Promotion X 2000 Mardi 23 avril 2002

Cours Analyse et numérique et optimisation
Contrôle non classant, durée 2h

Sujet donné par F. Bonnans et P. Joly

Documents autorisés : polycopiés du cours et notes personnelles (pas de calculettes).

Analyse numérique de l'équation de Schrödinger

Attention, dans cet exercice la fonction inconnue est à valeurs **complexes** *et i désigne la racine de -1.* Pour tout nombre complexe z on notera $|z|$, $\mathcal{R}e\ z$ et $\mathcal{I}m\ z$ son module, sa parie réelle et sa partie imaginaire. On s'intéresse maintenant au problème consistant à trouver $u(x,t) : [0,1] \times \mathbf{R}^+ \to \mathbb{C}$ tel que:

$$\begin{cases} i\dfrac{\partial u}{\partial t} - \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + q(x)u = 0 \qquad x \in]0,1[, \quad t > 0, \\ u(0,t) = u(1,t) = 0, \\ u(x,0) = u_0(x), \end{cases} \tag{1}$$

où $q(x)$ et $u_0(x)$ sont deux fonctions régulières, q étant à valeurs **réelles**. On admet que ce problème admet une solution u suffisamment régulière.

1) Montrer que la fonction :

$$t \to \int_0^1 \mid u(x,t) \mid^2 dx$$

est constante.

(Indication, on pourra établir que: $\dfrac{d}{dt}\displaystyle\int_0^1 \mid u(x,t) \mid^2 dx = 2\ \mathcal{R}e\ \{\int_0^1 \frac{\partial u}{\partial t}\bar{u}\ dx\}$)

En déduire l'unicité de la solution régulière. Montrer qu'il y a également conservation de la quantité:

$$t \to \int_0^1 (\ \mid \frac{\partial u}{\partial x}(x,t) \mid^2 + q(x)\ \mid u(x,t) \mid^2\ )\ dx.$$

2) On introduit un maillage uniforme du segment $[0,1]$ à l'aide d'un pas :

$$h = \frac{1}{N+1}.$$

On pose $x_j = jh, 0 \leq j \leq N+1$ et on approche (1) par un θ schéma (θ étant un réel donné entre 0 et 1):

$$\left\{ \begin{array}{ll} i\dfrac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\Delta t} & -\theta\dfrac{u_{j+1}^{n+1}-2u_j^{n+1}+u_{j-1}^{n+1}}{h^2} - (1-\theta)\dfrac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2} \\ & + q(x_j)\ (\theta u_j^{n+1} + (1-\theta)u_j^n) = 0, \qquad 1 \leq j \leq N, \end{array} \right. \tag{2}$$

complété par les conditions aux limites de Dirichlet:

$$u_0^n = u_{N+1}^n = 0.$$

Démontrer l'existence et l'unicité de la solution de (2). (On pourra démontrer qu'une matrice de la forme $I + iQ$, où Q est hermitienne, est nécessairement inversible)

3) Dans cette question, on se place dans le cas où la fonction q est *constante*. Il est facile (mais non demandé ici) de montrer que le schéma est d'ordre 2 en espace et d'ordre m en temps avec $m = 2$ si $\theta = 0.5$ et $m = 1$ si $\theta \neq 0.5$. Dans ce dernier cas, montrer que le schéma admet une equation équivalente de la forme:

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

où a est un nombre réel qu'on calculera en fonction de θ. En admettant que cette dernière équation admet une solution très régulière, montrer que:

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

(Indication : on pourra utiliser le fait - après l'avoir justifié - que $\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(0,t) = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(1,t) = 0.$)

Analyser l'influence du choix de θ sur le comportement de la solution numérique (au premier ordre en Δt).

4) On suppose toujours que q est constante et l'on considère cette fois des conditions aux limites *périodiques*. Par la méthode de Fourier, montrer que ce schéma est inconditionnellement L^2-instable pour $\theta < 0.5$ et inconditionnellement L^2-stable pour $\theta \geq 0.5$.

5) On ne suppose plus q constant et on revient aux conditions aux limites de Dirichlet. De plus on choisit $\theta = 0.5$.

Soient

$$(u_j)_{0\leq j\leq N+1} \text{ et } (v_j)_{0\leq j\leq N+1}$$

deux vecteurs de $\mathbb{C}^{N+2}$ tels que $v_0 = v_{N+1} = 0$. Démontrer la formule d'intégration par parties discrète:

$$-\sum_{j=1}^{N} \frac{u_{j+1}-2u_j+u_{j-1}}{h^2}\ v_j\ h = \sum_{j=0}^{N} \frac{u_{j+1}-u_j}{h}\ \frac{v_{j+1}-v_j}{h}\ h$$

En déduire que la solution u_j^n de (2) est telle que la suite:

$$n \rightarrow \|u_h^n\|^2 = \sum_{j=1}^{N} |u_j^n|^2 h$$

est constante. Qu'en concluez vous ?

(Indication: on multipliera l'équation du schéma par $v_j\ h$ avec v_j "bien choisi" et on sommera sur j. On pourra s'inspirer des calculs effectués à la question 1 après avoir remarqué qu'une expression de la forme:

$$\sum_{j=1}^{n} u_j\ v_j\ h$$

est un équivalent discret de :

$$\int_0^1 u(x)\ v(x)\ dx... \quad)$$

6) On considére maintenant le cas $\theta \neq 0.5$. Démontrer l'identité:

$$\frac{1}{2\Delta t}\{\ \|u_h^{n+1}\|^2 - \|u_h^n\|^2\} + (\theta - \frac{1}{2})\ \Delta t \sum_{j=1}^{n} |\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}|^2\ h = 0,$$

Commenter ce résultat.

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 réguli'ere 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:

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

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

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

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

$$\left\{ \begin{array}{l} i\dfrac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\Delta t} + \dfrac{1}{2}\,[\,-(\dfrac{u_{j+1}^{n+1}-2u_j^{n+1}+u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + \dfrac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2}) + \; q\;(u_j^{n+1}+u_j^n)\,] \\ \qquad (\theta-\dfrac{1}{2})\,[\,-(\dfrac{u_{j+1}^{n+1}-2u_j^{n+1}+u_{j-1}^{n+1}}{h^2} - \dfrac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2}) + \; q\;(u_j^{n+1}-u_j^n)\,] = 0, \end{array} \right.$$

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 $X = q + \sin^2 \frac{kh}{2}/h^2 \in \mathbb{R}$:

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

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:

$$\begin{aligned}
-\sum_{j=1}^{N} \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2}\ v_j\ h \quad &= -\sum_{j=1}^{N} \frac{u_{j+1} - u_j}{h}\frac{v_j}{h}\ h + \sum_{j=1}^{N} \frac{u_j - u_{j-1}}{h}\frac{v_j}{h}\ h \\
(j = l - 1) \qquad &= -\sum_{j=1}^{N} \frac{u_{j+1} - u_j}{h}\frac{v_j}{h}\ h + \sum_{l=0}^{N-1} \frac{u_{l+1} - u_l}{h}\frac{v_{l+1}}{h}\ h \\
(\text{car } v_0 = v_{N+1} = 0) \qquad &= -\sum_{j=0}^{N} \frac{u_{j+1} - u_j}{h}\frac{v_j}{h}\ h + \sum_{j=0}^{N} \frac{u_{j+1} - u_j}{h}\frac{v_{l+1}}{h}\ h \\
&= \sum_{j=0}^{N} \frac{u_{j+1} - u_j}{h}\ \frac{v_{j+1} - v_j}{h}\ h.
\end{aligned}$$

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 $j=N+1$) :

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

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:

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

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

Lorsque $\theta\geq\frac{1}{2}$, 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 $\theta<\frac{1}{2}$, 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.