité
numérique

3

EDP hyperboliques : exemple de l'équation d'advection

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad x \in [-1, 1];$$

$$u(x, t = 0) = f(x) \text{ et } u(-1, t) = 0.$$

Utilisation de schémas aux différences finies pour le temps : par exemple un schéma d'Euler progressif (explicite) :

$$\frac{u^{J+1} - u^J}{\delta t} + \frac{\partial u^J}{\partial x} = 0 \Rightarrow u^{J+1} = u^J + \delta t \frac{\partial u^J}{\partial x}$$

⇒ limitation par la condition de Courant (CFL) : en un pas de temps, le signal ne doit pas se déplacer de plus que la distance minimale entre deux points de grille.

Dans notre cas, les points de grille $(x_i)_{i=0 \dots N} = -\cos(n\pi/N)$ sont très proches les uns des autres aux bords : la distance minimale décroît comme $1/N^2$...

Par exemple Crank-Nicolson :

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|^{J+1/2} = \frac{u^{J+1} - u^J}{\delta t} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u^{J+1}}{\partial x} + \frac{\partial u^J}{\partial x} \right)$$

On doit résoudre, à chaque pas de temps :

$$\left[1 + \frac{\delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x} \right] u^{J+1} = u^J - \frac{\delta t}{2} \frac{\partial u^J}{\partial x}.$$

Trois méthodes :

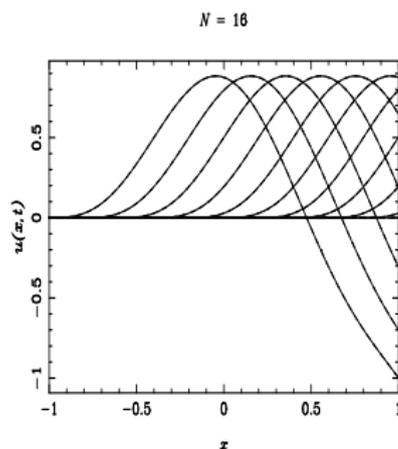
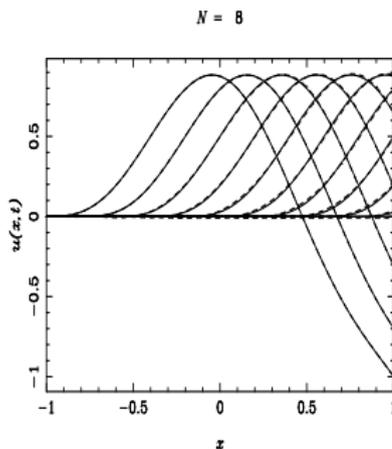
- Méthode de Galerkin : chaque élément de la base spectrale vérifie les conditions au bord,
- Méthode tau (ou de Lanczos) : on remplace une partie du système linéaire par les conditions aux bords,
- Méthodes de la pénalité : on ajoute à une partie du système linéaire les conditions au bord pondérées par un facteur dépendant du nombre de polynômes utilisés.

Concrètement, dans notre exemple (eq. d'advection) :

la méthode de Galerkin revient à utiliser la base $T_n(x) + T_{n+1}(x)$
la méthode tau revient à restreindre l'espace spectral à N dimensions
(au lieu de $N + 1$) et à chercher une solution "homogène" en
utilisant le $N + 1^{\text{ème}}$ coefficient.

RÉSULTAT :

AVEC UN SCHEMA IMPLICITE D'ORDRE 2



L'erreur est dominée par la discrétisation temporelle (schéma aux différences finies d'ordre 2), mais gain en mémoire considérable, surtout à 3D...

Introduction aux
méthodes
spectrales

Jérôme Novak

Principes de base

Opérateurs
différentiels

Exemple :
Équation
d'advection

Champs 3D

Équation de
Poisson

Relativité
numérique

4

Champs 3D en coordonnées sphériques

Contrairement aux coordonnées cartésiennes, les champs exprimés en coordonnées sphériques doivent avoir un comportement particulier en $r = 0$ et $\sin \theta = 0$ (singularités des coordonnées).

Soit $f(x, y, z)$ un champ scalaire régulier – développable en séries entières : $f(x, y, z) = \sum_{i,j,k} c_{ijk} x^i y^j z^k$, on trouve les conditions de

régularité en remplaçant

$$x = r \sin \theta \cos \varphi,$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi,$$

$$z = r \cos \theta.$$

Par exemple, en symétrie sphérique, $f(r)$ doit être une fonction paire...

Si $f(r) = \sum a_{\ell m}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$, les fonctions $a_{\ell m}(r)$ ont la même parité que ℓ .

POURQUOI LES COORDONNÉES SPHÉRIQUES ?

POURQUOI S'EMBÊTER ?

Introduction aux méthodes spectrales

Jérôme Novak

Principes de base

Opérateurs différentiels

Exemple : Équation d'advection

Champs 3D

Équation de Poisson

Relativité numérique

- car les étoiles sont plus proches des sphères que des cubes...
- car les surfaces $r = \text{cte}$ sont régulières, ce qui facilite l'imposition de conditions aux bords,
- car à l'infini seul r diverge,
- car les harmoniques *sphériques* simplifient grandement la résolution de l'équation de Poisson ou de d'Alembert,
- car ce n'est pas si compliqué, après tout !

QUELLES FONCTIONS POUR LE DÉVELOPPEMENT SPECTRAL ?

Introduction aux méthodes spectrales

Jérôme Novak

Principes de base

Opérateurs différentiels

Exemple : Équation d'advection

Champs 3D

Équation de Poisson

Relativité numérique

φ est 2π -périodique \Rightarrow séries de Fourier.

θ peut être prolongée pour l'être aussi \Rightarrow Fourier ou Legendre

$P_l^m(\cos \theta)$,

r n'est pas périodique \Rightarrow polynômes de Tchebychev ou Legendre (utilisation de la parité)

Coût des calculs des coefficients spectraux :

- $O(N \log N)$ pour Fourier et Tchebychev,
- $O(N^2)$ pour Legendre.

mais intérêt des harmoniques sphériques $Y_\ell^m(\theta, \varphi) = P_\ell^m(\cos \theta)e^{im\varphi}$ comme fonctions propres du laplacien angulaire :

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta_{\text{ang}}$$

L'action des opérateurs comme $1/r$ ou $1/\sin \theta$ est évaluée de manière *linéaire* dans l'espace des *coefficients*. Numériquement, on calcule ($f(r)$ est développable en série entière)

$$\frac{f(r) - f(0)}{r}$$

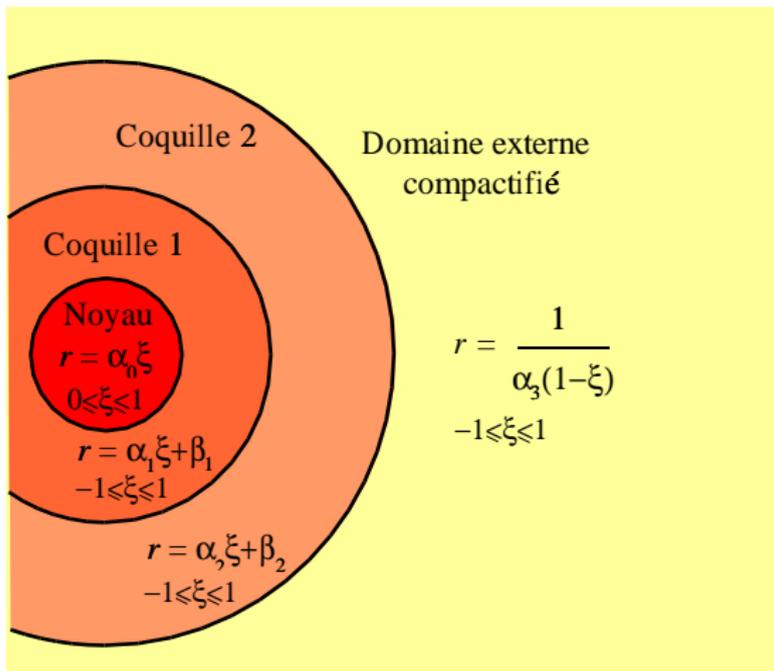
Pour calculer $f(r)/r$ analytiquement deux cas peuvent se présenter :

- soit ce rapport est bien défini et $f \sim_0 r$,
- soit il diverge et la partie divergente doit être compensée par un autre terme du même type.

Dans les deux cas, si f et l'opérateur complet (par ex. le Laplacien) sont réguliers, le résultat doit l'être aussi...

⇒ l'utilisation des méthodes spectrales assure cette régularité!

Autre point de vue : conditions aux bords ($r = 0$, $\theta = 0, \pi$) bien imposées ...



- $\xi \in [0, 1] \Rightarrow (T_{2i})_{i=0 \dots N}$ ou $(T_{2i+1})_{i=0 \dots N}$
- $\xi \in [-1, 1] \Rightarrow (T_i)_{i=0 \dots N}$

Le changement de coordonnée $u = 1/r$ permet de “ramener” l’infini spatial sur la grille numérique (très difficile avec coordonnées cartésiennes ou cylindriques).

- ⇒ imposition de conditions aux bords exactes pour les systèmes isolés (cas fréquent en astro).
- ⇒ résolution des équations dans tout l’espace...
 - Les opérateurs elliptiques (Laplacien) sont compatibles avec ce changement,
 - les opérateurs hyperboliques (eq. d’onde, ...) ne le sont pas !

$$\Delta f(r) = u^4 \Delta f(u)$$

Remarque : technique indépendante des méthodes spectrales ...

Introduction aux
méthodes
spectrales

Jérôme Novak

Principes de base

Opérateurs
différentiels

Exemple :
Équation
d'advection

Champs 3D

Équation de
Poisson

Relativité
numérique

5

**Exemple complet :
l'équation de Poisson avec une source à
support non-compact**

On veut résoudre :

$$\Delta\phi(r, \theta, \varphi) = \sigma(r, \theta, \varphi)$$

avec σ s'étendant jusqu'à l'infini (fréquent en relativité générale).

On suppose le système isolé $\Rightarrow \lim_{r \rightarrow \infty} \phi = 0$.

Remarque : les raisonnements sont les mêmes si σ est à support compact (pas de domaine compactifié...).

SIMPLIFICATION DU PROBLÈME

COMMENT SE RAMENER À UNE COLLECTION D'ÉQUATIONS DIFFÉRENTIELLES ORDINAIRES ?

Introduction aux méthodes spectrales

Jérôme Novak

Principes de base

Opérateurs différentiels

Exemple : Équation d'advection

Champs 3D

Équation de Poisson

Relativité numérique

Dans chaque domaine, on décompose sur une base de polynômes de Tchebychev (partie radiale) et d'harmoniques sphériques (partie angulaire) :

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = P_\ell^m(\cos \theta)e^{im\varphi},$$

tels que

$$\Delta_{\text{ang}} Y_\ell^m = \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) Y_\ell^m = -\ell(\ell + 1)Y_\ell^m$$

Ainsi, si $\phi(r, \theta, \varphi) = \sum_{\ell, m} a_{\ell m}(r)Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ le problème revient à

résoudre :

$$\forall \ell, \quad \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right) a_{\ell m}(r) = s_{\ell m}(r).$$

Dans le noyau, pour $\ell = 2$ et $N = 8$ (T_0, T_2, \dots, T_{16}) :

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 56 & 96 & 304 & 480 & 936 & 1344 & 2144 \\ 0 & 0 & 56 & 240 & 472 & 1056 & 1656 & 2832 & 3992 \\ 0 & 0 & 0 & 144 & 432 & 848 & 1632 & 2512 & 3984 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 264 & 688 & 1320 & 2336 & 3528 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 416 & 1008 & 1888 & 3168 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 600 & 1392 & 2552 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 816 & 1840 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1064 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

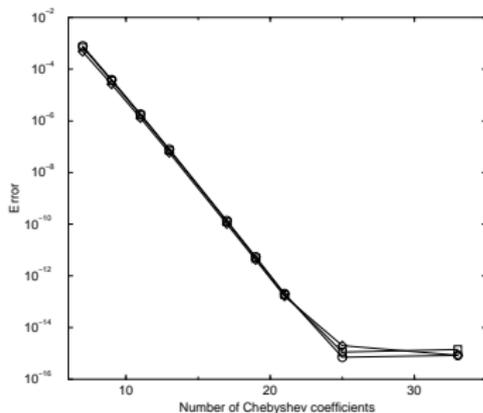
Les solutions homogènes sont :

- r^ℓ sauf dans le domaine externe compactifié,
- $1/r^{\ell+1}$ sauf dans le noyau.

Combinaison linéaire des solutions particulière/homogènes de manière à ce que :

- 1 la solution globale soit C^1 ,
- 2 les conditions aux bords soient vérifiées.

Remarque : on peut remplacer le noyau (domaine central) par des conditions aux bords pour modéliser des trous noirs.



Solution analytique
 (contenant des logarithmes)
 donnant une source à support
 non-compact.

⇒ généralisations aux cas vectoriels ou tensoriel...

Introduction aux
méthodes
spectrales

Jérôme Novak

Principes de base

Opérateurs
différentiels

Exemple :
Équation
d'advection

Champs 3D

Équation de
Poisson

Relativité
numérique

6

Méthodes spectrales en relativité numérique

MÉTHODES SPECTRALES DÉVELOPPÉES AU LUTH

Introduction aux méthodes spectrales

Jérôme Novak

Principes de base

Opérateurs différentiels

Exemple : Équation d'advection

Champs 3D

Équation de Poisson

Relativité numérique

Initiées par Silvano Bonazzola & Jean-Alain Marck (1986). Méthodes spectrales en *coordonnées sphériques*

- 1990 : Équation d'onde 3D
- 1993 : Premier calcul 3D d'effondrement stellaire (newtonien)
- 1994 : Modèles précis d'étoiles en rotation rapide et en relativité générale
- 1995 : Solutions des équations d'Einstein-Maxwell pour les étoiles avec champ magnétique
- 1996 : Instabilité séculaire 3D d'étoiles en rotation rigide en relativité générale

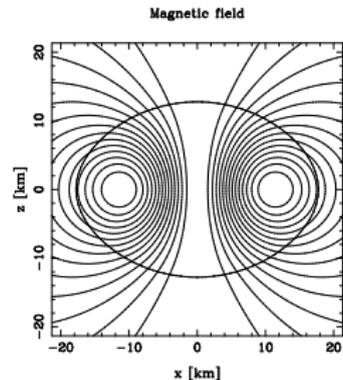
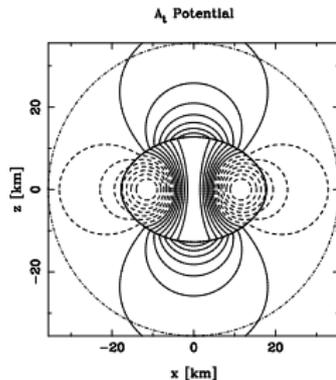
Langage Objet pour la **RELativité Numerique**

Une bibliothèque de classes C++ pour les méthodes spectrales multi-domaines, en coordonnées sphériques.

- 1997 : Début de Lorene
- 1999 : Modèles précis d'étoiles de quarks étranges en rotation
- 1999 : Binaires d'étoiles à neutrons en orbites circulaires (approximation IWM de la relativité générale)
- 2001 : Domaine public (GPL) et page web :
<http://www.lorene.obspm.fr>
- 2001 : Binaires de trous noirs en orbites circulaires (approximation IWM de la RG)
- 2002 : Équation d'onde 3D avec conditions aux contours absorbantes
- 2002 : Point de bifurcation de MacLaurin-Jacobi en RG
- 2004 : Résolution des équations d'Einstein complètes en 3D pour une onde gravitationnelle pure
- 2006 : Binaires mixtes étoile à neutrons / trou noir

Champ magnétique des magnétars $\rightarrow 10^{13}$ T.

Modèles stationnaires d'étoiles en rotation rapide + axe magnétique aligné

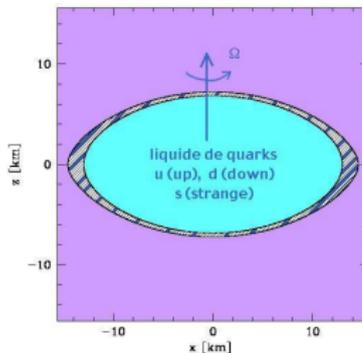


Déformation due à la pression magnétique importante que dans le cas des magnétars : *M.Bocquet, S.Bonazzola, E.Gourgoulhon et J.N., Astron. & Astrophys. 301,(1995).*

Possibilité d'émission d'ondes gravitationnelles : *S.Bonazzola et E.Gourgoulhon, Astron. & Astrophys. 312,(1996).*

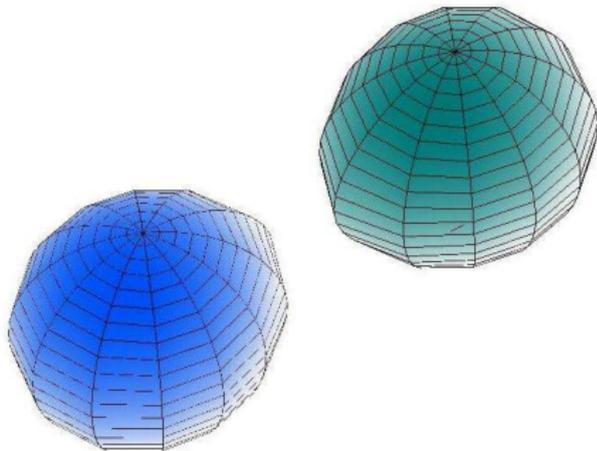
Rapport gyromagnétique : *J.N. et E.Marcq, Class. Quant. Grav. 20, (2003).*

- Étoile à neutrons : cœur composé essentiellement de matière n , p , e à l'équilibre bêta. Équilibre entre gravité et interaction nucléaire forte.
- Étoile de quarks : presque (sauf une fine écorce) entièrement composée de quarks u , d , s déconfinés. Liée par l'interaction forte.



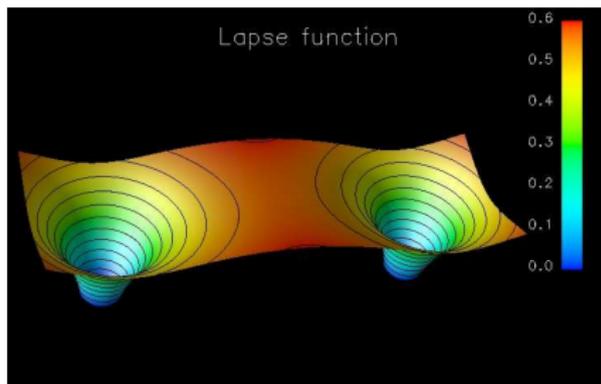
Influence sur la dernière orbite stable (importante pour les QPO) :

Observation de pulsars binaires → les ondes gravitationnelles existent !



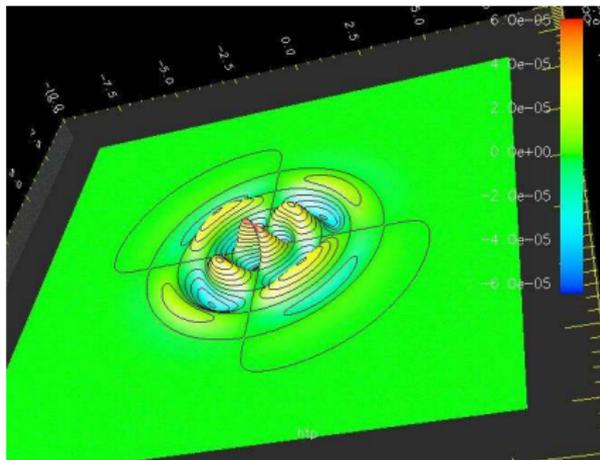
- Hypothèses d'irrotationalité et de quasi-stationnarité
- 5 équations d'Einstein résolues / 10
- Pas d'ondes gravitationnelles, mais informations sur l'évolution du système.

Trous noirs stellaires (VIRGO) comme galactiques (LISA) sont intéressants.



- Première simulation “réaliste”
- Bon accord avec les calculs post-newtoniens
- Localisation de la dernière orbite stable primordiale pour le traitement du signal.

Intégration dans le temps de l'évolution d'une onde gravitationnelle en pleine Relativité Générale (et 3D).



⇒ code tournant sur n'importe quel PC récent ...

Les codes pour produire les résultats de l'exemple sont disponibles
sous serveur CVS de LORENE voir :

<http://www.lorene.obspm.fr>

QUELQUES RÉFÉRENCES SUR LES MÉTHODES SPECTRALES

Introduction aux méthodes spectrales

Jérôme Novak

Principes de base

Opérateurs différentiels

Exemple : Équation d'advection

Champs 3D

Équation de Poisson

Relativité numérique

- D. Gottlieb & S.A. Orszag : *Numerical analysis of spectral methods*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia (1977)
- C. Canuto, M.Y. Hussaini, A. Quarteroni & T.A. Zang : *Spectral methods in fluid dynamics*, Springer-Verlag, Berlin (1988)
- C. Bernardi & Y. Maday : *Approximations spectrales de problèmes aux limites elliptiques*, Springer-Verlag, Paris (1992)
- J.P. Boyd : *Chebyshev and Fourier spectral methods*, 2nd edition, Dover, Mineola (2001) [[page web](#)]
- C. Canuto, M.Y. Hussaini, A. Quarteroni & T.A. Zang : *Spectral Methods. Fundamentals in Single Domains*, Springer-Verlag, Berlin (2006)
- C. Canuto, M.Y. Hussaini, A. Quarteroni & T.A. Zang : *Spectral Methods. Evolution to Complex Geometries and Applications to Fluid Dynamics*, Springer-Verlag, Berlin (2007)
- Ph. Grandclément & Jérôme Novak : *Spectral Methods for Numerical Relativity*, *Living Reviews in Relativity* (soumis)
arXiv :0706.2286