Université catholique de Louvain Ecole de physique

SIMULATION NUMÉRIQUE EN PHYSIQUE [LPHY2371]

Méthodes spectrales

Auteurs: Valéry Materne Arnaud Schils Enseignant : Pr. Bernard PIRAUX

Décembre 2016



Première partie

Exercice d'introduction : 3 méthodes spectrales

1.1 Introduction

Nous considérons l'équation différentielle suivante :

$$u_{xx} + u_x - 2u + 2 = 0 (1)$$

sur le domaine $-1 \le x \le 1$ et avec les condition aux frontières u(-1) = u(1) = 0.

Nous souhaitons approximer la solution analytique exacte de cette équation différentielle :

$$u(x) = 1 - \frac{\sinh(2)e^x + \sinh(1)e^{-2x}}{\sinh(3)}$$
 (2)

par un développement tronqué de polynôme de Tchebychev :

$$v(x) = \sum_{k=0}^{N} a_k T_k(x) . {3}$$

1.2 propriété des polynômes de Tchebychev

Le polynôme de Tchebychev de degré $n, T_n(x)$, est défini par

$$T_n(x) = \cos(n\arccos(x)),$$
 (4)

$$T_n(\pm 1) = (\pm 1)^n . (5)$$

Relation d'orthogonalité:

$$\int_{-1}^{1} T_n T_m (1 - x^2)^{-1/2} dx = \frac{\pi}{2} c_n \delta_{nm}$$
 (6)

avec $c_0 = 2$ et $c_n = 1$ pour n > 0.

Relations de récurrence :

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x) , n \ge 1,$$
 (7)

$$2T_n(x) = \frac{T'_{n+1}(x)}{n+1} - \frac{T'_{n-1}(x)}{n-1} , n \ge 2.$$
 (8)

1.3 Calcul des coefficients du développement du résidu

Nous injectons la série tronquée (3) dans l'équation différentielle de départ (1) et nous définissons le résultat comme le résidu. Nous le redéfinissons selon une nouvelle série tronquée de polynôme de Tchebychev :

$$R(x) = v_{xx} + v_x - 2v + 2 (9)$$

$$= \sum_{k=0}^{N} A_k T_k(x) . {10}$$

Nous calculons ensuite ces nouveaux coefficients A_k en fonction des a_k . Pour ce faire nous commençons par exprimer les dérivées de v en fonction des polynômes de Tchebychev.

On recherche les formes suivantes :

$$v_x(x) = \sum_{k=0}^{N} b_k T_k(x)$$
 (11)

$$v_{xx}(x) = \sum_{k=0}^{N} c_k T_k(x)$$
 (12)

(13)

Pour ce faire, on part de l'équation (3), on a :

$$v_x(x) = \sum_{k=0}^{N} a_k T_k'(x) . (14)$$

On doit trouver l'expression des $T_k(x)$ en fonction des $T_k(x)$ pour k > 0. Pour ce faire, on utilise la relation de récurrence (8). Si on pose k = n + 1, on obtient :

$$T'_k(x) = k \left(2T_{k-1}(x) + \frac{T'_{k-2}(x)}{k-2} \right) .$$
 (15)

En la réinjectant dans son terme de droite, par récurrence, on obtient deux cas :

k impair

$$T'_{k}(x) = 2k \left(T_{k-1}(x) + T_{k-3}(x) + \dots + T_{4}(x) + T_{2}(x) + T_{0}(x)/2 \right) ,$$
 (16)

k pair

$$T'_k(x) = 2k \left(T_{k-1}(x) + T_{k-3}(x) + \dots + T_5(x) + T_3(x) + T_1(x) \right) . \tag{17}$$

On a donc

$$\begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_{N-1} \\ b_N \end{pmatrix} = D \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_{N-1} \\ a_N \end{pmatrix}$$
 (18)

où D est la matrice dérivée.

On va maintenant définir cette matrice. En égalant les équations (11) et (14) et en remplaçant les expressions de $T_k'(x)$ par (16) et (17), on obtient les valeurs de b_k suivantes :

k impair

$$b_k = 2 \sum_{n=k-1}^{\frac{N-1}{2}} (2n)a_{2n} , \text{ si } N \text{ est impair}$$
 (19)

$$b_k = 2\sum_{n=k-1}^{\frac{N}{2}-1} (2n)a_{2n} , \text{ si } N \text{ est pair}$$
 (20)

 $\frac{\text{k pair}}{k \ge 2}$

$$b_k = 2\sum_{n=k/2}^{\frac{N-1}{2}} (2n+1)a_{2n+1} , si N est impair$$
 (21)

$$b_k = 2 \sum_{n=k/2}^{\frac{N}{2}-1} (2n+1)a_{2n+1}$$
, si N est pair (22)

Pour le cas $k=0,\,b_0$ est égal à la moitié de (21) ou (22) selon la parité de N.

Il est maintenant possible de définir les éléments de matrice D:

$$d_{ij} = 2j\alpha_i\beta_{ij}\gamma_{ij} , \qquad (23)$$

avec

$$\alpha_i = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{si } i = 0\\ 1 & \text{sinon} \end{cases} , \tag{24}$$

$$\beta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si i et j sont de parité opposée} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} , \tag{25}$$

$$\gamma_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si i } < j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$
 (26)

On a implémenté cette matrice dans Matlab, valide pour tout N, voici le cas N=4 :

$$\begin{pmatrix}
0 & 1 & 0 & 3 & 0 \\
0 & 0 & 8 & 0 & 8 \\
0 & 0 & 0 & 6 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 8 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix}.$$
(27)

- 1.4 Méthode Tau
- 1.5 Méthode Galerkin
- 1.6 Méthode Collocation
- 1.7 Méthode aux différences finies
- 1.8 Conclusion
- 1.9 vais dormir

Deuxième partie

Exercice sur l'équation de Schrödinger

- 2.1 Introduction
- **2.2** section 1

Conclusion