Promotion X 2000 Mardi 23 avril 2002

Analyse et numérique et optimisation
Corrigé du contrôle non classant, durée 2h
F. Bonnans et P. Joly

Analyse numérique de l'équation de Schrödinger

Question 1. On note tout d'abord que:

$$\frac{d}{dt}\int_0^1 \mid u(x,t) \mid^2 dx = \int_0^1 \{\frac{\partial u}{\partial t}\bar{u} + \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} u\}\, dx = 2\,\mathcal{R}e\{\int_0^1 \frac{\partial u}{\partial t}\bar{u}\, dx\}.$$

En multipliant l'équation par $\bar{u}$ et en intégrant sur $[0,1]$, on obtient (modulo une intégration par parties et l'utilisation des deux conditions aux limites):

$$i\int_0^1 \frac{\partial u}{\partial t}\bar{u}\, dx + \int_0^1 \{|\frac{\partial u}{\partial x}|^2 + q(x)|u|^2\}\, dx = 0.$$

En prenant la partie imaginaire de cette égalité, on obtient (on utilise le fait que q est réel):

$$\frac{d}{dt}\int_0^1 \mid u(x,t) \mid^2 dx = 0.$$

L'unicité d'une solution régulière se déduit immédiatement de cette identité par linéarité.

De même, si on multiplie par $\dfrac{\partial \bar{u}}{\partial t}$ on obtient, après intégration sur $[0,1]$

$$i\int_0^1 |\frac{\partial u}{\partial t}|^2\, dx + \int_0^1 \{\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial \bar{u}}{\partial x \partial t} + q(x) u \frac{\partial \bar{u}}{\partial t}\}\, dx = 0.$$

En prenant la partie réelle du résultat, on obtient alors (on utilise à nouveau le fait que q est réel):

$$\frac{d}{dt}\int_0^1 (\mid \frac{\partial u}{\partial x}(x,t) \mid^2 + q(x) \;\mid u(x,t) \mid^2)\, dx = 0.$$

Question 2. On voit aisément que la résolution du schéma équivaut à l'inversion de la matrice:

$$I + iQ,$$

où Q est la matrice tridiagonale réelle symétrique (donc hermitienne) donnée par:

$$\begin{cases} q_{j,j} = -2\dfrac{\theta \Delta t}{h^2}, \quad 1 \le i \le N, \\[2mm] q_{j,j+1} = \dfrac{\theta \Delta t}{h^2}. \end{cases}$$

Pour conclure il suffit d'observer que ($(.,.)$ désignant le produit scalaire usuel dans $\mathbb{C}^N$ et $|.|$ la norme associée)

$$\left| \begin{aligned} u \in \text{Ker }(I+iQ) &\Longrightarrow ((I+iQ)u,u)=0, \\ &\Longrightarrow |u|^2 + i(Qu,u) = 0, \\ &\Longrightarrow |u|^2 = 0 \quad \text{(en prenant la partie réelle).} \end{aligned} \right.$$

Comme on est en dimension finie, $I+iQ$ est bien inversible. **Question 3.** En réécrivant le schéma sous la forme:

$$\left\{ \begin{aligned} i\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\Delta t} &+ \frac{1}{2}\left[-\left(\frac{u_{j+1}^{n+1}-2u_j^{n+1}+u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + \frac{u_{j+1}^{n}-2u_j^{n}+u_{j-1}^{n}}{h^2}\right) + \ q\ (u_j^{n+1}+u_j^n) \right] \\ &(\theta-\frac{1}{2})\left[-\left(\frac{u_{j+1}^{n+1}-2u_j^{n+1}+u_{j-1}^{n+1}}{h^2} - \frac{u_{j+1}^{n}-2u_j^{n}+u_{j-1}^{n}}{h^2}\right) + \ q\ (u_j^{n+1}-u_j^n) \right] = 0, \end{aligned} \right.$$

on voit facilement que l'erreur de troncature ε_j^n du schéma vérifie:

$$\varepsilon_j^n = (\theta-\frac{1}{2})\Delta t\ (-\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} + q\frac{\partial u}{\partial t}) + O(\Delta t^2 + h^2),$$

de telle sorte qu'une équation équivalente du schéma est donnée par:

$$i\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + q\ u + (\theta-\frac{1}{2})\Delta t\ (-\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} + q\frac{\partial u}{\partial t}) = 0.$$

En réutilisant l'équation, on aboutit alors à l'équation équivalente:

$$i\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + q(x)u + i\ (\theta-\frac{1}{2})\Delta t\ (\frac{\partial^2}{\partial x^2} - q)^2 u = 0.$$

Admettons que cette equation a une solution régulière. Si on multiplie cette équation par $\bar{u}$ et qu'on intégre en espace, en prenant la partie réelle du résultat, on obtient après quelques manipulations:

$$\frac{d}{dt}\int_0^1 \mid u(x,t) \mid^2 dx + (\theta-\frac{1}{2}) \int_0^1 |\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - q\ u|^2\ dx = 0.$$

Remarque: pour arriver à cette identité, il faut faire deux intégrations par parties successives et utiliser que $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ s'annule en $x=0$ et $x=1$. Ceci résulte des conditions de Dirichlet et de la régularité supposée de u (qui permet d'utiliser "l'équation intérieure sur le bord").

On voit que pout $\theta \geq 1/2$, la norme L^2 de la solution décroit. On a donc un effet de dissipation. Pour $\theta < 1/2$, cette norme augmente, ce qui fait craindre un phénomène d'instabilité que l'analyse qui va suivre va confirmer.

Question 4. La méthode de Fourier revient à rechercher des solutions particulières de la forme:

$$u_j^n = u^n \exp ikx_j, \quad k \in \mathbb{R}.$$

En injectant cette solution dans l'équation générale du schéma on obtient la relation de récurrence:

$$u^{n+1} = G_h(k, \Delta t)\; u^n,$$

où le coefficient d'amplification $G_h(k, \Delta t)$ est donné par:

$$G_h(k, \Delta t) = \frac{1 + i(1-\theta)\Delta t\; [\; q + \sin^2 \frac{kh}{2}/h^2]}{1 - i\theta\Delta t\; [\; q + \sin^2 \frac{kh}{2}/h^2]}.$$

On calcule alors aisément, avec $X = q + \sin^2 \frac{kh}{2}/h^2 \in \mathbb{R}$:

$$|G_h(k, \Delta t)|^2 = \frac{1 + (1-\theta)^2\beta^2 X^2}{1 + \theta^2\beta^2 X^2} = 1 + (1 - 2\theta)\beta^2 X^2.$$

Il est alors très facile de conclure. (On remarque en passant que pour $\theta = 0.5$, $|G_h(k, \Delta t)| = 1$ pour tout k, cela traduit un résultat de conservation en norme L^2, résultat que généralise la question 4)

Question 5. On observe que:

$$\left|\begin{array}{ll}
-\displaystyle\sum_{j=1}^{N} \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2}\, v_j\, h & = -\displaystyle\sum_{j=1}^{N} \frac{u_{j+1} - u_j}{h} \frac{v_j}{h}\, h + \sum_{j=1}^{N} \frac{u_j - u_{j-1}}{h} \frac{v_j}{h}\, h \\
(j = l - 1) & = -\displaystyle\sum_{j=1}^{N} \frac{u_{j+1} - u_j}{h} \frac{v_j}{h}\, h + \sum_{l=0}^{N-1} \frac{u_{l+1} - u_l}{h} \frac{v_{l+1}}{h}\, h \\
(\text{car } v_0 = v_{N+1} = 0) & = -\displaystyle\sum_{j=0}^{N} \frac{u_{j+1} - u_j}{h} \frac{v_j}{h}\, h + \sum_{j=0}^{N} \frac{u_{j+1} - u_j}{h} \frac{v_{l+1}}{h}\, h \\
 & = \displaystyle\sum_{j=0}^{N} \frac{u_{j+1} - u_j}{h}\; \frac{v_{j+1} - v_j}{h}\; h.
\end{array}\right.$$

On multiplie alors l'équation du schéma par la quantité:

$$\frac{\bar{u}_j^{n+1} + \bar{u}_j^n}{2}\, h,$$

et on somme sur j allant de 1 à N. Grâce à la formule d'intégration par parties discrète, si on pose:

$$\|u_h^n\|^2 = \sum_{j=1}^{N} |u_j^n|^2 h \quad \text{et} \quad u_j^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\,(u_j^{n+1} + u_j^n),$$

on obtient facilement (remarquons que $u_j^{n+\frac{1}{2}}$ s'annule bien en $j = 0$ et $j = N+1$) :

$$\left| \begin{array}{l} \dfrac{i}{2\Delta t}\left\{\|u_h^{n+1}\|^2 - \|u_h^n\|^2\right\} + \dfrac{i}{2\Delta t}\displaystyle\sum_{j=1}^{N}(u_j^n\bar{u}_j^{n+1} - \bar{u}_j^n u_j^{n+1}) \\ + \quad \displaystyle\sum_{j=0}^{N}\left|\frac{u_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} - u_j^{n+\frac{1}{2}}}{h}\right|^2 h + \sum_{j=0}^{N} q(x_j)\,|u_j^{n+\frac{1}{2}}|^2\,h = 0. \end{array}\right.$$

En prenant la partie imaginaire du résultat ($u_j^n\bar{u}_j^{n+1} - \bar{u}_j^n u_j^{n+1}$ est imaginaire), on obtient:

$$\|u_h^{n+1}\|^2 = \|u_h^n\|^2,$$

résultat de conservation qui démontre en particulier la stabilité L^2 inconditionnelle du schéma.

Question 6. Posons $u_j^{n+\theta} = \theta u_j^{n+1} + (1-\theta)u_j^n$ et remarquons que:

$$u_j^{n+\theta} = u_j^{n+\frac{1}{2}} + (\theta - \frac{1}{2})(u_j^{n+1} - u_j^n).$$

On multiplie cette fois l'équation du schéma par $u_j^{n+\theta}$ et on somme sur j. On obtient alors l'identité:

$$\left| \begin{array}{l} \dfrac{i}{2\Delta t}\left\{\|u_h^{n+1}\|^2 - \|u_h^n\|^2\right\} + i\,(\theta - \dfrac{1}{2})\,\Delta t\,\left\|\dfrac{u_h^{n+1} - u_h^n}{\Delta t}\right\|^2 + \\ + \dfrac{i}{2\Delta t}\displaystyle\sum_{j=1}^{N}(u_j^n\bar{u}_j^{n+1} - \bar{u}_j^n u_j^{n+1}) \\ + \displaystyle\sum_{j=0}^{N}\left|\frac{u_{j+1}^{n+\theta} - u_j^{n+\theta}}{h}\right|^2 h + \sum_{j=0}^{N} q(x_j)\,|u_j^{n+\theta}|^2\,h = 0, \end{array}\right.$$

d'où on déduit l'identité annoncée en prenant la partie imaginaire.

Lorsque $\theta \geq \dfrac{1}{2}$, on déduit en particulier que:

$$\|u_h^{n+1}\| \leq \|u_h^n\|,$$

ce qui démontre que le schéma est inconditionnellement L^2 stable pour $\theta \geq \frac{1}{2}$, ce qui est cohérent avec le résultat de la question 3. On note même que le schéma induit de la dissipation (par rapport au cas continu) pour $\theta > \frac{1}{2}$.

Lorsque $\theta < \dfrac{1}{2}$, on a cette fois

$$\|u_h^{n+1}\| \geq \|u_h^n\|,$$

ce qui est cohérent avec le résultat d'instabilité démontré à la question 3.