ÉCOLE POLYTECHNIQUE Promotion 2007

CONTRÔLE CLASSANT ANALYSE NUMERIQUE ET OPTIMISATION
Lundi 29 juin 2009, durée 4 heures.
Sujet proposé par Claude Le Bris

Avertissement : Les deux problèmes sont indépendants. A l'intérieur de chacun, les sections et de nombreuses questions sont elles-mêmes très largement indépendantes entre elles. On prêtera notamment attention aux notes de bas de page. Le texte est long, mais il n'est pas nécessaire de tout faire pour obtenir la note maximale. Une grande valeur sera attribuée à la rigueur des raisonnements. Le Problème 1 sera noté sur 12 points, le Problème 2 sur 8 points.

---

1 Problème 1 : Schémas d'intégration en temps long pour les équations différentielles

L'objet du Problème est d'étudier les schémas d'intégration pour les équations différentielles ordinaires, avec une attention particulière sur certaines propriétés de conservation en temps long pour les systèmes dits *Hamiltoniens*.

1.1 Plusieurs formulations équivalentes

On s'intéresse à la résolution de l'équation de Newton

$$\ddot{q} = -\nabla_q V(q), \tag{1}$$

où q est une variable réelle ($q \in \mathbb{R}^N$) modélisant la position d'une particule dans $\mathbb{R}^N$, et V est une fonction de $\mathbb{R}^N$ dans $\mathbb{R}$ modélisant le potentiel auquel cette particule est soumise. Bien sûr, $\ddot{q}$ désigne la dérivée seconde en temps de la position, et on utilisera de même la notation $\dot{q}$ pour la dérivée première en temps. La notation $\nabla_q V$ désigne le vecteur gradient, dont les composantes sont les $\dfrac{\partial V}{\partial q_i}$, $1 \leq i \leq N$. L'équation différentielle (1) est résolue pour $t \geq 0$ et est munie de la condition initiale en vitesse et position

$$q(t=0) = \bar{q}_0, \quad \dot{q}(t=0) = \bar{p}_0, \tag{2}$$

où $\bar{q}_0$ et $\bar{p}_0$ sont respectivement la position et la vitesse initiales fixées. On supposera dans la suite que le potentiel V est suffisamment régulier pour que toutes les opérations de dérivation nécessaires aient un sens. **Dans la suite, pour simplifier et bien que cela ne change rien aux raisonnements et résultats, on prendra $N = 1$ (la particule est sur la droite réelle), de sorte que (1) s'écrit $\ddot{q} = -\dfrac{dV}{dq}(q)$.**

Question 1.1 *Montrer que si l'on introduit la variable intermédiaire $p = \dot{q}$, alors l'équation de Newton (1) se met sous la forme du système*

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}(p,q), \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}(p,q), \tag{3}$$

pour une fonction $H(p,q) = \frac{1}{2}p^2 + W(q)$ où on déterminera W. On précisera aussi les conditions initiales pour le système (3). La fonction H s'appelle le Hamiltonien *et le système (3) est la forme Hamiltonienne de (1).*

Question 1.2 *Montrer que $H(p(t), q(t))$ est une constante en temps pour (3). On dit que le Hamiltonien $H(p,q)$ est* conservé *par la dynamique (3) (ou (1)). Quelle est l'interprétation physique de ce résultat ?*

On va maintenant déterminer une autre forme, équivalente à (1) et (3), des équations du mouvement. Pour cela, on fixe maintenant un temps $T > 0$, une position initiale $\bar{q}_0$ et une position finale $\bar{q}_T$. On introduit le *Lagrangien* (ne pas confondre avec la terminologie du cours)

$$L(p, q) = \frac{p^2}{2} - V(q) \tag{4}$$

et l'intégrale dite *intégrale d'action*

$$S\left(\{q(t)\}_{t\in[0,T]}\right) = \int_0^T L(\dot{q}(t), q(t))\, dt \tag{5}$$

définie sur les trajectoires $q(t)$ menant de $\bar{q}_0$ à $\bar{q}_T$. On considère le problème variationnel suivant

$$\inf\left\{S\left(\{q(t)\}_{t\in[0,T]}\right), \quad q(t=0) = \bar{q}_0,\, q(t=T) = \bar{q}_T\right\}. \tag{6}$$

Question 1.3 *On admet que le problème de minimisation (6) admet un point critique sous de bonnes hypothèses et pour une bonne classe de fonctions $q(t)$ qu'on ne cherchera pas à identifier. Etablir les équations d'optimalité du problème (équations d'Euler-Lagrange) et montrer qu'elle sont formellement équivalentes à (1) et donc à (3). Il s'agit de la forme dite* principe de Hamilton *des équations du mouvement.*

On étudie maintenant une approximation numérique de la formulation (6). Pour cela, on réalise une approximation de type P1 d'une trajectoire $q(t)$. Autrement dit, on introduit un pas de temps $h = T/N$ et l'approximation $(q_0, q_1, \ldots, q_{N-1}, q_N)$ de la trajectoire $q(t)$ sur $[0, T]$ découpée en intervalles de temps de longueur h. Et on approche la fonctionnelle (5) par

$$S(q_0, q_1, \ldots, q_{N-1}, q_N) = \sum_{n=0}^{N-1} h\left[\frac{1}{2}\left(\frac{q_{n+1} - q_n}{h}\right)^2 - V(q_n)\right] \tag{7}$$

Question 1.4 *Ecrire le problème variationnel discret bâti à partir de (7) qui approche (6). Ecrire ses équations d'optimalité sous la forme d'un schéma aux différences finies avec des conditions aux bords sur le segment $[0, T]$. A quel schéma vu en cours ce schéma vous fait-il penser ?*

Question 1.5 *Lorsqu'on cherche à approcher numériquement la trajectoire du mouvement (1) partant des conditions initiales en position/vitesse (2), quel est l'obstacle pratique à résoudre le schéma aux différences finies déterminé à la question précédente ? Commentez.*

1.2 Propriétés du schéma de Verlet

On introduit, pour la résolution du système (3) le schéma aux différences suivant, dit *schéma de Verlet* :

$$\left\{\begin{array}{lcl} q_{n+1} & = & q_n + h\, p_n - \frac{h^2}{2}\nabla V(q_n), \\ p_{n+1} & = & p_n - \frac{h}{2}\left(\nabla V(q_n) + \nabla V(q_{n+1})\right) \end{array}\right. \tag{8}$$

pour un pas de temps $h > 0$.

Question 1.6 *Montrer que la position q_n trouvée par le schéma (8) résout, pour $1 \leq n \leq N-1$, les équations du schéma déterminé à la Question 1.4.*

Question 1.7 *On étudie ici quelques propriétés élémentaires de (8).*

- *a - Le schéma (8) est-il explicite ou implicite ?*
- *b - Montrer qu'il s'agit d'un schéma symétrique, c'est-à-dire que si l'on renverse le sens du temps dans l'équation (3), et le signe du pas de temps h dans le schéma, on retrouve, partant de (p_N, q_N) la donnée initiale (p_0, q_0).*
- *c - Déterminer une forme équivalente au schéma (8) écrite sur les variables q_n et $p_{n+1/2} = p_n - \frac{h}{2} \nabla V(q_n)$.*
- *d - Commentez la forme trouvée en (c) au regard du système (3).*

Question 1.8 *En procédant comme dans le cours pour les schémas aux différences finies étudiés, calculer les ordres de précision du schéma (8) lors la résolution de l'équation (3), pour la position q et la vitesse p.*

Question 1.9 *On souhaite savoir à quel point la conservation de H (assurée au niveau continu par la réponse à la Question 1.2) est assurée par le schéma numérique (8). Si l'on utilise le résultat de la Question 1.8, que savez vous dire de la conservation de H par le schéma (8) sur un pas de temps h, et donc, finalement, sur un intervalle $[0, T]$?*

Question 1.10 *Comme illustration des limites de l'approche de la Question 1.9, on regarde dans cette question le cas particulier du potentiel $V(q) = \frac{1}{2}\omega^2 q^2$ (toujours en dimension $N = 1$).*

- *a - Quel est le système physique modélisé par (1) ?*
- *b - Montrer que le Hamiltonien*
$$\overline{H}(p, q) = \frac{1}{2} p^2 + \frac{1}{2} \left(1 - \alpha\, h^2 \omega^2\right) \omega^2 q^2 \tag{9}$$
est exactement conservé par le schéma (8) pour une certaine valeur du paramètre α qu'on déterminera[1].
- *c - Montrer que pour h assez petit, que l'on quantifiera en fonction de ω, la position q_n est bornée indépendamment de n.*
- *d - En déduire que le Hamiltonien $H(p, q)$ est conservé à l'ordre h^2 sur des temps infiniment longs (on utilisera une comparaison avec $\overline{H}(p, q)$).*
- *e - Commentez à la lumière de la Question 1.9.*

On revient maintenant au cas d'un potentiel V général dans (1).

Question 1.11 *On considère momentanément une équation différentielle $\dot{y} = f(y)$ pour $y \in \mathbb{R}^{2N}$ où N est un entier (ici, de nouveau on peut prendre $N = 1$ pour simplifier), et f une application de $\mathbb{R}^{2N}$ dans lui-même, supposée assez régulière pour que l'équation admette une solution bien définie et unique. On considère alors un domaine $\mathcal{D}_0$ de $\mathbb{R}^{2N}$ et on s'intéresse à son évolution au cours du temps : prenant $y_0 \in \mathcal{D}_0$ on suit y_0 dans son mouvement et on forme alors l'ensemble $\mathcal{D}_t$ des positions au temps t des particules parties de $y_0 \in \mathcal{D}_0$ à l'instant initial.*

- *a - Montrer que sous une condition sur* $\mathrm{div} f$ *qu'on précisera, le volume de $\mathcal{D}_t$ est égal à celui de $\mathcal{D}_0$. Quelle propriété de physique ou mécanique cette condition sur* $\mathrm{div} f$ *évoque-t-elle pour vous ?*
- *b- Montrer que si l'on revient maintenant au système (3) et qu'on identifie la fonction f correspondante, alors la propriété ci-dessus est vraie. On dit que la dynamique (3)* conserve le volume dans l'espace des phases (p, q).

<u>*Indication :*</u> *On pourra exprimer le volume de $\mathcal{D}_t$ en fonction d'une intégrale sur $\mathcal{D}_0$ par changement de variables, et par exemple utiliser un développement limité pour $t \geq 0$ petit.*

[1] Cette question est calculatoire mais n'est pas difficile, et sa résolution n'est pas indispensable pour continuer

Question 1.12 *De manière analogue à la question précédente, on considère un domaine $\mathcal{D}_n$ dans l'espace des phases (p, q) et son image $\mathcal{D}_{n+1}$ par le flot numérique φ_h du schéma (8), c'est-à-dire l'application qui à (p_n, q_n) associe (p_{n+1}, q_{n+1}). Montrer, en calculant le Jacobien de φ_h, que $\mathcal{D}_n$ et $\mathcal{D}_{n+1}$ ont* exactement *même volume. Si on cherche à démontrer cette propriété seulement à partir de la précision du schéma obtenue à la Question 1.9, y parvient-on ? Commentez.*

La suite du problème a pour objectif d'établir une propriété similaire aux propriétés démontrées ci-dessus, pour la conservation de H dans un cadre plus général que celui abordé à la Question 1.9.

1.3 Notion d'équation modifiée et conséquences

L'objet de cette section est d'introduire la notion d'*équation modifiée*. Cette notion est l'analogue, pour les équations différentielles du type (1), de la notion d'*équation équivalente* introduite en cours. Pour se familiariser avec cette notion, on va tout d'abord la mettre en oeuvre sur un cas simple, avant d'aborder le cas du schéma de Verlet (8).

On considère donc d'abord l'équation scalaire

$$\dot{y} = f(y) \tag{10}$$

pour une fonction f régulière de $\mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ fixée, et on approche la solution $y(t_n = nh)$ de cette équation par y_n solution du schéma dit *schéma d'Euler*

$$y_{n+1} = y_n + h\, f(y_n) \tag{11}$$

Question 1.13 *Montrer que si $y(t_{n+1})$ et y_{n+1} sont calculés à partir de y_n, respectivement par l'équation exacte (10) et le schéma d'Euler (11), sur le pas de temps h, on obtient*

$$y(t_{n+1}) - y_{n+1} = \frac{h^2}{2} a_n + O(h^3), \tag{12}$$

où on calculera précisément le terme a_n en fonction de $f(y_n)$ et $f'(y_n)$.

On considère alors l'équation différentielle

$$\dot{\tilde{y}} = f(\tilde{y}) - \lambda\, h\, f'(\tilde{y})\, f(\tilde{y}), \tag{13}$$

où λ est un paramètre. Cette équation s'appelle l'*équation modifiée* à l'ordre $O(h^2)$.

Question 1.14 *Montrer que, cette fois, pour un paramètre λ qu'on déterminera, si $\tilde{y}(t_{n+1})$ et y_{n+1} sont calculés à partir de y_n, respectivement par l'équation (13) et le schéma d'Euler (11), sur le pas de temps h, on obtient*

$$\tilde{y}(t_{n+1}) - y_{n+1} = O(h^3). \tag{14}$$

Commenter l'intérêt de l'équation modifiée pour comprendre les propriétés de la trajectoire numérique y_n issue de (11).

On souhaite maintenant déterminer l'équation modifiée pour le schéma de Verlet (8) et l'équation (3). On cherche f_0, f_1, f_2 tels que la solution $y_{n+1} = (p_{n+1}, q_{n+1})$ calculée à partir de y_n par (8) coïncide au moins à l'ordre $O(h^4)$ près avec $\tilde{y}(t_{n+1})$ calculée à partir de y_n en résolvant (3) exactement.

Question 1.15 *Montrer que cette équation modifiée s'écrit, pour* $y = \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$,

$$\dot{\tilde{y}} = f_0(\tilde{y}(t)) + h\, f_1(\tilde{y}(t)) + h^2 f_2(\tilde{y}(t)) \tag{15}$$

avec

$$f_0(q,p) = \begin{pmatrix} -\frac{\partial H}{\partial q} \\ \frac{\partial H}{\partial p} \end{pmatrix} \quad f_1(q,p) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad f_2(q,p) = \begin{pmatrix} \beta\, D^2V(q)\, \nabla V(q) - \frac{\alpha}{2}\, D^3V(q)(p,p) \\ \alpha\, D^2V(q)p \end{pmatrix}, \tag{16}$$

et pour des coefficients α *et* β *qu'on déterminera*[2]*. A laquelle des propriétés du schéma de Verlet établies précédemment reliez-vous (formellement) le fait que le terme* f_1 *d'ordre impair en* h *de l'équation modifiée est nul ?*

Question 1.16 *Montrer que l'équation modifiée (15) obtenue à la question précédente est une équation hamiltonienne, c'est-à-dire se met sous la forme particulière (3) pour un certain Hamiltonien* $\tilde{H}$ *qu'on déterminera. Ce Hamiltonien est appelé* Hamiltonien modifié. *Déterminer l'ordre en* h *de la différence* $\tilde{H} - H$.

Question 1.17 *L'objet de cette dernière question*[3] *est de comprendre la conservation du Hamiltonien* H *par le schéma de Verlet. Supposons que l'on sache que la trajectoire* (p_n, q_n) *est uniformément bornée en* n *sur l'intervalle de temps sur lequel on travaille. En utilisant l'équation originale (3), l'équation modifiée (15), le schéma (8), et les conclusions des questions précédentes, montrer que le Hamiltonien* H *est conservé, à ordre égal, sur des temps plus longs, que ce que ne prévoyait l'étude de la Question 1.9.*

2 Problème 2 : Formulation Eléments finis stabilisés pour l'équation d'advection-diffusion

On s'intéresse dans ce problème à la résolution par méthode d'éléments finis de l'équation d'advection diffusion stationnaire

$$-\eta\, \Delta u(x) + b(x)\,.\,\nabla u(x) = f(x) \tag{17}$$

posée sur un domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. La fonction b est supposée continue de $\bar{\Omega}$ dans $\mathbb{R}^2$. Le second membre f est défini de Ω dans $\mathbb{R}^2$ et appartient à $L^2(\Omega)$. Ces deux fonctions sont supposés fixées et connues. La fonction inconnue u est à valeurs scalaires et est supposée vérifier la condition au bord $u = 0$ sur le bord $\partial\Omega$ du domaine Ω. La constante η est strictement positive. La première section du problème s'intéresse à des cas simples où le problème est facilement résoluble avec les outils du cours[4]. La suite du problème s'intéresse à un cas plus difficile.

2.1 Cas simple

Question 2.1 *Etablir la formulation variationnelle de l'équation (17) sous la forme :* Trouver $u \in H_0^1(\Omega)$ tel que

$$a(u,v) = \mathcal{L}(v), \quad \forall v \in H_0^1(\Omega) \tag{18}$$

Si on suppose

$$\operatorname{div} b = 0, \tag{19}$$

au sens faible, montrer que cette formulation variationnelle (18) est bien posée (c'est-à-dire admet une solution, unique).

[2] De nouveau, la détermination de α et β est sans difficulté, purement calculatoire, et non nécessaire pour poursuivre

[3] Cette question finale est plus dure et rapportera des points de bonus

[4] La plupart des questions de cette section sont donc essentiellement des applications immédiates du cours

Question 2.2 *Donner une condition sur* $\operatorname{div} b$*, généralisant la condition (19), qui permette aussi de démontrer avec les outils du cours que la formulation variationnelle de (17) est bien posée.*

Question 2.3 *Donner une condition sur la valeur de la constante* C *(en fonction des données du problème et notamment de la constante de l'inégalité de Poincaré) pour que la condition*

$$\|b\|_{\sup} := \sup_{x \in \bar{\Omega}} |b(x)| \leq C, \tag{20}$$

où $|\cdot|$ *désigne la norme dans* $\mathbb{R}^2$*, permette, indépendamment de toute hypothèse sur* $\operatorname{div} b$*, de démontrer, encore avec les outils du cours, que la formulation variationnelle est bien posée.*

On se place désormais, et pour toute la suite du problème, sous l'hypothèse (19).

Question 2.4 *Expliquez brièvement comment vous pouvez établir l'approximation du problème par méthodes d'éléments finis* $P1$*. On écrira la formulation variationnelle discrète et on expliquera pourquoi sa solution* u_h *existe, dans un espace de dimension finie* $X_h \subset H^1_0(\Omega)$ *et de manière unique. On dira aussi brièvement comment on détermine* u_h *en pratique.*

Question 2.5 *Rappelez pourquoi, avec le cours, on sait que la qualité de l'approximation est donnée par une inégalité du type*

$$\|u - u_h\|_{H^1(\Omega)} \leq C^* \inf_{v_h \in X_h} \|u - v_h\|_{H^1(\Omega)} \tag{21}$$

Comment la constante C^* *dépend elle des caractéristiques de la forme bilinéaire* a *du problème (18) ? Comment ensuite conclut-on pour montrer que* $u_h \longrightarrow u$ *quand* $h \longrightarrow 0$ *avec un certain taux de convergence en* h *lorsque la solution exacte* u *est assez régulière ?*

Question 2.6 *Comment s'expriment la constante de continuité* M *et la constante de coercivité* ν *de la forme bilinéaire* a *de (18) en fonction des paramètres* η*, et* $\|b\|_{\sup}$ *du problème et de la constante de Poincaré du domaine* Ω *? En déduire que si* $\|b\|_{\sup}$ *est grand devant* η*, la constante* C^* *de l'inégalité (21) est grande devant 1. Commentez. Si l'équation (17) modélise l'évolution de la grandeur* u *par diffusion et convection par un fluide de vitesse* b*, à quel cadre physique correspond ce régime de paramètre ?*

La suite de ce problème s'intéresse à un cas où l'estimation (21), bien que évidemment correcte, ne renseigne pas beaucoup sur la qualité réelle de l'approximation parce que l'on se trouve dans la situation décrite à la Question 2.6.

2.2 Etude préparatoire

On considère un maillage régulier τ_h de Ω, formés de triangles K, de diamètre h_K, et l'espace d'éléments finis $P1$ associé à l'approximation de l'espace $H^1_0(\Omega)$ sur ce maillage. Ceci forme l'espace d'approximation X_h. Dans la suite, on supposera (pour simplifier) que tous les diamètres h_K, $K \in \tau_h$, sont en fait identiques et égaux à un pas de maillage h.

On suppose que la fonction $b(x)$ vérifie $|b(x)| \geq c_0 > 0$ pour presque tout $x \in \Omega$ pour une constante $c_0 > 0$, et on rappelle que, puisque le second membre de (17) est dans $L^2(\Omega)$, la solution exacte u est, d'après le cours, une fonction dans $H^2(\Omega)$.

Dans cette section, on va refaire une étude d'erreur pour la formulation habituelle (18), mais de manière un peu différente de celle du cours. Pour cela, nous allons avoir besoin d'admettre que, sous de bonnes conditions, le maillage et l'espace d'éléments finis que nous employons vérifient :

$$\|u - r_h u\|_{L^2(K)} + h\,\|\nabla(u - r_h u)\|_{L^2(K)} + h^2\,\left\|D^2(u - r_h u)\right\|_{L^2(K)} \leq C\,h^2\,\|u\|_{H^2(K)}\ , \tag{22}$$

où D^2 désigne la matrice hessienne des dérivées partielles d'ordre deux. On a supposé $u \in H^2$, et $r_h u$ désigne l'interpolée $r_h u$ dans l'espace d'éléments finis $P1$ utilisés, conformément à la Définition 6.2.4 du cours.

Question 2.7 *Rappelez ce qui est connu par le cours sur la convergence de $r_h u$ vers u quand $h \longrightarrow 0$. Montrer l'égalité*

$$a(e_h, e_h) = -a(\pi_h, e_h). \tag{23}$$

où on a noté $e_h = u_h - r_h u$ et $\pi_h = r_h u - u$.

Question 2.8 *Démontrer que*

$$\int_\Omega |\nabla e_h|^2 \leq \int_\Omega |\nabla e_h|\,|\nabla \pi_h| + \frac{\|b\|_{\text{sup}}}{\eta}\int_\Omega |\nabla e_h|\,|\pi_h| \tag{24}$$

En utilisant l'inégalité (22) (et par exemple l'inégalité algébrique $|ab| \leq \frac{1}{4}a^2 + b^2$, qu'on démontrera), déduire de (24) l'estimation de l'erreur e_h suivante, pour une certaine constante C indépendante de h, b, η, u,

$$\|\nabla e_h\|_{L^2} \leq C\sqrt{1 + \frac{\|b\|_{\text{sup}}^2\,h^2}{\eta^2}}\ \|u\|_{H^2(\Omega)}\ h \tag{25}$$

Quand $\|b\|_{\text{sup}}\,h$ est grand devant η, l'estimation (25) n'est pas très bonne. La suite du problème montre une façon de traiter cette difficulté.

2.3 Formulation stabilisée

Puisque l'estimée (25) n'est pas très bonne quand $\|b\|_{\text{sup}}\,h >> \eta$, on va changer de formulation pour le problème. On suppose :

$$|b(x)|\,h > \eta, \quad \forall x \in \Omega, \tag{26}$$

et on considère la forme bilinéaire

$$a_h(v_h, w_h) = a(v_h, w_h) + \sum_{K\in\tau_h}\int_K \tau\,(-\eta\,\Delta v_h + b\,.\,\nabla v_h)\,(\eta\,\Delta w_h + b\,.\,\nabla w_h)\,, \tag{27}$$

et la forme linéaire

$$\mathcal{L}_h(w_h) = \mathcal{L}(w_h) + \sum_{K\in\tau_h}\int_K \tau\,f\,(\eta\,\Delta w_h + b\,.\,\nabla w_h)\,. \tag{28}$$

Dans ces formules, τ est une fonction définie par

$$\tau(x) = \frac{h}{|b(x)|}. \tag{29}$$

Question 2.9 *Montrer que la forme bilinéaire (27) et la forme linéaire (28) sont définies de manière rigoureuse sur l'espace d'élements finis X_h. Quelles expressions simplifiées admettent-elles, vu les éléments finis considérés ? Montrer qu'on peut de même considérer rigoureusement la quantité $a_h(u, v_h)$ où u est la solution exacte de (17) et v_h un élément quelconque de X_h. Montrer que $a_h(u, v_h) = \mathcal{L}_h(v_h)$ pour $v_h \in X_h$. Pour cette raison, on appelle l'approximation (30) ci-dessous une approximation fortement consistante de (18).*

On va maintenant étudier la formulation variationnelle : *Trouver $u_h \in X_h$ tel que*

$$a_h(u_h, v_h) = \mathcal{L}_h(v_h), \quad \forall v_h \in X_h. \tag{30}$$

Question 2.10 *Montrer que la forme bilinéaire a_h est bicontinue et coercive sur X_h, la forme linéaire $\mathcal{L}_h$ est continue sur X_h et la formulation variationnelle (30) est bien posée.*

Question 2.11 *En procédant de manière similaire à la Question 2.7, montrer l'égalité*

$$a_h(e_h, e_h) = -a_h(\pi_h, e_h). \tag{31}$$

où on a encore noté $e_h = u_h - r_h u$ et $\pi_h = r_h u - u$ (avec u_h la solution de (30)).

Question 2.12 *Montrer l'inégalité*

$$\eta \int_\Omega |\nabla e_h|^2 + \int_\Omega \tau |b \,.\, \nabla e_h|^2 \le \eta \int_\Omega |\nabla \pi_h| \, |\nabla e_h| + \left| \int_\Omega b \,.\, \nabla \pi_h \, e_h \right| + \sum_{K \in \tau_h} \left| \int_K \tau \left(-\eta \Delta \pi_h + b \,.\, \nabla \pi_h\right) \left(b \,.\, \nabla e_h\right) \right| \tag{32}$$

En estimant chaque terme du membre de droite de cette inégalité, montrer l'estimation[5]

$$\|\nabla e_h\|_{L^2(\Omega)} \le C \sqrt{1 + \frac{\|b\|_{\sup} \, h}{\eta}} \, \|u\|_{H^2(\Omega)} \, h \tag{33}$$

Question 2.13 *En comparant les estimations (25) et (33), commenter l'intérêt de l'approche employée.*

FIN//

[5]Cette question est plus dure et rapportera des points de bonus

Eléments de corrigé

Problème 1 : Schémas d'intégration en temps long pour les équations différentielles

1.1. Plusieurs formulations équivalentes

Réponse à la Question 1.1 On introduit la variable $p = \dot{q}$. Comme on veut $\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}(p,q)$, il suffit donc que $H(p,q) = \frac{1}{2}p^2 + W(q)$. Maintenant, comme $p = \dot{q}$, (1) s'écrit $\dot{p} = -V'(q)$. Comme on veut $\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}(p,q)$, i.e. $\dot{p} = -W'(q)$, on a donc $W = V$ (à une constante additive près qu'on peut toujours prendre nulle). Le Hamiltonien est donc $H(p,q) = \frac{1}{2}p^2 + V(q)$. ♢

Réponse à la Question 1.2 On calcule facilement

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} H(p(t),q(t)) &= \frac{\partial H}{\partial p}(p(t),q(t))\,\dot{p}(t) + \frac{\partial H}{\partial q}(p(t),q(t))\,\dot{q}(t) \\
&= -\frac{\partial H}{\partial p}(p(t),q(t))\,\frac{\partial H}{\partial q}(p(t),q(t)) + \frac{\partial H}{\partial q}(p(t),q(t))\,\frac{\partial H}{\partial p}(p(t),q(t)) = 0,
\end{aligned}$$

d'après (3). Le Hamiltonien H est l'énergie mécanique, somme de l'énergie cinétique $p^2/2$ et de l'énergie potentielle $V(q)$. Physiquement, $\frac{d}{dt}H(p(t),q(t)) = 0$ exprime la conservation de l'énergie mécanique d'un système isolé. ♢

Réponse à la Question 1.3 On exprime la variation élémentaire de $S\left(\{q(t)\}_{t\in[0,T]}\right)$ sous une perturbation $\psi(t)$ telle que $\psi(0) = 0$ et $\psi(T) = 0$ (pour que $q + \psi$ vérifie les conditions aux bords) :

$$\begin{aligned}
& S\left(\{q+\psi(t)\}_{t\in[0,T]}\right) - S\left(\{q(t)\}_{t\in[0,T]}\right) \\
= & \int_0^T L(\dot{q}(t)+\dot{\psi}(t), q(t)+\psi(t))\,dt - \int_0^T L(\dot{q}(t),q(t))\,dt \\
= & \int_0^T \Big(\dot{q}(t)\,\dot{\psi}(t) - V'(q(t))\,\psi(t)\Big)\,dt + \int_0^T \left(\frac{1}{2}\dot{\psi}(t)^2 - (V(q(t)+\psi(t)) - V(q(t)) - V'(q(t)\psi(t)))\right)dt,
\end{aligned}$$

où le premier terme est linéaire (et continu) en la fonction ψ et le second est quadratique. Le premier terme est donc la dérivée première de S. La condition d'optimalité s'écrit

$$\int_0^T \Big(\dot{q}(t)\,\dot{\psi}(t) - V'(q(t))\,\psi(t)\Big)\,dt = 0, \quad \forall \psi, \quad \text{tel que} \quad \psi(0) = \psi(T) = 0.$$

En intégrant par parties et en utilisant la nullité de ψ au bord, on obtient :

$$\int_0^T \left(-\ddot{q}(t) - V'(q(t))\,\psi(t)\right)\,dt = 0, \quad \forall \psi, \quad \text{tel que} \quad \psi(0) = \psi(T) = 0,$$

ce qui donne l'équation d'optimalité

$$-\ddot{q}(t) = V'(q(t)), \quad q(0) = \bar{q}_0, \quad q(T) = \bar{q}_T. \tag{34}$$

On reconnaît l'équation de Newton (1). ♢

Réponse à la Question 1.4 Le problème variationnel discret s'écrit :

$$\inf\left\{ S(q_0,q_1,\ldots,q_{N-1},q_N) = \sum_{n=0}^{N-1} h\left[\frac{1}{2}\left(\frac{q_{n+1}-q_n}{h}\right)^2 - V(q_n)\right], \quad q_0 = \bar{q}_0,\, q_N = \bar{q}_T \right\}.$$

L'optimalité de $(q_0, q_1, \ldots, q_{N-1}, q_N)$ sous la contrainte $q_0 = \bar{q}_0$, $q_N = \bar{q}_T$ s'écrit, pour $1 \le i \le N-1$:

$$\frac{\partial}{\partial q_i} S(q_0, q_1, \ldots, q_{N-1}, q_N) = 0,$$

c'est-à-dire

$$\left\{ \begin{array}{l} -\dfrac{q_{i+1} - 2q_i + q_{i-1}}{h^2} - V'(q_i) = 0, \quad 1 \le i \le N-1 \\ \\ q_0 = \bar{q}_0, \, q_N = \bar{q}_T. \end{array} \right. \tag{35}$$

Il s'agit du schéma aux différences centrées d'ordre 2 pour la résolution de $\ddot{q} = -V'(q)$ sur le segment $[0, T]$ avec les conditions aux bords de Dirichlet $q(0) = \bar{q}_0, \quad q(T) = \bar{q}_T$. ♢

Réponse à la Question 1.5 L'obstruction majeure est que, dans la pratique, *on ne connaît pas* la position finale $\bar{q}_T$. En revanche, on connaıt le plus souvent la vitesse initiale $\bar{p}_0$, en plus de la position initiale $\bar{q}_0$. Il faut donc trouver une reformulation du problème qui permette, comme pour l'équation de Newton (1), d'utiliser cette condition initiale en vitesse *au lieu de* la condition finale en position $\bar{q}_T$. Il existe une stratégie directe pour cela à partir de la formulation du problème (6), mais ce n'est pas l'objet de ce problème. On va prendre dans la suite une voie alternative, qui conduit au même résultat en pratique. ♢

1.2. Propriétés du schéma de Verlet

Réponse à la Question 1.6

Calculons :

$$\begin{array}{rcl} q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1} & = & (q_{n+1} - q_n) - (q_n - q_{n-1}), \\ & = & \left(h\, p_n - \dfrac{h^2}{2} V'(q_n) \right) - \left(h\, p_{n-1} - \dfrac{h^2}{2} V'(q_{n-1}) \right), \\ & = & h(p_n - p_{n-1}) - \dfrac{h^2}{2} (V'(q_n) - V'(q_{n-1})), \\ & = & -\dfrac{h^2}{2} (V'(q_n) + V'(q_{n-1})) - \dfrac{h^2}{2} (V'(q_n) - V'(q_{n-1})), \\ & = & -h^2\, V'(q_n). \end{array}$$

On retrouve le schéma (35) trouvé à la Question 1.4. ♢

Réponse à la Question 1.7 Les réponses sont immédiates :

– a - Le schéma (8) est explicite : on détermine q_{n+1} avec la première ligne et la donnée de (q_n, p_n), puis on en déduit p_{n+1}, avec la deuxième ligne.

– b - En changeant h en $-h$, et en échangeant n et $n+1$, (8) s'écrit

$$\left\{ \begin{array}{rcl} q_n & = & q_{n+1} - h\, p_{n+1} - \frac{h^2}{2} V'(q_{n+1}), \\ p_n & = & p_{n+1} + \frac{h}{2} (V'(q_{n+1}) + V'(q_n)) \end{array} \right.$$

La deuxième ligne est exactement $p_{n+1} = p_n - \frac{h}{2} (V'(q_n) + V'(q_{n+1}))$ donc est identique à la deuxième ligne de (8). La première ligne s'écrit alors $q_n = q_{n+1} - h \left[p_n - \frac{h}{2} (V'(q_n) + V'(q_{n+1})) \right] - \frac{h^2}{2} V'(q_{n+1})$ et redonne donc la première ligne de (8). Le schéma est donc symétrique.

– c - En posant $p_{n+1/2} = p_n - \frac{h}{2} V'(q_n)$, on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} q_{n+1} & = & q_n + h\, p_{n+1/2}, \\ p_{n+1/2} & = & p_{n-1/2} - h\, V'(q_n). \end{array} \right.$$

– d - Cette forme est plus intuitive que (8). En calculant la vitesse *au demi-pas de temps*, on trouve un schéma aux différences finies d'ordre 1 sur position et vitesse, bâti à partir de (3) de manière immédiate. ♢

Réponse à la Question 1.8 On injecte dans le schéma (8) la solution exacte $(p(t), q(t))$, évaluée aux instants $t_n = nh$. Comme, à des ordres supérieurs en h près,

$$\begin{aligned} q((n+1)\,h) &= q(n\,h) + h\,\dot{q}(n\,h) + \frac{h^2}{2}\,\ddot{q}(n\,h) + \frac{h^3}{6}\,q^{(3)}(n\,h), \\ &= q(n\,h) + h\,p(n\,h) - \frac{h^2}{2}\,V'(q(n\,h)) + \frac{h^3}{6}\,q^{(3)}(n\,h), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p((n+1)\,h) &= p(n\,h) + h\,\dot{p}(n\,h) + \frac{h^2}{2}\,\ddot{p}(n\,h), \\ &= p(n\,h) - h\,V'(q(n\,h)) + \frac{h^2}{2}\,\ddot{p}(n\,h), \\ &= p(n\,h) - h\,V'(q(n\,h)) - \frac{h^2}{2}\,V''(q(n\,h))\,p(n\,h), \end{aligned}$$

on a $q((n+1)\,h) - q(n\,h) - h\,p(n\,h) + \frac{h^2}{2}\,V'(q(n\,h)) = O(h^3)$, et

$$\begin{aligned} & p((n+1)\,h) - p(n\,h) + \frac{h}{2}\,\left(V'(q(n\,h)) + V'(q((n+1)\,h))\right) \\ & \quad = -\frac{h}{2}\,V'(q(n\,h)) - \frac{h^2}{2}\,V''(q(n\,h))\,p(n\,h) + \frac{h}{2}\left[V'(q(n\,h)) + V''(q(n\,h))\left(h\,p(n\,h) + O(h^2)\right)\right] \\ & \quad = 0(h^3). \end{aligned}$$

Après division par h, on trouve donc que le schéma (8) est, pour l'approximation du système (3), précis à l'ordre 2 en position q et en vitesse p. ♢

Réponse à la Question 1.9 Partant de $(p(n\,h), q(n\,h)) = (p_n, q_n)$, on a, si on suit la dynamique exacte, $H(p((n+1)\,h), q((n+1)\,h)) = H(p_n, q_n)$, car le Hamiltonien est conservé par cette dynamique exacte (cf. la Question 1.2). Par ailleurs, si (p_n, q_n) évolue suivant le schéma numérique (8), on a $p_{n+1} - p((n+1)\,h) = O(h^3)$ et $q_{n+1} - q((n+1)\,h) = O(h^3)$ d'après la Question 1.8. Donc

$$\begin{aligned} H(p_{n+1}, q_{n+1}) &= \frac{1}{2}p_{n+1}^2 + V(q_{n+1}) \\ &= \frac{1}{2}\,\left(p((n+1)\,h) + O(h^3)\right)^2 + V\,\left(q((n+1)\,h) + O(h^3)\right) \\ &= H(p((n+1)\,h), q((n+1)\,h)) + O(h^3). \end{aligned}$$

Le Hamiltonien est donc conservé sur un pas de temps h à l'ordre $O(h^3)$ près. Sur un intervalle de temps $[0, T]$ comportant $\frac{T}{h}$ tels pas de temps, la conservation est donc au mieux à $O(Th^2)$ près. ♢

Réponse à la Question 1.10 On considère le potentiel $V(q) = \frac{1}{2}\omega^2 q^2$.

– a - Le système physique modélisé par (1) est alors l'oscillateur harmonique monodimensionnel.

– b - Le schéma s'écrit, dans ce cas particulier :

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= (1 - \frac{1}{2}h^2\omega^2)p_n - h\omega^2(1 - \frac{1}{4}h^2\omega^2)q_n, \\ q_{n+1} &= h\,p_n + (1 - \frac{1}{2}h^2\omega^2)q_n. \end{aligned}$$

Comme tous les termes du Hamiltonien sont quadratiques, la différence $\overline{H}(p_{n+1}, q_{n+1}) - \overline{H}(p_n, q_n)$ est un polynôme comportant uniquement des termes en p_n^2, q_n^2, $p_n q_n$. Pour avoir cette différence nulle, les trois coefficients de p_n^2, q_n^2, $p_n q_n$ doivent être identiquement nuls. On vérifie alors que $\alpha = \frac{1}{4}$ est nécessaire et suffisant (on peut par exemple identifier α avec la condition de nullité du coefficient de $p_n q_n$ et verifier qu'il annule aussi les deux autres coefficients).

– c - La conservation de $\overline{H}$ entraîne que pour tout n,

$$\overline{H}(p_n, q_n) = \frac{1}{2}p_n^2 + \frac{1}{2}(1 - \alpha\, h^2\omega^2)\omega^2 q_n^2 = \overline{H}(p_0, q_0).$$

On a donc en particulier $\frac{1}{2}(1 - \alpha\, h^2\omega^2)\omega^2 q_n^2 \leq \overline{H}(p_0, q_0)$ d'où on déduit que par exemple pour $h \leq \frac{1}{\sqrt{2}}\omega^{-1}\alpha^{-1/2}$, on a $q_n^2 \leq 4\,\overline{H}(p_0, q_0)\,\omega^{-2}$.

– d - Comme $\overline{H}(p_n, q_n) = \frac{1}{2}p_n^2 + \frac{1}{2}(1 - \alpha\, h^2\omega^2)\omega^2 q_n^2 = \overline{H}(p_0, q_0)$ pour tout n, on a

$$H(p_n, q_n) - H(p_0, q_0) = H(p_n, q_n) - \overline{H}(p_n, q_n) + \overline{H}(p_0, q_0) - H(p_0, q_0) = \frac{1}{2}\alpha\, h^2\omega^4\,(q_n^2 - q_0^2),$$

et donc, vu la borne précédente sur q_n,

$$|H(p_n, q_n) - H(p_0, q_0)| = O(h^2)$$

où la borne ne dépend pas de n.

– e - Ceci est une propriété très remarquable, puisque *aussi grand soit* n, il n'y a pas plus de $O(h^2)$ d'écart. Il n'y a pas de dégradation avec le temps. C'est évidemment bien mieux que la borne obtenue à la Question précédente, qui dépend de la longueur de l'intervalle de temps. ♢

Réponse à la Question 1.11

– a - On a, par changement de variables,

$$\int_{\mathcal{D}_t} dy = \int_{\mathcal{D}_0} \left|\det \frac{\partial y}{\partial y_0}\right| dy_0. \tag{36}$$

Pour $t \geq 0$ proche de 0 (mais on pourrait faire ce raisonnement à tout instant, l'instant $t = 0$ ne jouant pas de rôle particulier), on a $y(t) = y(0) + t\,\dot{y}(0) + o(t) = y_0 + t\,f(y_0) + o(t)$, donc $\dfrac{\partial y}{\partial y_0}(t) = \text{Id } + t\,\nabla f(y_0) + o(t)$ et donc

$$det\, \frac{\partial y}{\partial y_0}\bigg|_{t=0} = \det(\text{Id } + t\nabla f(y_0)) + o(t) = 1 + t\,\text{div}\, f(y_0) + o(t).$$

On a donc obtenu (ce qu'on pouvait aussi avoir par un calcul plus direct) $\dfrac{d}{dt}\bigg|_{t=0} \det \dfrac{\partial y}{\partial y_0} = \text{div} f(y_0)$, et donc

$$\frac{d}{dt}\bigg|_{t=0} \int_{\mathcal{D}_t} dy = \int_{\mathcal{D}_0} \text{div} f(y_0)\, dy_0.$$

Cette dérivée en temps est donc nulle (et de même que la dérivée en tout temps) dès que $\text{div} f = 0$. Il y a alors conservation du volume de $\mathcal{D}_t$ au cours du temps. Il s'agit bien sûr de la même condition formelle que la condition d'*incompressibilité* en mécanique des fluides, qui donne aussi la conservation du volume de fluide au cours de l'évolution.

– b- Pour le système (3), on a $f = \begin{pmatrix} -\frac{\partial H}{\partial q} \\ \frac{\partial H}{\partial p} \end{pmatrix}$ et donc $\text{div} f = -\dfrac{\partial}{\partial p}\dfrac{\partial H}{\partial q} + \dfrac{\partial}{\partial q}\dfrac{\partial H}{\partial p} = 0.$ ♢

Réponse à la Question 1.12 On calcule la matrice des dérivées premières :

$$\frac{\partial(p_{n+1}, q_{n+1})}{\partial(p_n, q_n)} = \left(\begin{array}{cc} 1 - \dfrac{h^2}{2} V''(q_{n+1}) & h \\ -\dfrac{h}{2} V''(q_{n+1}) + \dfrac{h^3}{4} V''(q_{n+1}) V''(q_n) - \dfrac{h}{2} V''(q_n) & 1 - \dfrac{h^2}{2} V''(q_n) \end{array} \right)$$

On remarque que son déterminant (le Jacobien de la transformation de (p_n, q_n) en (p_{n+1}, q_{n+1})) vaut exactement :

$$\left(1 - \frac{h^2}{2} V''(q_{n+1})\right) \left(1 - \frac{h^2}{2} V''(q_n)\right) - h \left(-\frac{h}{2} V''(q_{n+1}) + \frac{h^3}{4} V''(q_{n+1}) V''(q_n) - \frac{h}{2} V''(q_n)\right) = 1.$$

En insérant cela dans le raisonnement de la question précédente, formule (36), on voit que cela impose la conservation du volume. Cette propriété est indépendante du nombre de pas de temps. De nouveau, si on cherche, à partir de la précision du schéma, à calculer la variation du volume, on ne parviendra qu'à une conservation *approchée*, exacte à un certain ordre $O(h^p)$ près, et qui se déteriorera pour un grand nombre de pas de temps (par exemple pour $O(h^{-p})$ pas de temps), l'information est, au mieux, la conservation à $O(1)$ près, ce qui est inutile. ♢

1.3. Notion d'équation modifiée et conséquences

Réponse à la Question 1.13 Sous réserve de la régularité suffisante (qu'on suppose dans tout ce problème), on a :

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + h\,\dot{y}(t_n) + \frac{1}{2} h^2\, \ddot{y}(t_n) + O(h^3) = y_n + h\, f(y_n) + \frac{1}{2} h^2\, f'(y_n)\, f(y_n) + O(h^3)$$

puisque $\ddot{y} = f'(y)\,\dot{y} = f'(y)\, f(y)$ en dérivant l'équation (10). Par ailleurs, par le schéma d'Euler (11), $y_{n+1} = y_n + h\, f(y_n)$, donc $y(t_{n+1}) - y_{n+1} = \frac{1}{2} h^2\, f'(y_n)\, f(y_n) + O(h^3)$, i.e. $a_n = f'(y_n)\, f(y_n)$. ♢

Réponse à la Question 1.14

On a

$$\tilde{y}(t_{n+1}) = \tilde{y}(t_n) + h\,\dot{\tilde{y}}(t_n) + \frac{1}{2} h^2\, \ddot{\tilde{y}}(t_n) + O(h^3) = y_n + h\, \left[f(y_n) - \lambda\, h\, f'(y_n)\, f(y_n)\right] + \frac{1}{2} h^2\, f'(y_n)\, f(y_n) + O(h^3).$$

Pour $\lambda = \frac{1}{2}$, on a donc bien (14), i.e. $\tilde{y}(t_{n+1}) - y_{n+1} = O(h^3)$. La trajectoire numérique y_n étant plus proche de la solution exacte $\tilde{y}$ de l'équation modifiée (13) que de la solution exacte de l'équation originale (10), on peut espérer, en étudiant (13), comprendre mieux les propriétés du schéma (11). C'est ce qui va se passer dans la suite. ♢

Réponse à la Question 1.15 Pour déterminer l'équation modifiée pour le schéma de Verlet (8) et l'équation (3), on procède comme à la Question 1.14. En injectant la forme (15)-(16), et après calculs, on trouve que

$$\alpha = \frac{1}{6}, \quad \beta = \frac{1}{12}.$$

La nullité du terme impair (d'ordre 1) en h est en fait lié à la symétrie du schéma, mais l'énoncé ne demandait pas une preuve rigoureuse de ceci. ♢

Réponse à la Question 1.16 On remarque facilement que le terme du deuxième ordre

$$f_2(q, p) = \left(\begin{array}{c} \beta\, V''(q)\, V'(q) - \frac{\alpha}{2}\, V^{(3)}(q)\, p^2 \\ \alpha\, V''(q) p \end{array} \right)$$

se met sous la forme $\begin{pmatrix} -\frac{\partial K}{\partial q} \\ \frac{\partial K}{\partial p} \end{pmatrix}$ pour la fonction $K = \frac{\alpha}{2}\, V''(q)\, p^2 - \frac{\beta}{2}\, (V'(q))^2$. Il s'ensuit que l'équation modifiée (15) est une équation hamiltonienne, c'est-à-dire se met sous la forme (3) pour

$$\tilde{H} = H + h^2 \left[\frac{\alpha}{2}\, V''(q)\, p^2 - \frac{\beta}{2}\, (V'(q))^2 \right].$$

La différence $\tilde{H} - H$ est évidemment d'ordre 2 en h. $\diamondsuit$

Réponse à la Question 1.17 On sait que :
- le Hamiltonien modifié $\tilde{H}$ est exactement conservé par l'équation modifiée (15)
- le Hamiltonien H est exactement conservé par l'équation originale (3)
- la différence $\tilde{H} - H$ est d'ordre 2 en h

On va utiliser ces trois propriétés. Pour n quelconque, on note $y_n = (p_n, q_n)$ et on décompose :

$$\begin{array}{rcl} H(y_n) - H(y_0) & = & [H(y_n) - H(\tilde{y}_n)] + \left[H(\tilde{y}_n) - \tilde{H}(\tilde{y}_n)\right] + \left[\tilde{H}(\tilde{y}_n) - \tilde{H}(\tilde{y}_0)\right] + \left[\tilde{H}(\tilde{y}_0) - H(y_0)\right], \\ & = & (A) \qquad + \qquad (B) \qquad + \qquad (C) \qquad + \qquad (D) \end{array}$$

A cause de la Question 1.16, on sait que $(B) = O(h^2)$, indépendamment de n, si l'on admet que la trajectoire est bornée. D'autre part, le terme (C) est clairement nul, car le Hamiltonien modifié $\tilde{H}$ est exactement conservé par l'équation modifiée (15). Aussi, comme $\tilde{y}_0 = y_0$ et la différence $\tilde{H} - H$ est d'ordre 2 en h, on a $(D) = O(h^2)$. Reste le premier terme, (A). Il est en fait le seul sensible à l'accumulation des erreurs numériques au cours des pas de temps. Par régularité (en fait le caractère Lipschitz) du Hamiltonien H, on a $(A) \leq \|H\|_{Lip}\, |y_n - \tilde{y}_n| \leq O(T\, h^p)$, où p est lié à l'ordre avec lequel l'équation modifiée approche l'équation exacte. Ici, $p = 4$. On peut, sous réserve de la régularité des fonctions en jeu (ici le potentiel V), pousser cet ordre aussi loin que voulu. On en déduit que $H(y_n) - H(y_0) = O(T\, h^p + h^2)$, ce qui est une estimée meilleure que celle obtenue juste avec la précision du schéma. $\diamondsuit$

Problème 2 : Formulation Eléments finis stabilisés pour l'équation d'advection-diffusion

2.1. Cas simple

Réponse à la Question 2.1 Il est immédiat, en procédant comme dans le cours, d'établir la formulation variationnelle de l'équation (17) sous la forme (18), avec :

$$a(u, v) = \eta \int_\Omega \nabla u(x) \,.\, \nabla v(x)\, dx + \int_\Omega b(x) \,.\, \nabla u(x)\, v(x)\, dx, \quad \mathcal{L}(v) = \int_\Omega f(x)\, v(x)\, dx.$$

La forme bilinéaire a est bi-continue sur $H^1_0(\Omega)$ car

$$\begin{array}{rcl} |a(u,v)| & \leq & \eta \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)} + \|b\|\mathrm{sup} \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} \|v\|_{L^2(\Omega)} \\ & \leq & \max(\eta, \|b\|\mathrm{sup})\, \|u\|_{H^1(\Omega)}\, \|v\|_{H^1(\Omega)} \end{array} \qquad (37)$$

en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz et le caractère borné de b. On remarque alors

$$\int_\Omega b(x) \,.\, \nabla u(x)\, u(x)\, dx = \frac{1}{2} \int_\Omega b(x) \,.\, \nabla \left(u^2(x)\right)\, dx = -\frac{1}{2} \int_\Omega \mathrm{div}\, b(x)\, u^2(x)\, dx = 0, \qquad (38)$$

par intégration par parties, nullité du terme de bord et à cause de l'hypothèse (19). On en déduit que, à cause de l'inégalité de Poincaré $\|u\|^2_{L^2(\Omega)} \leq C_P \, \|\nabla u\|^2_{L^2(\Omega)}$,

$$a(u,u) = \eta \|\nabla u\|^2_{L^2(\Omega)} \geq \eta \, \frac{C_P}{1+C_P} \, \|u\|^2_{H^1(\Omega)}, \tag{39}$$

et la coercivité de a en découle. De son côté, la forme linéaire $\mathcal{L}$ est évidemment continue sur $H^1_0(\Omega)$, par application de l'inégalité de Cauchy-Schwarz. Par application du Lemme de Lax-Milgram (notez que a n'est pas symétrique en (u,v) mais ce n'est pas requis), la formulation variationnelle (18) est donc bien posée. $\diamondsuit$

Réponse à la Question 2.2 Sur le calcul (38) ci-dessus, on voit que si on n'a plus (19), on peut écrire :

$$\left| \int_\Omega b(x) \, . \, \nabla u(x) \, u(x) \, dx \right| = \ldots = \frac{1}{2} \left| \int_\Omega \operatorname{div} b(x) \, u^2(x) \, dx \right| \leq \frac{1}{2} \, \|\operatorname{div} b\|_{L^\infty} \, \|u\|^2_{L^2(\Omega)}, \tag{40}$$

donc, en utilisant l'inégalité de Poincaré,

$$a(u,u) \geq \eta \|\nabla u\|^2_{L^2(\Omega)} - \frac{1}{2} \, \|\operatorname{div} b\|_{L^\infty} \, \|u\|^2_{L^2(\Omega)} \geq c_0 \, \|u\|^2_{H^1(\Omega)},$$

pour une certaine constante $c_0 > 0$ dès que $\|\operatorname{div} b\|_{L^\infty}$ est assez petite. Le raisonnement se continue par ailleurs sans changement. On pourrait d'ailleurs aussi traiter le cas où $\operatorname{div} b(x) \leq 0$ et $\operatorname{div} b(x)$ est dans L^∞, avec $\|\operatorname{div} b\|_{L^\infty}$ quelconque. $\diamondsuit$

Réponse à la Question 2.3 On considère de nouveau l'intégrale $\int_\Omega b(x) \, . \, \nabla u(x) \, u(x) \, dx$, comme dans le calcul (38), mais cette fois, puisqu'on ne dispose plus de contrôle sur $\operatorname{div} b$, on n'intègre pas par parties et on procède comme suit :

$$\left| \int_\Omega b(x) \, . \, \nabla u(x) \, u(x) \, dx \right| \leq \|b\|_{\sup} \, \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} \, \|u\|_{L^2(\Omega)},$$

ce qui entraîne

$$a(u,u) \geq \eta \|\nabla u\|^2_{L^2(\Omega)} - \|b\|_{\sup} \, \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} \, \|u\|_{L^2(\Omega)} \geq \, C_P \, \frac{\eta - \sqrt{C_p} \|b\|_{\sup}}{1+C_P} \, \|u\|^2_{H^1(\Omega)},$$

encore par application de l'inégalité de Poincaré $\|u\|^2_{L^2(\Omega)} \leq C_P \, \|\nabla u\|^2_{L^2(\Omega)}$, dès que $\sqrt{C_p} \|b\|_{\sup} < \eta$. On peut donc prendre par exemple $C = \dfrac{\eta}{2 \sqrt{C_p}}$ dans (20) et prouver de même que la formulation variationnelle est bien posée. $\diamondsuit$

Réponse à la Question 2.4 Notons $X_h \subset H^1_0(\Omega)$ l'espace des éléments finis P1, comme dans le cours. La formulation variationnelle discrète s'écrit : Trouver $u_h \in X_h$ tel que

$$a(u_h, v_h) = \mathcal{L}(v_h), \quad \forall v_h \in X_h, \tag{41}$$

où les formes a et $\mathcal{L}$ sont comme dans (18). Cette formulation est bien posée, comme vu en cours. En pratique, cela revient à résoudre un système algébrique linéaire $AU = F$ pour lequel divers algorithmes ont été vus en cours. $\diamondsuit$

Réponse à la Question 2.5 Le lemme de Céa (Lemme 6.1.2. du cours) donne l'estimation (21) pour $C^* = \dfrac{M}{\nu}$ où M est la constante de continuité de la forme bilinéaire a et ν sa constante de coercivité.

On utilise ensuite l'interpolée r_h de la solution exacte pour majorer le membre de droite de (21). Si la solution exacte est assez régulière et sous de bonnes conditions, on peut même contrôler le taux de convergence (voir le Théorème 6.3.16. du cours). $\diamondsuit$

Réponse à la Question 2.6 On vient de le voir, on a $C^* = \dfrac{M}{\nu}$ dans (21). Or, on a vu à la Question 2.1, estimations (37)-(39) que $M = \max(\eta, \|b\|_{\text{sup}})$ et $\nu = \eta \dfrac{C_P}{1+C_P}$. On obtient donc que si $\|b\|_{\text{sup}}$ est grand devant η, $\mathcal{C} = \dfrac{\|b\|_{\text{sup}}}{\eta} \dfrac{1+C_P}{C_P} \geq \dfrac{\|b\|_{\text{sup}}}{\eta}$ est grand dans (21). Donc cette inégalité ne renseigne pas vraiment sur la qualité de l'approximation à h fixé. Ce régime correspond à un écoulement où le phénomène de convection domine largement celui de diffusion. $\diamondsuit$

2.2. Etude préparatoire

Réponse à la Question 2.7 La Proposition 6.3.16 page 127 du cours donne l'estimation connue sur la convergence de $r_h u$ vers u quand $h \longrightarrow 0$. L'égalité (23) s'écrit aussi $a(u - u_h, u_h - r_h u) = 0$ et est obtenue en soustrayant la formulation variationnelle discrète (41) pour u_h et pour u (qui la vérifie aussi) avec la fonction test $v_h = u_h - r_h u$ qui est bien dans X_h. $\diamondsuit$

Réponse à la Question 2.8 Ecrivons (23) en détail :

$$\eta \int_\Omega |\nabla e_h|^2 + \int_\Omega b \,.\, \nabla e_h \, e_h = -\eta \int_\Omega \nabla \pi_h \,.\, \nabla e_h - \int_\Omega b \,.\, \nabla \pi_h \, e_h.$$

Comme à cause de (19) on a à la fois $\int_\Omega b \,.\, \nabla e_h \, e_h = 0$ et $\int_\Omega b \,.\, \nabla \pi_h \, e_h = -\int_\Omega b \,.\, \nabla e_h \, \pi_h$, on obtient

$$\eta \int_\Omega |\nabla e_h|^2 = -\eta \int_\Omega \nabla \pi_h \,.\, \nabla e_h + \int_\Omega b \,.\, \nabla e_h \, \pi_h,$$

donc (24), i.e.

$$\int_\Omega |\nabla e_h|^2 \leq \int_\Omega |\nabla e_h| \, |\nabla \pi_h| + \frac{\|b\|_{\text{sup}}}{\eta} \int_\Omega |\nabla e_h| \, |\pi_h|,$$

en utilisant la borne sur b et l'inégalité de Cauchy-Schwarz.

On poursuit en remarquant d'abord que $|ab| = |(\frac{1}{\sqrt{2}}\, a)\, (\sqrt{2}\, b)| \leq \frac{1}{2} \left((\frac{1}{\sqrt{2}}\, a)^2 + (\sqrt{2}\, b)^2 \right) = \frac{1}{4} a^2 + b^2$. On en déduit, à partir de (24), que :

$$\|\nabla e_h\|_{L^2}^2 \leq \frac{1}{4} \|\nabla e_h\|_{L^2}^2 + \|\nabla \pi_h\|_{L^2}^2 + \frac{1}{4} \|\nabla e_h\|_{L^2}^2 + \frac{\|b\|_{\text{sup}}^2}{\eta^2} \|\pi_h\|_{L^2}^2.$$

Or (22) impose en particulier que $\|\pi_h\|_{L^2} + h\, \|\nabla \pi_h\|_{L^2} \leq C\, h^2\, \|u\|_{H^2}$, donc a fortiori $\|\pi_h\|_{L^2}^2 + h^2\, \|\nabla \pi_h\|_{L^2}^2 \leq C^2\, h^4\, \|u\|_{H^2}^2$. On en déduit :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|\nabla e_h\|_{L^2}^2 \leq h^{-2} \left(h^2 \|\nabla \pi_h\|_{L^2}^2 + \frac{\|b\|_{\text{sup}}^2\, h^2}{\eta^2} \|\pi_h\|_{L^2}^2 \right) \quad &\leq \quad h^{-2} \left(h^2 \|\nabla \pi_h\|_{L^2}^2 + \|\pi_h\|_{L^2}^2 \right) \left(1 + \frac{\|b\|_{\text{sup}}^2\, h^2}{\eta^2} \right) \\ &\leq \quad h^{-2}\, C^2\, h^4\, \|u\|_{H^2}^2 \left(1 + \frac{\|b\|_{\text{sup}}^2\, h^2}{\eta^2} \right) \end{aligned}$$

et on obtient (25). $\diamondsuit$

2.3. Formulation stabilisée

Réponse à la Question 2.9 L'espace d'éléments finis X_h est formé de fonctions $P1$. On a donc $\Delta v_h \equiv 0$ sur chaque triangle K (bien que cette fonction ne soit pas définie *globalement* sur le domaine Ω, elle a des *"sauts"* d'un triangle à l'autre). Les formes bilinéaire (27) et linéaire (28) se récrivent donc de manière équivalente, quand $\mathrm{v}_h, w_h \in X_h$:

$$a_h(v_h, w_h) = a(v_h, w_h) + \sum_{K \in \tau_h} \int_K \tau\ (b\,.\,\nabla v_h)\ (b\,.\,\nabla w_h)$$

$$\mathcal{L}_h(w_h) = \mathcal{L}(w_h) + \sum_{K \in \tau_h} \int_K \tau\, f\ (b\,.\,\nabla w_h)$$

et sont définies de manière rigoureuse. De même, on peut considérer rigoureusement la quantité $a_h(u, v_h)$ où u est la solution exacte de (17) puisque u, la solution exacte, est supposée de classe H^2, et on peut bien parler de son laplacien. Enfin, comme on a $-\eta\Delta u + b\,.\,\nabla u = f$, les termes présents dans a_h et $\mathcal{L}_h$ et non présents dans a et $\mathcal{L}$ s'égalisent entre eux quand ils sont pris sur u, et on a en fait $a_h(u, v_h) = \mathcal{L}_h(v_h)$ pour $v_h \in X_h$. $\diamondsuit$

Réponse à la Question 2.10 La continuité de a_h et $\mathcal{L}_h$ s'obtient par les arguments habituels. Pour la coercivité, il suffit de remarquer que $a_h(u_h, u_h) \geq a(u_h, u_h)$. $\diamondsuit$

Réponse à la Question 2.11 La preuve de (31) est similaire à celle de la Question 2.7, en utilisant le résultat de la Question 2.9 où on a montré que la solution exacte u vérifiait aussi $a_h(u, v_h) = \mathcal{L}_h(v_h)$. $\diamondsuit$

Réponse à la Question 2.12 On travaille à partir de (31) dont on explicite tous les termes :

$$\eta\|\nabla e_h\|^2_{L^2(\Omega)} + \int_\Omega \tau\,(b\,.\,\nabla e_h)^2 = -\eta\int_\Omega \nabla e_h\,.\,\nabla\pi_h + \int_\Omega b\,.\,\nabla e_h\,\pi_h - \sum_{K\in\tau_h}\int_K \tau\, b\,.\,\nabla e_h\,(-\eta\Delta\pi_h + b\,.\,\nabla\pi_h)\,,$$

toujours puisque, par intégration par parties, $\int_\Omega b\,.\,\nabla e_h\, e_h = 0$, et $\int_\Omega b\,.\,\nabla \pi_h\, e_h = -\int_\Omega b\,.\,\nabla e_h\,\pi_h$, et parce que les laplaciens des éléments de X_h sont identiquement nuls sur chaque triangle $K \in \tau_h$. On traite alors chacun des trois termes du membre de droite séparément :

- Comme précédemment, $\eta\int |\nabla e_h|\,|\nabla\pi_h| \leq \frac{\eta}{4}\,\|\nabla e_h\|^2_{L^2(\Omega)} + \eta\,\|\nabla\pi_h\|^2_{L^2(\Omega)}$,
- de même, $\int |b\,.\,\nabla e_h|\,|\pi_h| \leq \frac{1}{4}\int \tau\,|b\,.\,\nabla e_h|^2 + \int \tau^{-1}\,|\pi_h|^2 \leq \frac{1}{4}\int \tau\,|b\,.\,\nabla e_h|^2 + \|b\|\mathrm{sup}\,h^{-1}\int |\pi_h|^2$,
- le dernier terme est traité en deux morceaux :

$$\begin{aligned}\int_K \tau\ |b\,.\,\nabla e_h|\ |\eta\Delta\pi_h| &\leq \frac{1}{4}\int_K \tau\,|b\,.\,\nabla e_h|^2 + \eta^2\int_K \tau\,|\Delta\pi_h|^2 \\ &\leq \frac{1}{4}\int_K \tau\,|b\,.\,\nabla e_h|^2 + \|b\|\mathrm{sup}\,h^3\int_K |\Delta\pi_h|^2\end{aligned}$$

car $|b(x)|h > \eta$ et $\tau = \frac{h}{|b(x)|}$, donc $\tau\eta^2 \leq |b(x)|\,h^3$. Par ailleurs :

$$\begin{aligned}\int_K \tau\ |b\,.\,\nabla e_h|\ |b\,.\,\nabla\pi_h| &\leq \frac{1}{4}\int_K \tau\,|b\,.\,\nabla e_h|^2 + \int_K \tau\,|b\,.\,\nabla\pi_h|^2 \\ &\leq \frac{1}{4}\int_K \tau\,|b\,.\,\nabla e_h|^2 + h\|b\|\mathrm{sup}\int_K |\nabla\pi_h|^2\end{aligned}$$

En sommant sur toute la triangulation et en regroupant tout le matériau ci-dessus, on obtient donc :

$$\frac{3\eta}{4}\,\|\nabla e_h\|^2_{L^2(\Omega)} \leq \|b\|_{\sup} h^{-1}\,\|\pi_h\|^2_{L^2(\Omega)} + \big(\eta + h\,\|b\|_{\sup}\big)\,\|\nabla\pi_h\|^2_{L^2(\Omega)} + \|b\|_{\sup} h^3\,\|\Delta\pi_h\|^2_{L^2(\Omega)}.$$

En utilisant (22), on en déduit (33), i.e.

$$\|\nabla e_h\|_{L^2(\Omega)} \leq C\sqrt{1+\frac{\|b\|_{\sup}\,h}{\eta}}\;\|u\|_{H^2(\Omega)}\;h$$

$\diamondsuit$

Réponse à la Question 2.13 Quand $\frac{\|b\|_{\sup}\,h}{\eta}$ est grand devant 1, son carré est très grand devant lui, donc l'estimation (33) est bien meilleure que l'estimation (25). Il y a donc intérêt à employer la seconde formulation qui permettra (et ceci est confirmé par la pratique), d'obtenir une meilleure approximation à un coût quasiment identique. $\diamondsuit$

FIN DU CORRIGE//