Sujet 2 – Analyse numérique

Durée : 5 heures.
Note : La clarté de la rédaction constituera un élément important dans l'appréciation des copies. En particulier, indiquer clairement le numéro de chaque question traitée.
Ce sujet comporte 7 pages numérotées de 1 à 7 et est divisé en quatre parties A,B,C,D. Chacune des parties dépend des parties précédentes. Il est toutefois permis pour traiter une question d'admettre les résultats des questions et parties précédentes.

A Polynômes orthogonaux

Pour $a < b$ des réels fixés, soit $w :]a, b[\to \mathbb{R}$ une fonction continue, strictement positive et intégrable sur l'intervalle $]a, b[$. On considère

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(t)g(t)w(t)dt.$$

A.1 Montrer que $\langle f, g \rangle$ définit bien un produit scalaire sur l'espace vectoriel des fonctions polynomiales sur l'intervalle $[a, b]$ à valeurs réelles.

A.2 Montrer qu'il existe une unique suite de polynômes orthogonaux $p_0, p_1, p_2, \ldots$ à valeurs réelles telle que pour tout $k \geq 0$, on a :
- $p_k(t)$ est un polynôme de degré k et de terme dominant t^k, c'est-à-dire $p_k(t) = t^k + a_{k-1}t^{k-1} + \ldots + a_0$ pour des coefficients réels $a_0, \ldots, a_{k-1}$,
- $\langle p_k, q \rangle = 0$ pour tout polynôme q de degré $\leq k - 1$.

A.3 En posant $p_{-1}(t) = 0$, montrer que cette suite satisfait une relation de récurrence de la forme

$$p_k(t) = (t - \beta_k)p_{k-1}(t) - \gamma_k p_{k-2}(t), \qquad \text{pour tout } k \geq 1,$$

avec β_k, γ_k des constantes réelles avec $\gamma_k > 0$ pour tout k. Les constantes β_k, γ_k $(k \geq 1)$ sont-elles uniques ?

A.4 Pour tout k, montrer que les racines de $p_k(t)$ sont réelles, simples et dans l'intervalle ouvert $]a, b[$.
Indication : considérer $\prod_{i=1}^{r}(t - t_i)$ où $\{t_1, \ldots, t_r\}$ est l'ensemble des racines de $p_k(t)$ qui sont dans l'intervalle $]a, b[$ et de multiplicité impaire.

A.5 Montrer que le cas particulier $a = -1, b = 1$ et $w(t) = \frac{1}{\sqrt{1-t^2}}$ conduit à $p_k(t) = 2^{-k}T_k(t)$, avec T_k défini par

$$T_k(t) = \cos(k \arccos(t)), \quad \text{pour tout } t \in [-1, 1],$$

et déterminer les coefficients β_k, γ_k de la question A.3 dans ce cas particulier. Justifier également pourquoi les T_k sont bien des polynômes (appelés polynômes de Chebyshev).

A.6 Les polynômes de Legendre $P_k(t)$ sont définis par $P_0(t) = 1$ et pour tout entier $k \geq 1$ par

$$P_k(t) = \frac{(-1)^k}{k!2^k} \frac{d^k}{dt^k} \left((1 + t)^k (1 - t)^k \right).$$

Calculer les polynômes de Legendre $P_k(t)$ pour $k = 1, 2, 3, 4$.

A.7 Montrer les propriétés suivantes sur les polynômes de Legendre P_k pour tout $k \geq 1$:

A.7.a P_k est une fonction paire si k est pair, sinon c'est une fonction impaire.

A.7.b $P_k(1) = 1$.

A.7.c $\int_{-1}^{1} P_j(t)P_k(t)dt = 0$ pour tous entiers $j, k \geq 1$ avec $j \neq k$.

A.7.d P_k possède k racines réelles dans l'intervalle ouvert]-1,1[.

A.7.e P_k vérifie la relation de récurrence

$$(k+1)P_{k+1}(t) = (2k+1)tP_k(t) - kP_{k-1}(t).$$

A.7.f En posant $\hat{P}_k(t) = \sqrt{2k+1}P_k(t)$, il existe une suite réelle $(\alpha_k)_{k\geq 1}$ que l'on déterminera telle que

$$t\hat{P}_k(t) = \alpha_{k+1}\hat{P}_{k+1}(t) + \alpha_k\hat{P}_{k-1}(t).$$

A.7.g Les racines de P_k sont les valeurs propres de la matrice tridiagonale symétrique de taille $k \times k$ suivante :

$$\begin{pmatrix} 0 & \alpha_1 & & & \\ \alpha_1 & 0 & \alpha_2 & & \\ & \alpha_2 & 0 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \alpha_{k-1} \\ & & & \alpha_{k-1} & 0 \end{pmatrix}.$$

B Formules de quadrature d'ordre élevé

On appelle formule de quadrature une formule d'approximation de la forme

$$\int_0^1 f(t)dt \simeq \sum_{i=1}^{s} b_i f(c_i),$$

où $(b_i, c_i)_{i=1,\ldots,s}$ désigne les coefficients de la formule de quadrature : les b_i supposés réels s'appellent les poids, et les c_i dans l'intervalle $[0,1]$ s'appellent les nœuds, supposés distincts deux-à-deux. On dit qu'une formule de quadrature est d'ordre p si elle est exacte pour tout polynôme de degré $\leq p-1$.

B.1 Soit $p \geq 1$. Montrer qu'une formule de quadrature $(b_i, c_i)_{i=1,\ldots,s}$ est d'ordre (au moins) p si et seulement si

$$B(p) : \qquad \sum_{i=1}^{s} b_i c_i^{k-1} = \frac{1}{k}, \qquad k = 1, \ldots, p.$$

B.2 Étant donnés les nœuds $c_1, \ldots, c_s$ d'une formule de quadrature, montrer qu'il existe un unique choix des poids de la formule pour que la formule soit d'ordre (au moins) s, donné par

$$b_i = \int_0^1 l_i(t)dt,$$

où $l_i(t)$ est le $i$ème polynôme de Lagrange (polynôme de degré $s-1$ avec $l_i(c_j) = 0$ si $i \neq j$, et $l_i(c_j) = 1$ si $i = j$).

On ajoute désormais à la définition d'une formule de quadrature que cette condition sur les poids est vérifiée.

B.3 Une formule de quadrature est dite symétrique si ses nœuds c_i classés dans l'ordre croissant vérifient $c_i = 1 - c_{s+1-i}, i = 1, \ldots, s$. Montrer que si une formule de quadrature $(b_i, c_i)_{i=1,\ldots,s}$ est symétrique, alors $b_i = b_{s+1-i}, i = 1, \ldots, s$. Montrer dans ce cas que la formule est toujours d'ordre pair, c'est-à-dire que si elle est d'ordre p impair donné alors elle est aussi d'ordre $p+1$.

B.4 Montrer qu'une formule de quadrature $(b_i, c_i)_{i=1,\ldots,s}$ vérifie

$$g(t) \geq 0 \text{ et continue sur } [0,1] \quad \Longrightarrow \quad \sum_{i=1}^{s} b_i g(c_i) \geq 0, \tag{1}$$

si et seulement si les poids b_i sont positifs pour tout $i = 1, \ldots, s$.

B.5 Montrer qu'une formule de quadrature $(b_i, c_i)_{i=1,\ldots,s}$ est d'ordre $p \geq s+m$ si et seulement si $\int_0^1 M(t)q(t) = 0$ pour tout polynôme q de degré $\leq m-1$, où on pose

$$M(t) = \prod_{i=1}^{s}(t - c_i) = (t - c_1)\cdots(t - c_s).$$

B.6 Montrer qu'une formule de quadrature à s nœuds ne peut pas être d'ordre strictement supérieur à $2s$.

B.7 Montrer qu'il existe une unique formule de quadrature à s nœuds d'ordre $2s$, et montrer que les nœuds correspondants sont les racines de $P_s(2t-1)$. On appelle cette formule la “formule de Gauss”.

B.8 Montrer que la formule de Gauss est symétrique.

B.9 Montrer que la formule de Gauss vérifie la propriété (1).

B.10 *Formules de Lobatto.* On considère maintenant les polynômes suivants de degré k,

$$Q_k(t) = \frac{d^{k-2}}{dt^{k-2}}\left((1+t)^{k-1}(1-t)^{k-1}\right),$$

pour $k \geq 2$, avec lesquels on va construire de nouvelles formules de quadrature (formules de Lobatto).

B.10.a Montrer que si une formule de quadrature $(b_i, c_i)_{i=1,\ldots,s}$ est d'ordre $\geq 2s-1$, alors (1) est vérifiée.

B.10.b Montrer que $Q_k(-1) = Q_k(1) = 0$.

B.10.c Montrer que les racines de $Q_k(t)$ sont simples, réelles et dans l'intervalle $[-1, 1]$.
Indications. Considérer une primitive du polynôme $\prod_{i=1}^{r}(t-t_i)$ où $\{t_1, \ldots, t_r\}$ est l'ensemble des racines de multiplicité impaire de Q_k situées dans l'intervalle $]-1, 1[$. Remarquer que la dérivée de Q_k est proportionnelle à un polynôme de Legendre (question A.6).

B.10.d Pour $s \geq 2$, on appelle “formule de Lobatto à s noeuds” la formule de quadrature dont les nœuds sont les racines de $Q_s(2t-1)$.
Montrer que $c_1 = 0$ et $c_s = 1$ sont des nœuds de la formule de Lobatto et expliquer pourquoi cette propriété permet “d'économiser” des évaluations de la fonction lorsqu'on applique la formule de quadrature pour approcher numériquement une intégrale sur un intervalle $[a, b]$.

B.10.e Calculer et identifier les formules de quadrature associées à ces racines pour $s = 2, 3$, respectivement.

B.10.f Montrer que la formule de quadrature de Lobatto à s nœuds est d'ordre $2s-2$ et qu'elle n'est pas d'ordre strictement supérieur à $2s-2$.

B.10.g En déduire que les poids b_i de la formule de Lobatto sont positifs.

C Méthode numérique préservant l'énergie des systèmes hamiltoniens

On considère un système d'équations différentielles dit hamiltonien de la forme

$$q'(t) = p(t), \qquad p'(t) = -\nabla V(q(t)), \tag{2}$$

où $\nabla V(x)$ désigne le gradient au point $x \in \mathbb{R}^d$ de la fonction $V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ supposée de classe C^∞ et appelée le potentiel. On suppose $q(t), p(t) \in \mathbb{R}^d$ (vecteurs colonnes) et on considère une condition initiale $q(0) = q_0, p(0) = p_0$. On suppose de plus que la fonction V vérifie

$$\lim_{\|x\| \to +\infty} V(x) = +\infty.$$

C.1 Montrer en posant $y = \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$ que ce système d'équations différentielles peut se réécrire de manière équivalente sous la forme

$$y'(t) = J\nabla H(y), \qquad y(0) = y_0,$$

où J est une matrice antisymétrique inversible constante que l'on déterminera, et $H : \mathbb{R}^{2d} \to \mathbb{R}$, appelé hamiltonien ou énergie, est défini par

$$H(y) = H(p, q) = \frac{1}{2} p^T p + V(q).$$

C.2 Énoncer et appliquer le théorème de Cauchy-Lipschitz au système d'équations différentielles (2).

C.3 Montrer pour tout réel C que l'ensemble $\{y \in \mathbb{R}^{2d} \ ; \ H(y) \leq C\}$ est une partie bornée de $\mathbb{R}^{2d}$.

C.4 Montrer que la quantité $H(p(t), q(t))$ est conservée au cours du temps t par les solutions de (2).

C.5 Montrer que les solutions de (2) sont bornées sur leur intervalle d'existence.

C.6 Montrer que les solutions de (2) sont globalement définies, c'est-à-dire définies pour tout $t \in \mathbb{R}$.

C.7 On considère dans la suite la méthode d'intégration numérique avec un pas h définie de manière implicite par

$$y_{n+1} = y_n + h \int_0^1 J\nabla H\left(\theta y_n + (1-\theta) y_{n+1}\right) d\theta.$$

Pour tout entier $n \geq 0$ donné et $y_n \in \mathbb{R}^{2d}$ donné, montrer qu'il existe une constante $h_n > 0$ (qui peut dépendre de y_n) telle que pour tout $h \in [0, h_n]$ cette méthode définit y_{n+1} de manière unique (autrement dit l'équation ci-dessus possède exactement une solution).

C.8 Montrer que pour tout h assez petit,

$$\int_0^1 \frac{y_{n+1} - y_n}{h} \cdot \nabla H(\theta y_n + (1-\theta) y_{n+1}) d\theta = 0,$$

où $u \cdot v = u^T v$ désigne le produit scalaire euclidien pour $u, v \in \mathbb{R}^d$.

C.9 Montrer que la méthode numérique conserve exactement l'énergie de (2), c'est-à-dire étant donné y_n et considérant y_{n+1} bien défini pour h assez petit, on a :

$$H(y_{n+1}) = H(y_n).$$

C.10 Pour toute condition initiale fixée, montrer qu'il existe une constante $h_0 > 0$ telle que pour tout $h \in [0, h_0]$ la méthode numérique définit y_n de manière unique pour tout $n \geq 1$ et que la suite $(y_n)_{n\geq 0}$ est bornée. Montrer également que cette constante h_0 peut être choisie indépendante de n.

C.11 On considère dans la suite de cette partie le cas particulier où le potentiel V est une fonction polynomiale. Montrer qu'il existe une formule de quadrature qui est exacte pour approcher l'intégrale définissant la méthode numérique.

C.12 Pour tout potentiel polynomial V, montrer qu'il existe une méthode de Runge-Kutta qui conserve exactement l'énergie H du système (2) (voir la définition d'une méthode de Runge-Kutta au début de la partie D). On indiquera les valeurs des coefficients b_i, a_{ij} de la méthode ainsi construite.

C.13 Existe t-il une méthode de Runge-Kutta qui conserve exactement l'énergie de tous les systèmes hamiltoniens de la forme (2) où V est supposé polynomial ?
Indication : dans le cas particulier $d = 1$, considérer un potentiel polynomial de la forme $V(q) = \int_0^q g(s)ds$.

D Méthodes de collocation et méthodes de Runge-Kutta d'ordre élevé

On considère une fonction $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ de classe C^∞ et supposée lipschitzienne sur $\mathbb{R}^d$. L'objectif de cette partie est de construire des méthodes de Runge-Kutta $y_n \mapsto y_{n+1}$ d'ordre élevé par rapport au pas h de la méthode pour résoudre un système d'équations différentielles de la forme

$$y'(t) = f(y(t)), \qquad y(t_0) = y_0.$$

Méthodes de Runge-Kutta. Étant donnés des réels b_i, a_{ij} $(i, j = 1, \ldots, s)$ et $c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$ et une longueur de pas $h > 0$, on définit une méthode de Runge-Kutta à s étages par

$$k_i = f\Big(y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j\Big), \qquad i = 1, \ldots, s, \tag{3}$$

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^{s} b_i k_i, \tag{4}$$

où les k_i dépendent aussi de n même si cette dépendance n'apparaît pas dans la notation par souci de concision.

On dit qu'une méthode de Runge-Kutta est d'ordre p si pour tout f et tout y_0 donnés, l'erreur après un pas de la méthode entre les solutions exacte $y(h)$ et numérique y_1 vérifie

$$\|y_1 - y(t_0 + h)\| \leq Ch^{p+1},$$

pour tout pas h supposé suffisamment petit, avec la constante C indépendante de h.

D.1 Montrer qu'il existe une constante $h_0 > 0$ telle que pour tout $h \in [0, h_0]$ et tout y_n, le système (3)-(4) d'inconnues $k_1, \ldots, k_s$ et y_{n+1} possède une solution unique. La méthode de Runge-Kutta est alors dite bien définie.

D.2 Montrer que si on applique la méthode de Runge-Kutta au problème scalaire $y' = \lambda y$ avec λ constante réelle fixée, on obtient une récurrence de la forme

$$y_{n+1} = R(h\lambda) y_n,$$

où $R(z)$ est une fraction rationnelle qui dépend des coefficients $b_i, a_{i,j}$ mais pas de y_n, y_{n+1}.

D.3 La méthode de Runge-Kutta est dite explicite si $a_{ij} = 0$ pour tout i, j avec $j \geq i$. Montrer que si la méthode est explicite alors la fonction $R(z)$ de la question précédente est un polynôme. En déduire que l'ordre p d'une méthode de Runge-Kutta explicite vérifie $p \leq s$ où s est le nombre d'étages de la méthode.

D.4 *Méthodes de collocation.* Étant donnés des réels $c_i, i = 1, \ldots, s$ distincts deux-à-deux dans l'intervalle $[0, 1]$ et une longueur de pas $h > 0$, on définit le polynôme de collocation $u(t)$ comme un polynôme de degré s à valeurs dans $\mathbb{R}^d$ vérifiant

$$\begin{aligned} u(t_0) &= y_0, \\ u'(t_0 + c_i h) &= f(u(t_0 + c_i h)), \qquad i = 1, \ldots, s. \end{aligned} \tag{5}$$

On définit ensuite la méthode de collocation $y_0 \mapsto y_1$ avec pas de temps h par $y_1 = u(t_0 + h)$.

Montrer que la méthode de collocation ainsi définie équivaut à une méthode de Runge-Kutta à s étages avec coefficients

$$a_{ij} = \int_0^{c_i} l_j(\tau) d\tau, \qquad b_i = \int_0^1 l_i(\tau) d\tau, \tag{6}$$

où $l_1, \ldots, l_s$ sont les polynômes de Lagrange définis dans la question B.2. En déduire que le polynôme de collocation et la méthode de collocation sont bien définis pour tout h assez petit.

D.5 La méthode de collocation ainsi définie à partir de la formule de quadrature de Gauss à s nœuds est appelée méthode de Gauss à s étages. Calculer les coefficients de Runge-Kutta des méthodes de Gauss à $s = 1$ et $s = 2$ étages.

D.6 Montrer que

$$\tau^{k-1} = \sum_{j=1}^{s} c_j^{k-1} l_j(\tau), \qquad k = 1, \ldots, s.$$

D.7 En déduire que les équations (6) sur les coefficients b_i, a_{ij} sont équivalentes au système linéaire suivant avec $q = s$ et $p = s$:

$$\begin{aligned} C(q) : \qquad & \sum_{j=1}^{s} a_{ij} c_j^{k-1} = \frac{c_i^k}{k}, \qquad k = 1, \ldots, q, i = 1, \ldots, s \\ B(p) : \qquad & \sum_{i=1}^{s} b_i c_i^{k-1} = \frac{1}{k}, \qquad k = 1, \ldots, p. \end{aligned}$$

On souhaite démontrer le théorème suivant :
Theorème (Superconvergence). *Soit* $c_1, \ldots, c_s$ *des nœuds distincts deux-à-deux dans l'intervalle* $[0,1]$. *Si la formule de quadrature associée à ces nœuds est d'ordre* $p \geq s$, *alors la méthode de collocation associée appliquée à* $y'(t) = f(y(t))$ *est d'ordre* p, *c'est-à-dire*

$$\|y_1 - y(t_0 + h)\| \leq Ch^{p+1},$$

pour tout h *supposé suffisamment petit, et où* C *est indépendante de* h.
À cette fin, on admet le lemme suivant.
Lemme. *Le polynôme de collocation défini dans* (5) *est une approximation d'ordre* s *de la solution exacte de* $y'(t) = f(y(t))$ *avec* $y(t_0) = y_0$ *sur l'intervalle* $[t_0, t_0 + h]$, *c'est-à-dire*

$$\|u(t) - y(t)\| \leq Ch^{s+1}, \qquad t \in [t_0, t_0 + h],$$

pour tout h *supposé suffisamment petit. De plus, les dérivées* $u^{(k)}$ *d'ordre* $k = 1, \ldots, s$ *de* u *vérifient respectivement :*

$$\|u^{(k)}(t) - y^{(k)}(t)\| \leq Ch^{s+1-k}, \qquad t \in [t_0, t_0 + h].$$

D.8 On pose $\delta(t) = u'(t) - f(u(t))$. Montrer qu'il existe une fonction $r(t) = \mathcal{O}(h^{2s+2})$ telle que

$$u'(t) - y'(t) = A(t)(u(t) - y(t)) + \delta(t) + r(t),$$

où on considère la matrice jacobienne de f au point $y(t)$,

$$A(t) = \frac{\partial f}{\partial y}(y(t)) \in \mathbb{R}^{d\times d}.$$

D.9 En déduire la relation

$$y_1 - y(t_0 + h) = u(t_0 + h) - y(t_0 + h) = \int_{t_0}^{t_0+h} R(t_0 + h, \tau)(\delta(\tau) + r(\tau))d\tau$$

où la matrice $R(t, \tau) \in \mathbb{R}^{d\times d}$ est définie par

$$\frac{\partial R(t,\tau)}{\partial t} = A(t)R(t,\tau), \qquad R(\tau,\tau) = I.$$

D.10 Montrer que

$$\int_{t_0}^{t_0+h} R(t_0 + h, s)r(\tau)d\tau = \mathcal{O}(h^{2s+3}).$$

D.11 On pose $g(s) = R(t_0 + h, s)\delta(s)$. Montrer que $g(t_0 + c_i h) = 0$ pour tout $i = 1, \ldots, s$, puis montrer que

$$\int_{t_0}^{t_0+h} g(\tau)d\tau = \mathcal{O}(h^{p+1}).$$

D.12 En déduire la preuve du théorème de superconvergence.

D.13 Montrer que parmi les méthode de Runge-Kutta à s étages, il existe une unique méthode de Runge-Kutta d'ordre maximal et que cet ordre maximal est $p = 2s$.

– Fin de l'épreuve –