



HAL
open science

Intégrateurs géométriques: Application à la Mécanique des Fluides

Chhay Marx

► **To cite this version:**

Chhay Marx. Intégrateurs géométriques: Application à la Mécanique des Fluides. Mathématiques [math]. Université de La Rochelle, 2008. Français. NNT: . tel-00403649

HAL Id: tel-00403649

<https://theses.hal.science/tel-00403649>

Submitted on 10 Jul 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITE DE LA ROCHELLE
UFR Sciences Fondamentales et Sciences pour l'ingénieur

THÈSE

présentée pour l'obtention du grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE LA ROCHELLE

Discipline : MÉCANIQUE

par

Nirina Marx CHHAY

**Intégrateurs géométriques :
Application à la Mécanique des Fluides.**

Thèse dirigée par Aziz HAMDOUNI
Thèse co-dirigée par Pierre SAGAUT

soutenue le 16 décembre 2008 devant le jury composé de

G. DE SAXCÉ	Professeur à l'Université de Lille	Rapporteur
S. GAVRILYUK	Professeur à l'Université de Marseille	Rapporteur
D. CLAMOND	Professeur à l'Université de Nice	Président
D. DUTYKH	Chargé de Recherche CNRS au LAMA	Examineur
A. HAMDOUNI	Professeur à l'Université de La Rochelle	Directeur de thèse
M. KIRANE	Professeur à l'Université de La Rochelle	Examineur
P. SAGAUT	Professeur à l'Université Paris VI	Co-Directeur de thèse

INTÉGRATEURS GÉOMÉTRIQUES : APPLICATION À LA MÉCANIQUE DES FLUIDES.

Résumé

Une approche récente permettant d'étudier les équations issues de la Mécanique des Fluides consiste à considérer les symétries de ces équations. Les succès des développements théoriques, notamment en turbulence, ont justifié la pertinence d'une telle approche. Sur le plan numérique, les méthodes d'intégration construites sur des arguments liés à la structure géométrique des équations s'appellent les intégrateurs géométriques. Dans la première partie de la thèse, on présente la classe d'intégrateurs géométriques probablement la plus connue ; ce sont les intégrateurs symplectiques pour les systèmes hamiltoniens. Dans une seconde partie, on introduit les intégrateurs variationnels, construits pour reproduire les lois de conservation des systèmes lagrangiens. Cependant, la plupart des équations de la Mécanique des Fluides ne dérive pas d'un Lagrangien. On expose alors dans la dernière partie une méthode de construction de schémas numériques respectant les symétries d'une équation. Cette méthode est basée sur une formulation moderne des *repères mobiles*. On présente une contribution au développement de cette méthode ; elle permet d'obtenir un schéma invariant possédant un ordre de précision déterminé. Des exemples issus des équations modèles de la Mécanique des Fluides sont traités.

Mots-clés : Intégrateur géométrique, Symplectique, Multisymplectique, Méthodes variationnelles, Bilagrangien, Méthodes invariantes, Repères mobiles, Équation de transfert

GEOMETRIC INTEGRATORS : APPLICATION TO FLUID MECHANICS.

Abstract

A recent approach to study the equations from Fluid Mechanics consists in considering the symmetry group of equations. Success of theoretical development, specially in turbulence, has justified the relevance of this approach. On the numerical side, the integrating methods based on arguments related to the geometrical structure of equations are called geometric integrators. In the first part of this thesis, a class of such integrators is introduced : symplectic integrators for hamiltonian systems, which are probably the most well known geometric integrators. In the second part, variational integrators are outlined, constructed in order to reproduce conservation laws of lagrangian systems. However most of Fluid Mechanics equations cannot be derived from a Lagrangian. In the last part of this thesis, a method of construction of numerical schemes that preserves equations symmetry is exposed. This method is based on a modern formulation of *moving frames*. A contribution to the development of this method is proposed ; this allows to obtain an invariant numerical scheme that owns an order of accuracy. Examples from Fluid Mechanics model equations are detailed.

Key words : *Geometric integrator, Symplectic, Multisymplectic, Variational methods, Bilagrangian, Invariant methods, Moving frame, Transfer equation*

Remerciements

Je tiens à remercier en tout premier lieu Aziz Hamdouni pour m'avoir encadré et guidé tout au long de ces trois années de thèse. La qualité de sa formation ainsi que la sincérité de son jugement ont participé à forger de façon unique cette expérience. Ce qu'il m'a transmis va bien au delà d'un enseignement scientifique.

Je tiens également à remercier Pierre Sagaut, pour sa disponibilité et le co-encadrement de mes recherches.

J'exprime ma gratitude à Monsieur G. De Saxcé et Monsieur S. Gavrilyuk pour avoir accepté d'évaluer mon travail. Je remercie également Messieurs D. Clamond, M. Kirane, et D. Dutykh pour avoir accepté de composer le Jury de thèse.

J'adresse ma reconnaissance à l'équipe du laboratoire, aux secrétaires et au personnel d'entretien. Je remercie également toutes celles et ceux que j'ai croisés, fréquentés et appréciés au sein du laboratoire et de l'Université. À ceux qui sont devenus des amis.

Je n'oublie pas ceux qui ont ensoleillé mon quotidien rochelais : Laurence D., Karine Z., Sylvain C., Erwann P. & Audrey L. et tout Surdo'Rei, ceux qui l'ont rendu merveilleux : Camille L., Marion D., Pierre P., et celles qui y ont apporté une touche de féerie : Cécile L., Laura M..

Une pensée également à ceux qui ont toujours été présents depuis le début : Benoît U., Jérémie J., Marine M..

Enfin, aux personnes à qui je dois tout : ma famille, qui s'agrandit avec bonheur. Juliette B.S., Philippe B.S., pour tout ce que vous êtes et représenterez pour toujours dans mon cœur.

À *ma Mère*,
À *mon Père*,
À *Mizère, mon compagnon de toujours*,

Table des matières

Liste des figures	xvi
Introduction	1
1 Intégrateurs symplectiques	7
1.1 Introduction	7
1.2 Systèmes hamiltoniens.	9
1.2.1 Définitions et propriétés	9
1.2.2 Notation différentielle	11
1.3 Intégrateurs classiques des systèmes hamiltoniens.	12
1.3.1 Définitions et exemples	13
1.3.2 Exemples numériques.	14
1.3.2.1 L'oscillateur harmonique.	14
1.3.2.2 Le problème de Kepler	16
1.4 Les schémas symplectiques.	18
1.4.1 Définitions et propriétés.	18
1.4.2 Quelques intégrateurs symplectiques	22
1.4.2.1 Euler symplectique.	22
1.4.2.2 Méthode du point milieu.	23
1.4.2.3 Méthode de type Runge-Kutta.	24
1.4.3 Exemples numériques.	26
1.4.3.1 L'oscillateur harmonique	26
1.4.3.2 Le problème de Kepler	29
1.5 Application à l'hydrodynamique bidimensionnelle	32
1.5.1 Le modèle des vortex ponctuels	33
1.5.2 Dynamique qualitative d'un système de 4 vortex ponctuels	34
1.5.2.1 Problématique	34
1.5.2.2 Étude numérique	36
1.5.3 Dynamique quantitative des systèmes de vortex	37
1.5.3.1 Problématique	37
1.5.3.2 Étude numérique	38
1.6 Commentaires	40
2 Intégrateurs variationnels	43

2.1	Introduction	43
2.2	Systèmes lagrangiens	45
2.2.1	Les équations d'Euler-Lagrange	45
2.2.2	Équations variationnelles.	46
2.2.2.1	Lois de conservation	48
2.2.2.2	Symplecticité	49
2.3	Intégrateurs variationnels pour les EDO	50
2.3.1	Intégrateurs variationnels	50
2.3.2	Propriétés et lois de conservation	53
2.3.3	Formulation hamiltonienne	55
2.3.4	L'oscillateur harmonique.	56
2.3.4.1	Intégrateur variationnel	57
2.3.4.2	Résultat numérique.	58
2.4	EDP lagrangiennes	58
2.4.1	Équations variationnelles	60
2.4.1.1	Lois de conservation	63
2.4.1.2	Multisymplecticité.	63
2.5	Intégrateurs variationnels multisymplectiques	64
2.5.1	Intégrateurs variationnels	65
2.5.2	L'équation des ondes.	70
2.5.2.1	Intégrateur variationnel	71
2.6	EDP d'évolution	72
2.6.1	Bilagrangien	72
2.6.1.1	Bilagrangiens pour l'équation de la chaleur.	74
2.6.1.2	Bilagrangiens pour l'équation Burgers.	74
2.6.2	Équations bi-variationnelles	75
2.6.2.1	Propriétés	76
2.7	Intégrateurs bi-variationnels	76
2.7.1	Intégrateurs bi-variationnels	77
2.7.2	L'équation de la chaleur	79
2.7.2.1	Intégrateur bi-variationnel	80
2.8	Commentaires	81
3	Méthodes invariantes	83
3.1	Introduction	83
3.2	Cadre mathématique	87
3.3	Schémas invariants utilisant les repères mobiles	92
3.3.1	Principe de construction	92
3.3.2	L'équation de convection-diffusion 1D	96
3.3.2.1	Invariantisation du schéma FTCS	97
3.3.2.2	Résultats numériques	98
3.3.2.3	Invariantisation du schéma décentré <i>upwind</i>	98

3.3.2.4	Résultats numériques	100
3.4	Construction des schémas invariants	100
3.4.1	Principe de construction	101
3.4.2	L'équation de Burgers 1D	103
3.4.2.1	Transformation du maillage.	105
3.4.2.2	Invariantisation du schéma FTCS.	107
3.4.2.3	Résultats numériques	109
3.4.3	L'équation de Burgers 2D	113
3.4.3.1	Transformation du maillage	115
3.4.3.2	Invariantisation du schéma FTCS	119
3.4.3.3	Résultats numériques	122
3.5	Consistance en symétrie des schémas	130
3.5.1	Définition de la consistance en symétrie	131
3.5.2	Consistance en symétrie pour des schémas classiques	132
3.6	Commentaires	134
Conclusion générale et Perspectives		137
Annexes		139
A Intégrateurs “multisymplectiques”		141
A.1	Introduction	141
A.2	Structure multisymplectique	143
A.2.1	Définitions	143
A.2.2	Exemples	145
A.3	Schémas multisymplectiques.	147
A.3.1	Schémas multisymplectiques en boîte	148
A.3.1.1	Euler multisymplectique	148
A.3.1.2	Schéma de la boîte de Preissman.	149
A.3.1.3	Méthode du point milieu explicite	151
A.3.2	Runge-Kutta multisymplectique.	152
A.4	Exemples numériques	153
A.4.1	L'équation de Sine-Gordon	153
A.4.1.1	Les méthodes numériques	153
A.4.1.2	Tests numériques	154
B Méthodes utilisant l'invariance par symétrie		159
B.1	Introduction	159
B.2	Schémas semi-invariants par approximation différentielle	160
B.2.1	Approximation différentielle d'ordre s	160
B.2.2	Schéma semi-invariant pour l'équation de Burgers	161
B.3	Invariance d'échelle et maillage adaptatif	164
B.3.1	Principe d'équidistribution et invariance d'échelle.	165

B.3.2	L'équation de la chaleur non linéaire	167
B.4	Méthodes utilisant les invariants en différences finies	168
B.4.1	Schémas invariants	168
B.4.2	Equation de la chaleur non linéaire	169
Bibliographie		171

Liste des figures

1	<i>Familles d'équations aux dérivées partielles (EDP) et leurs intégrateurs géométriques associés.</i>	3
1.1	<i>Oscillateur harmonique 1D. Conservation de l'aire dans l'espace des phases pour l'oscillateur harmonique. L'aire initiale \mathcal{A}_0 (en "—") est celle du disque $\{(p+1)^2 + q^2\}^{\frac{1}{2}} \leq 0.2\}$. Le système est représenté à chaque pas de temps $\Delta t = \pi/6$.</i>	15
1.2	<i>Oscillateur harmonique 1D. Évolution de l'erreur relative en l'énergie, en fonction du temps, pour les schémas d'Euler explicite (E) et implicite (I). Le pas de temps Δt varie de $2 \cdot 10^{-2}$ à 10^{-1}. Temps d'intégration $T = 5$.</i>	17
1.3	<i>Problème de Kepler plan. Évolution par une méthode de type Runge-Kutta d'ordre 2 de grandeurs conservées : l'énergie discrète H^n et le moment angulaire discret L^n. Le pas de temps Δt varie de $1 \cdot 10^2$ à $5 \cdot 10^2$. Le temps d'intégration est de $T = 10^3$. Echelle log-log.</i>	19
1.4	<i>Problème de Kepler plan. Évolution par une méthode de type Runge-Kutta d'ordre 4 de grandeurs conservées : l'énergie discrète H^n et le moment angulaire discret L^n. Le pas de temps Δt varie de $1 \cdot 10^2$ à $5 \cdot 10^2$. Le temps d'intégration est de $T = 10^3$. Echelle log-log.</i>	20
1.5	<i>Oscillateur harmonique 1D. Conservation de l'aire dans l'espace des phases par des méthodes symplectiques : (a) méthode d'Euler symplectique, (b) : méthode du point milieu. L'aire initiale \mathcal{A}_0 (en "—") est celui du disque $\{(p+1)^2 + q^2\}^{\frac{1}{2}} \leq 0.2\}$. Le système est représenté à chaque pas de temps $\Delta t = \pi/6$.</i>	28
1.6	<i>Oscillateur harmonique 1D. Conservation de l'énergie par des méthodes symplectiques d'ordre faible.</i>	30
1.7	<i>Problème de Kepler. Erreur relative de deux invariants : (a) : le Hamiltonien discret H^n, (b) : le moment angulaire discret L^n. Le pas de temps varie $\Delta t = 1 \cdot 10^{-2}$, $2 \cdot 10^{-2}$, $4 \cdot 10^{-2}$ et $5 \cdot 10^{-2}$. Le temps d'intégration vaut $T = 10^3$. Echelle log-log.</i>	31
1.8	<i>Modèle de vortex ponctuels bidimensionnel. En (a) : configuration initiale de référence. En (b) : la trajectoire d'un vortex associé à une configuration initiale carré.</i>	34

1.9	Modèle de vortex ponctuels bidimensionnel. En (a) : la perturbation d'angle α est symétrique; en (b), le mouvement pseudo-périodique typique d'un vortex associé à la configuration de référence perturbée symétriquement. En (c) : la perturbation d'angle α est asymétrique; en (d), le mouvement chaotique typique d'un vortex associé à la configuration de référence perturbée asymétriquement.	35
1.10	Modèle de vortex ponctuels bidimensionnel. Solution numérique de la trajectoire d'un vortex pour (a) : RK4, et (b) : RKS4. La configuration initiale est la configuration de référence carré associée à un mouvement périodique. 5.10^5 itérations. $\Delta t = 5.10^{-3}$	36
1.11	Modèle de vortex ponctuels bidimensionnel. Solution numérique de la trajectoire d'un vortex pour (a) : RK4, et (b) : RKS4. La configuration initiale correspond à une perturbation symétrique ($\alpha = \frac{\pi}{5}$) associée à un mouvement quasi-périodique. 5.10^5 itérations. $\Delta t = 5.10^{-3}$	37
1.12	Modèle d'hydrodynamique bidimensionnel. Conservation du Hamiltonien pour les intégrateurs RK4 classique et RKS4 symplectique. Configuration de $N = 250$ tourbillons ponctuels pour 200 itérations. $\Delta t = 5.10^{-2}$	38
1.13	Modèle d'hydrodynamique bidimensionnel. Conservation des intégrales premières L, P_x, p_y et Z pour les intégrateurs RK4 et RKS4. Configuration de $N = 250$ tourbillons ponctuels pour 200 itérations. $\Delta t = 5.10^{-2}$	39
2.1	Illustration du principe de moindre action. La trajectoire physique est celle qui est extrémale pour l'action lagrangienne.	46
2.2	Différentes méthodes de quadrature.	51
2.3	Oscillateur harmonique. Intégrateur variationnel : (a) : trajectoire numérique comparée à la solution analytique, (b) : conservation de l'énergie au cours du temps. Condition initiale : $(t_0, q_0) = (0, 0)$ et $(t_1, q_1) = (0.01, 0.2)$	59
2.4	Différents motifs permettant d'approximer l'action lagrangienne discrète.	66
3.1	Équation de convection-diffusion 1D. Comportement des solutions numériques. $T = 2$ sec. $\nu = 10^{-3}$, $v = 1$, $h = 10^{-2}$, $CFL = 0.4$	99
3.2	Équation de convection-diffusion 1D. Comparaison des schémas upwind et upwind invariant. $T=6$. $\nu = 1.10^{-5}$, $v = 1$, $CFL= 1/2$	101
3.3	Équation de convection-diffusion 1D. Erreur L^2 des schémas upwind et upwind invariant. $T=6$. $\nu = 1.10^{-5}$, $v = 1$, $CFL= 1/2$	102
3.4	Équation de Burgers 1D. Translation spatiale du maillage.	106
3.5	Équation de Burgers 1D. Solution exacte, schéma classique implicite de Crank-Nicolson, et schéma explicite invariant. Sur le domaine spatial $[-1; 1]$ pour un intervalle de temps égal à $[1; 2]$. $\Delta x = \Delta t = 5.10^{-2}$ et $\nu = 75.10^{-5}$	111

3.6	Équation de Burgers 1D. Profils des solutions numériques et de la solution exacte pour différentes vitesses d'entraînement $\lambda = 0$, $\lambda = 1$, $\lambda = 2$ et $\lambda = 3$. $\Delta x = 2 \cdot 10^{-2}$. $\nu = 5 \cdot 10^{-3}$. CFL=1/2 référentiel d'origine.	112
3.7	Équation de Burgers 1D. Profils des solutions numériques et de la solution exacte pour une solution régulière de l'équation de Burgers. $\Delta x = 5 \cdot 10^{-2}$, $\Delta t = 4 \cdot 10^{-3}$ et $\nu = 5 \cdot 10^{-2}$. Le temps d'intégration est compris dans $[0.1; 5.2]$	114
3.8	Équation de Burgers 2D. Profils de la solution exacte pour une solution régulière de l'équation de Burgers : (a) la composante $u_{\text{exact}}(x, y)$, (b) $v_{\text{exact}}(x, y)$, au temps $T = 1$. La viscosité vaut $\nu = 8 \cdot 10^{-4}$	124
3.9	Équation de Burgers 2D. Profils de la solution issue du schéma classique FTCS : (a) la composante $u_{\text{exact}}(x, y)$, (b) $v_{\text{exact}}(x, y)$, au temps $T = 1$. La viscosité vaut $\nu = 8 \cdot 10^{-4}$. Le pas de temps est de $\Delta t = 5 \cdot 10^{-2}$. Les pas d'espace sont de $\Delta x = \Delta y = 8 \cdot 10^{-2}$	125
3.10	Équation de Burgers 2D. Profils de la solution issue du schéma invariant : (a) la composante $u_{\text{invariant}}(x, y)$, (b) $v_{\text{invariant}}(x, y)$, au temps $T = 1$. La viscosité vaut $\nu = 8 \cdot 10^{-4}$. Le pas de temps est de $\Delta t = 5 \cdot 10^{-2}$. Les pas d'espace sont de $\Delta x = \Delta y = 8 \cdot 10^{-2}$	126
3.11	Équation de Burgers 2D. Erreur relative de la solution issue du schéma classique sur tout le domaine : (a) la composante $u_{\text{FTCS}}(x, y)$, (b) $v_{\text{FTCS}}(x, y)$, au temps $T = 1$. La viscosité vaut $\nu = 8 \cdot 10^{-4}$. Le pas de temps est de $\Delta t = 5 \cdot 10^{-2}$. Les pas d'espace sont de $\Delta x = \Delta y = 8 \cdot 10^{-2}$	127
3.12	Équation de Burgers 2D. Erreur relative de la solution issue du schéma classique sur tout le domaine : (a) la composante $u_{\text{invariant}}(x, y)$, (b) $v_{\text{invariant}}(x, y)$, au temps $T = 1$. La viscosité vaut $\nu = 8 \cdot 10^{-4}$. Le pas de temps est de $\Delta t = 5 \cdot 10^{-2}$. Les pas d'espace sont de $\Delta x = \Delta y = 8 \cdot 10^{-2}$	128
3.13	Équation de Burgers 2D. Erreur relative sur chacune des composantes le long de la diagonale du domaine $\{x = y \mid (x, y) \in \Omega\}$ en fonction de la viscosité : (a) la composante $u_{\text{FTCS}}(x, y)$, (b) $u_{\text{invariant}}(x, y)$. La viscosité ν varie de $8 \cdot 10^{-4}$ à $5 \cdot 10^{-3}$. Le temps d'intégration est $T = 1$. Le pas de temps est de $\Delta t = 5 \cdot 10^{-2}$. Les pas d'espace sont de $\Delta x = \Delta y = 8 \cdot 10^{-2}$	129
3.14	Équation de Burgers 2D. Erreur relative sur chacune des composantes le long de la diagonale du domaine $\{x = y \mid (x, y) \in \Omega\}$ en fonction de la viscosité : (a) la composante $v_{\text{FTCS}}(x, y)$, (b) $v_{\text{invariant}}(x, y)$. La viscosité ν varie de $8 \cdot 10^{-4}$ à $5 \cdot 10^{-3}$. Le temps d'intégration est $T = 1$. Le pas de temps est de $\Delta t = 5 \cdot 10^{-2}$. Les pas d'espace sont de $\Delta x = \Delta y = 8 \cdot 10^{-2}$	130

3.15 Équation de Burgers 1D. *Profils des solutions numériques et de la solution exacte pour différentes vitesses d'entraînement $\lambda = 0, \lambda = 0.5$ et $\lambda = 1$. Le pas d'espace vaut $h = 2.10^{-2}$, et la viscosité est de $\nu = 5.10^{-3}$. Le CFL est égal à $1/2$ référentiel d'origine.* 134

A.1 Sine Gordon. *Solution numérique des solitons dans un domaine périodique $[-10; 10]$ pour un temps $T = 500$. $\Delta x = 5.10^{-2}$ et $\Delta t = 5.10^{-2}$* 155

A.2 Sine Gordon. *Solution numérique des solitons dans un domaine périodique $[-10; 10]$ pour un temps $T = 30$. $\Delta x = 5.10^{-2}$ et $\Delta t = 5.10^{-2}$* 155

A.3 Sine Gordon. *Schéma multisymplectique à 9-points. Dans un domaine périodique $[-10; 10]$. $\Delta x = 5.10^{-2}$ et $\Delta t = 1.10^{-1}$* 156

A.4 Sine Gordon. *En (a) : Variation de $\mathcal{E}(x)$ pour le schéma multisymplectique (MS) et le schéma conservant l'énergie (CE) pour la discrétisation (A.3) de l'énergie E_1 . En (b) : il en est de même pour une discrétisation (A.4) de l'énergie E_2 correspondant à celle préservée par le schéma CE. En (c) et (d) : répartition de $\mathcal{E}(x)$ au cours du temps sur le domaine pour le schéma multisymplectique (MS). Domaine spatial $[-10; 10]$ pour un temps $T = 30$. $\Delta x = 5.10^{-2}$ et $\Delta t = 4.10^{-2}$* 158

B.1 Équation de Burgers. *Temps d'intégration $T = 5$. Le pas d'espace est de $\Delta x = 6.10^{-2}$ sur le domaine $[0, 20]$ (a) profil des solutions numériques en fonction du temps : schéma classique d'ordre 4 (-) et du schéma semi-invariant d'ordre 2 (-). Le pas de temps est de 8.10^{-3} . (b) Évolution de l'erreur relative de l'énergie, en fonction du pas de temps. Le pas de temps Δt varie de 1.10^{-3} à 1.10^{-2}* 163

B.2 Construction du maillage adaptatif. 165

B.3 Stencil pour l'équation de la chaleur non linéaire. 170

Introduction générale

L'utilisation des symétries afin de résoudre des équations était déjà présente dans les travaux d'Évariste Galois (1811-1832) concernant la résolution des équations algébriques. Désirant étendre les résultats aux équations différentielles, Sophus Lie (1842-1899) a établi la théorie des groupes de transformation. Peu après, les travaux d'Emmy Noether (1882-1935) permirent de formaliser le lien entre les lois de conservation et les symétries *variationnelles* [114]. Dès lors, le concept de symétrie s'est intégré dans la Physique moderne, d'abord comme outil pour décrire la mécanique quantique au travers de la théorie des groupes ; puis comme principe permettant de décrire la Nature dans sa structure fondamentale : Wolfgang Ernst Pauli (1900-1958) postule l'existence des *neutrinos* (1930) pour satisfaire la loi de conservation de l'énergie au cours d'une expérience de désintégration. À partir de considérations de symétrie, Murray Gell-Mann suppose l'existence des *quarks* (1964) comme l'un des constituants élémentaire de la matière. En même temps Robert Brout, François Englert et Peter Higgs inventent le *bosons de Higgs* (1964) pour permettre aux particules élémentaires de vérifier les *symétries de jauge* décrivant les interactions fondamentales. Ainsi l'intervention des symétries apparaît naturellement au cœur des structures des systèmes physiques tels qu'on les conçoit de nos jours. Cependant, au sein des Sciences de l'Ingénieur, l'utilisation des symétries n'est apparue que récemment. En mécanique des fluides, les symétries des équations de Navier-Stokes permettent de retrouver des résultats théoriques comme les lois de parois [119], les lois d'échelle [117], ou les solutions autosimilaires qui respecteraient la cascade de Kolmogorov [160]. Dans le domaine de la modélisation de la turbulence, où le coût des simulations numériques à très grand nombre de Reynolds est élevé, il est nécessaire de construire des modèles performants. Les modèles de turbulence aux grandes échelles (*LES, Large-Eddy Simulation*) représentent une approche largement reconnue. Mais la plupart des modèles de la *LES* ne prennent pas en compte le groupe de symétrie des équations de Navier-Stokes. La première construction d'une famille de modèles de sous-maille vérifiant les symétries des équations de Navier-Stokes est due à D. Razafindralandy et A. Hamdouni *et al.* [127] [126] [132]. Le développement a été étendu jusqu'à un modèle de convection thermique [129]. Les premiers succès théoriques d'une approche géométrique dans ce domaine laissent entrevoir le potentiel à exploiter. Sur le plan numérique, l'approche géométrique consiste à trans-

porter la structure des équations sur le plan discret. On parle alors d'intégrateurs géométriques. La philosophie de telles méthodes repose sur l'idée que traduire les propriétés géométriques d'une équation, comme ses lois de conservations, ses solutions autosimilaires ou plus généralement conserver son groupe de symétrie, permet de capturer naturellement la physique décrite par cette équation. La classe des intégrateurs géométriques la plus connue est probablement celle des *intégrateurs symplectiques* pour les systèmes différentiels hamiltoniens. Les systèmes hamiltoniens possèdent une structure *symplectique*. La conservation de celle-ci par une méthode d'intégration permet d'obtenir une meilleure stabilité sur de longs temps d'intégration et de traduire de façon plus précise la conservation de l'énergie. On dit alors que la méthode est symplectique. Il existe une extension aux équations aux dérivées partielles (EDP) hamiltoniennes (Annexe A). Pour la famille plus large d'équations différentielles ordinaires (EDO) dérivant d'un Lagrangien, il existe les *intégrateurs variationnels*. Ceux-ci sont construits en suivant une version discrète d'un calcul de variations sur l'action lagrangienne. On obtient alors les équations discrètes d'Euler-Lagrange, ainsi que la loi discrète d'évolution de l'énergie. Ils sont symplectiques, traduisent des lois de conservations discrètes, et possèdent un bon comportement sur de long temps d'intégration. Là encore, une extension aux EDP dérivant d'un lagrangien existe. Ce sont les intégrateurs variationnels mutlisymplectiques. Ils sont construits en suivant une version discrète d'un calcul de variation, conduisant à la fois aux équations d'Euler-Lagrange et aux lois de conservation. Leurs propriétés sont analogues au cas des systèmes différentiels lagrangiens. Cependant, la plupart des équations de la Mécanique ne dérivent pas d'un lagrangien. Une approche plus générale consiste donc à considérer directement le groupe de symétrie d'une EDP. En effet, on sait depuis les travaux de E. Noëther que les lois de conservation des systèmes dérivant d'une forme lagrangienne sont liées aux symétries de l'intégrale d'action. L'idée fondamentale des intégrateurs utilisant la théorie de Lie est d'exploiter les symétries des équations. Cela permet donc de construire des méthodes qui peuvent s'appliquer à pratiquement tout système d'équations (Annexe B), et qui se basent sur les propriétés intrinsèques de l'ensemble des solutions de l'EDP.

La contribution de mes travaux, dirigés par A. Hamdouni et co-dirigés par P. Sagaut, porte sur :

1. Une application d'un intégrateur symplectique à un modèle d'hydrodynamique bidimensionnel. Ce modèle décrit la dynamique de vortex singuliers. Il possède une formulation de type hamiltonienne. On peut donc appliquer un intégrateur symplectique au système. La première étude consiste en l'étude de la dynamique qualitative d'un système formé de 4 vortex. La seconde étude s'inspire des travaux de E. Bécu *et al.* [9] [10] qui s'intéresse à un système composé de quelques centaines de vortex.
2. Les intégrateurs variationnels représentent une famille d'intégrateurs géomé-

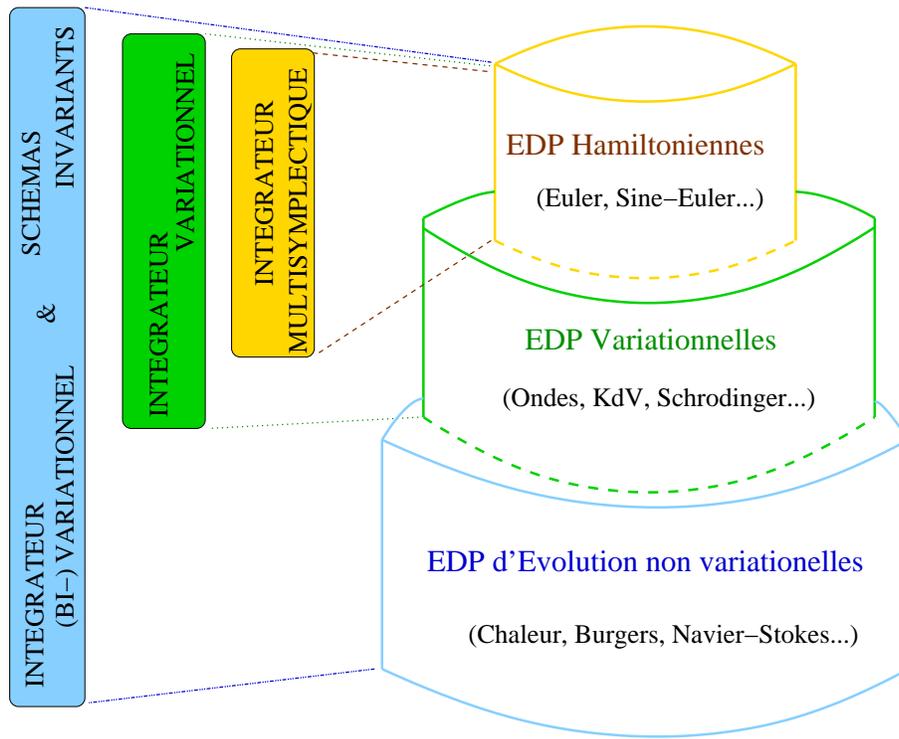


FIG. 1 – Familles d'équations aux dérivées partielles (EDP) et leurs intégrateurs géométriques associés.

triques pour les systèmes lagrangiens. Il n'est donc pas possible de les utiliser pour les équations d'évolutions non variationnelles. À partir de l'extension du formalisme lagrangien aux EDP d'évolution (appelée formalisme bi-lagrangien [71] [126]), il est possible d'étendre les propriétés des intégrateurs variationnels. On présente une méthode de construction d'intégrateurs *bivariationnels*, et on construit un tel intégrateur pour l'équation de la chaleur.

3. Le développement de la méthode d'*invariantisation* d'un schéma numérique, initiée par les travaux de M. Fels et P.J. Olver [42], puis appliquée par P. Kim [79] [80] : cette procédure d'intégration repose sur le concept de *repère mobile* (É. Cartan - 1935). Les qualités des solutions numériques que l'on obtient dépendent complètement du choix des repères mobiles. Jusqu'à présent, ce choix est déterminé par celui des sections transverses aux orbites d'un point solution, grâce à la procédure de normalisation de Cartan ; le choix des sections transverses étant fait à partir de considérations purement géométriques. On propose une application de cette procédure à l'équation de convection-diffusion 1D. Malgré des résultats remarquables, cette procédure ne garantit cependant pas systématiquement de bonnes propriétés numériques. On propose alors une méthode nouvelle de détermination des repères mobiles permettant par construction d'obtenir certaines propriétés numériques. L'application

de ce développement porte sur l'équation de Burgers 1D et 2D.

4. Enfin, grâce au cadre mathématique permettant de décrire les intégrateurs *invariants*, on formalise une propriété nouvelle des schémas numériques liée à leur capacité à respecter les symétries de l'équation continue. Cette propriété, appelée *consistance en symétrie*, traduit l'intuition selon laquelle une partie des erreurs numériques Err_{sym} provient de la brisure de symétrie de la méthode d'intégration. En rendant invariant un schéma, on élimine cette erreur, et donc on réduit l'erreur globale. On montre que la partie d'erreur de consistance en symétrie Err_{sym} varie en fonction de la taille du maillage (et peut alors être réduite si on raffine celui-ci). Le gain numérique d'une procédure d'invariance pour un schéma serait alors d'autant plus visible à partir d'une certaine taille du maillage.

Ce mémoire se décompose comme suit :

- Dans un premier chapitre, on rappelle les propriétés de base des systèmes hamiltoniens. On introduit aussi le formalisme différentiel permettant de décrire de tels systèmes. On introduit alors les intégrateurs symplectiques. Ceux-ci sont comparés avec leur versant classique sur deux exemples élémentaires. Enfin, on présente une application originale sur un modèle bidimensionnel de points-vortex. D'abord à l'étude qualitative d'un système de 4 vortex pouvant avoir une dynamique périodique, quasi-périodique ou chaotique ; puis sur la dynamique d'un système comptant une centaine de vortex s'agglomérant.
- Dans le second chapitre, on traite des systèmes lagrangiens, dont les systèmes hamiltoniens font partie. On rappelle leurs propriétés avant d'introduire les intégrateurs bivariationnels. Ceux-ci sont construits de sorte à vérifier des lois de conservations discrètes, analogues au cas continus. On mentionne l'extension aux EDP lagrangiennes ainsi que leurs propriétés. Enfin, on introduit le concept de bilagrangien permettant de construire des intégrateurs variationnels pour certaines EDP d'évolution.
- Le dernier chapitre constitue le cœur de la thèse. On y présente la méthode d'*invariantisation* des EDP. Cette méthode est basée sur le concept de repères mobiles. On a choisi de développer cette méthode car elle présente les avantages suivants :
 - elle rend complètement invariant par symétrie un schéma numérique,
 - elle peut prendre en compte n'importe quelle symétrie,
 - elle peut s'appliquer à n'importe quelle équation aux différences finies,
 On décrit alors en premier le cadre mathématique permettant de définir les objets utilisés et d'énoncer de façon rigoureuse le théorème fondamental de construction des schémas invariants utilisant les repères mobiles (Théorème 3.3.1). On illustre cette méthode sur l'équation de convection-diffusion 1D. Ensuite, on expose la contribution de ce mémoire à la méthode d'invariantisation : on propose une nouvelle manière de construire les repères mobiles afin

d'obtenir un schéma invariant ayant par construction certaines propriétés numériques. Les performances de l'approche proposée sont testées sur l'équation de Burgers 1D et 2D.

- Enfin, on résume le travail présenté avant de conclure et de proposer des perspectives concernant les méthodes d'intégration géométrique en général, et les méthodes invariantes en particulier.
- en Annexe, on présente dans une première partie l'extension aux EDP hamiltoniennes des intégrateurs symplectiques : les intégrateurs multisymplectiques. Ceux-ci possèdent de bonnes propriétés, mais nécessitent une formulation particulière qu'il est souvent difficile d'obtenir. Seule une poignée d'EDP répondent à ce critère.

Dans une seconde partie, on passe en revue brièvement trois intégrateurs géométriques construits sur des arguments liés aux symétries de l'équation continue. La première méthode consiste en une méthode de semi-invariance. Elle a été introduite par Y. Shokin [142]; les applications aux équations de la mécanique des fluides ont été développées par E. Hoarau *et al.* [58]. La seconde méthode consiste à utiliser une technique de maillage adaptatif afin de rendre le schéma numérique invariant par rapport à la transformation d'échelle. Elle a été développée par C. J. Budd *et al.* [15] [17]. La dernière méthode d'intégration géométrique est due aux travaux de Dorodnitsyn [35]. Elle propose de construire un schéma complètement invariant en fonction des invariants différentiels discrets de l'équation différentielle.

Chapitre 1

Intégrateurs symplectiques

1.1 Introduction

Les systèmes hamiltoniens interviennent dans la Physique en générale (physique statistique, physique quantique, géophysique...). Mais plus particulièrement dans les domaines de la Mécanique, pour lesquels les systèmes conservatifs trouvent une formulation hamiltonienne ; en dynamique stellaire, avec les orbites célestes, en mécanique du solide : le mouvement d'un solide rigide ayant un point fixe et subissant la seule force de pesanteur ; la toupie par exemple a été étudiée par Lagrange (fin XVIIIe). Il est aussi le premier exemple historique pour étudier la *non-intégrabilité*¹ des systèmes (Kowalewska, 1889) ; enfin, en Mécanique des fluides : les équations d'Euler d'un fluide parfait incompressible peuvent être mises sous forme hamiltonienne. On obtient ainsi une approche des équations de Navier-Stokes, dans la limite de faible viscosité loin des parois.

Il est rare que l'on connaisse une solution exacte à un système différentiel hamiltonien. Le recours à des approximations par des méthodes numériques constitue pratiquement le seul moyen d'observer les solutions. Cependant, la physique modélisée par les systèmes hamiltoniens est contenue dans la structure géométrique sous-jacente de ces équations. Cette structure s'inscrit dans le cadre de la géométrie symplectique. Dès lors, une interrogation émerge naturellement : *Quelles sont les conséquences numériques de la (non-)préservation de la structure symplectique par une méthode d'intégration ?*

Dans un premier temps, on présente les systèmes hamiltoniens et leurs propriétés géométriques. Ensuite on montre quelles sont les limites des méthodes numériques classiques pour simuler de tels systèmes. On introduit alors les schémas symplec-

¹un système de dimension $2n$ est intégrable lorsqu'il possède n intégrales premières, indépendantes, et en involution entre elles

tiques, et on illustre leurs performances. Une littérature abondante existe déjà sur les intégrateurs symplectiques [139], [140], [56], [145].

On présente finalement deux applications d'un intégrateur symplectique (de type Runge-Kutta d'ordre 4) dans le contexte d'un modèle d'hydrodynamique bidimensionnelle. La première application sert à appuyer l'importance de conserver la structure des équations dans le cadre d'un système de 4 vortex ponctuels; en effet, le calcul des trajectoires par des méthodes non symplectiques d'ordre moyen (ordre 4) peut conduire à une dynamique qualitativement fautive [123] [11]. Dans une seconde application, en s'inspirant des travaux récents de E. Bécu *et al.* [9], [10], on montre que l'utilisation d'un intégrateur symplectique constitue une méthode naturelle pour traiter un système de $N \gg 1$ vortex ponctuels qui ne peuvent se confondre. Cette méthode possède l'avantage de traduire la dynamique tout en conservant les intégrales premières du système.

Notation du chapitre. Dans le présent chapitre, on utilise les notations suivantes :

- Pour toute fonction dérivable $q : t \mapsto q(t)$, sa dérivée est notée :

$$\dot{q}(t) = \frac{d}{dt}q(t)$$

- Le gradient d'une fonction différentiable f de m variables (x^1, \dots, x^m) est le vecteur de dimension m noté :

$$\nabla f = \left[\frac{\partial f}{\partial x^1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x^m} \right]^T$$

- Lorsque la fonction f est à $2m$ variables $(x^1, \dots, x^m, y^1, \dots, y^m)$, son vecteur de dimension m composé des dérivées partielles par rapport aux variables (x^1, \dots, x^m) est noté :

$$\nabla_x f = \left[\frac{\partial f}{\partial x^1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x^m} \right]^T$$

- Le produit scalaire de deux vecteurs $X = (x^1, \dots, x^m)$ et $Y = (y^1, \dots, y^m)$ est noté par un "." :

$$X \cdot Y = \sum_{i=1}^m x_i y_i$$

De plus, le chapitre traitant des systèmes hamiltoniens on utilise les conventions suivantes :

- La lettre t symbolise la variable indépendante associée au temps. Elle est prise positive réelle $t \in \mathbb{R}_+$.

- L'espace des phases est noté Ω ; c'est un ouvert de \mathbb{R}^d dimension paire $d = 2m$, où m est la dimension du système hamiltonien. Les éléments de Ω sont notés $y = (p, q)^T$, où le vecteur $q = (q^1, \dots, q^m)^T$ représente la position et le vecteur $p = (p^1, \dots, p^m)^T$ représente le moment conjugué associé. Ce sont des fonctions du temps $y : \mathbb{R} \rightarrow \Omega$.
- Le Hamiltonien d'un système est toujours représenté par la lettre H .
- La forme symplectique est notée par la lettre ω .

1.2 Systèmes hamiltoniens.

Dans cette section on présente les systèmes hamiltoniens, ainsi que certaines de leurs propriétés que l'on exploitera par la suite. On introduit ensuite le formalisme différentiel permettant de décrire de tels systèmes.

1.2.1 Définitions et propriétés

On considère un système de m particules dont les positions au temps $t \geq 0$ s'écrivent par le vecteur $q = (q^1(t), \dots, q^m(t))$. Les moments conjugués associés sont notés $p = (p^1(t), \dots, p^m(t))$. On note un domaine ouvert dans l'espace des phases $\Omega \in \mathbb{R}^{2m}$.

Définition 1.2.1 (Système hamiltonien) *Un système hamiltonien autonome de dimension m est un système de $2m$ équations différentielles pouvant s'écrire sous la forme canonique :*

$$\begin{cases} \dot{p} = -\nabla_q H(p, q) \\ \dot{q} = \nabla_p H(p, q) \end{cases} \quad (1.1)$$

où $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction suffisamment régulière indépendante du temps, appelée Hamiltonien du système.

On présente deux propriétés essentielles des systèmes hamiltoniens : la conservation du Hamiltonien le long des trajectoires solutions du système hamiltonien, et la symplecticité du flot hamiltonien.

Proposition 1.2.1 (Conservation du Hamiltonien) *Pour un système hamiltonien autonome, le Hamiltonien H est constant le long des trajectoires (p, q) solutions*

de 1.1 :

$$\frac{dH}{dt} = 0 \quad (1.2)$$

Définition 1.2.2 (Flot hamiltonien) On appelle flot hamiltonien $\phi_{H,t} \equiv \phi_t$ du système hamiltonien (1.1) l'application :

$$\begin{aligned} \phi_t : \quad \Omega &\longrightarrow \Omega \\ (p_0, q_0) &\longmapsto (p(t), q(t)) = \phi_t(p_0, q_0) \end{aligned}$$

qui associe à une condition initiale $(p_0, q_0) = (p(t_0), q(t_0))$ du système (1.1) au temps t_0 la solution au temps $t > t_0$.

La symplecticité du flot hamiltonien signifie que le flot préserve une forme bilinéaire antisymétrique non-dégénérée particulière, appelée forme symplectique :

Soient $\xi = (\xi^p, \xi^q) = (\xi_1^p, \dots, \xi_m^p, \xi_1^q, \dots, \xi_m^q)$ et $\eta = (\eta^p, \eta^q) = (\eta_1^p, \dots, \eta_m^p, \eta_1^q, \dots, \eta_m^q)$ deux vecteurs de l'espace tangent $T_{(p,q)}\Omega$ à un point (p, q) de l'espace des phases $\Omega \in \mathbb{R}^{2m}$. La forme symplectique canonique est la forme bilinéaire antisymétrique sur $(T_{(p,q)}\Omega)^2 = T_{(p,q)}\Omega \times T_{(p,q)}\Omega$:

$$\begin{aligned} \omega_{(p,q)} : \quad (T_{(p,q)}\Omega)^2 &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (\xi, \eta) &\longmapsto \sum_{i=1}^m (\xi_i^p \eta_i^q - \xi_i^q \eta_i^p) \end{aligned}$$

telle que $d\omega = 0$.

Proposition 1.2.2 (Symplecticité du flot hamiltonien) Le flot hamiltonien ϕ_t associé au système (1.1) préserve la forme symplectique ω . Pour toute solution $(p, q) \in \Omega$ de (1.1) et $(\xi, \eta) \in (T_{(p,q)}\Omega)^2$,

$$\omega_{(p,q)}(\xi, \eta) = (\phi_t^* \omega_{(p,q)})(\xi, \eta) \quad (1.3)$$

L'image réciproque (*application pullback*) $\phi_t^* \omega$ est définie par

$$(\phi_t^* \omega_{(p,q)})(\xi, \eta) = \omega_{\phi_t(p,q)}([D\phi_t] \cdot \xi, [D\phi_t] \cdot \eta) \quad (1.4)$$

où $[D\phi_t]$ est l'application linéaire de \mathbb{R}^{2m} dans \mathbb{R}^{2m} définie par la matrice jacobienne de ϕ_t .

En dimension $2m = 2$, la forme symplectique fait correspondre à deux vecteurs $\xi = (\xi^1, \xi^2)$ et $\eta = (\eta^1, \eta^2)$ l'aire orientée du parallélogramme défini par

$$P^2 = \{s\xi + t\eta \mid 0 \leq (s, t) \leq 1\}$$

On retrouve alors le théorème de Liouville qui énonce que le flot hamiltonien préserve le volume dans l'espace des phases.

En dimension supérieure $2m$, $m \geq 2$, la forme symplectique $\omega(\xi, \eta)$ représente la somme des aires des projections de l'hyper-parallélogramme

$$P^{2m} = \left\{ \sum_{i=1}^m (s_i \xi^i + t_i \eta^i) \mid 0 \leq (s_i, t_i) \leq 1, \forall i = 1, \dots, m \right\}$$

sur chacun des plans bidimensionnels $\mathcal{P}_i = \{(p, q) \mid p^j = q^j = 0, \forall j \neq i\}$.

Définition 1.2.3 (Invariant) *On note une solution au temps t pour le système hamiltonien (1.1) dans l'espace des phases par $(p(t), q(t)) \in \Omega$. La solution initiale est notée (p_0, q_0) . Une quantité invariante, ou un invariant, pour un tel système hamiltonien est une application $I : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ qui vérifie à chaque instant le long des trajectoires solutions du système :*

$$I(p(t), q(t)) = I(p_0, q_0) \tag{1.5}$$

Autrement dit, pour toute solution $(p(t), q(t))$, on a la loi de conservation

$$\frac{d}{dt} I = 0$$

Un résultat fondamental concernant les invariants d'un système lagrangien, et donc en particulier ceux d'un système hamiltonien, est donné par le théorème de Noether² (1918). Il affirme qu'à chaque transformation laissant l'action lagrangienne (voir le chapitre suivant) invariante, on peut associer une loi de conservation. Pour les systèmes hamiltoniens, ce théorème permet notamment de relier la conservation du Hamiltonien à l'invariance par translation temporelle ; c'est justement le cas des systèmes hamiltoniens autonomes, auxquels notre étude est restreinte. Une autre application du théorème de Noether est celui des systèmes hamiltoniens invariants par translation spatiale : la quantité de mouvement est la grandeur conservée associée.

1.2.2 Notation différentielle

On présente une notation permettant d'écrire les notions introduites jusqu'à présent. Cette notation est celle des formes différentielles. Elle s'inscrit dans le formalisme de la géométrie symplectique, qui est le cadre naturel pour décrire les systèmes hamiltoniens. On ne présente cependant pas les démonstrations qui ne sont pas nécessaire par la suite.

²Emmy Noether, mathématicienne allemande (1882 - 1935)

2-forme symplectique. On a introduit la forme symplectique ω comme une forme bilinéaire antisymétrique sur un espace vectoriel : $\omega_{(p,q)}$ transforme les couples de vecteurs (ξ, η) appartenant au plan tangent au point (p,q) de l'espace des phases de dimension $2m$. Une telle transformation s'identifie aux 2-formes différentielles par la notation suivante :

$$\begin{aligned}\omega &= dp \wedge dq & (1.6) \\ &= \sum_{i=1}^m dp_i \wedge dq_i (\xi, \eta) \\ &= \sum_{i=1}^m dp_i(\xi)dq_i(\eta) - dq_i(\xi)dp_i(\eta)\end{aligned}$$

où les 1-formes différentielles correspondent pour tout $i = 1, \dots, m$ aux projections suivantes :

$$dp_i(\xi) = \xi_i^p, \quad dq_i(\xi) = \xi_i^q, \quad dp_i(\eta) = \eta_i^p, \quad dq_i(\eta) = \eta_i^q,$$

Symplecticité du flot. La symplecticité du flot $\phi_t : (p, q) \mapsto (\bar{p}, \bar{q}) = (\bar{p}(p, q), \bar{q}(p, q))$ s'écrit :

$$dp \wedge dq = \phi_t^* (dp \wedge dq)$$

Cette condition est équivalente à :

$$[D\phi_t]^T J^{-1} [D\phi_t] = J^{-1}$$

où J est la matrice de structure antisymétrique :

$$J = \begin{pmatrix} 0 & I_m \\ -I_m & 0 \end{pmatrix} \quad \text{où } I_m \text{ est la matrice identité dans } \mathbb{R}^m \quad (1.7)$$

1.3 Intégrateurs classiques des systèmes hamiltoniens.

On vérifie dans cette section la non symplecticité de quelques intégrateurs classiques. On illustre ensuite numériquement les conséquences. Les exemples choisis sont des systèmes hamiltoniens élémentaires mais suffisant pour mettre en avant l'importance de la non conservation de la forme symplectique discrète ω^n , ainsi que les conséquences sur la conservation des intégrales premières, notamment le Hamiltonien discret.

1.3.1 Définitions et exemples

On note y la variable réelle de dimension d dépendante du temps t associée au système différentiel ; celui-ci est déterminé par la fonction vectorielle $F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ ne dépendant pas explicitement du temps :

$$\frac{dy}{dt} = F(y(t)) \quad (1.8)$$

On retrouve la forme (1.1) des systèmes hamiltoniens de dimension paire $d = 2m$ en posant $y(t) = (p(t), q(t))$ et $F = J^{-1}\nabla H$, où J est la matrice de structure (1.7). On note aussi par Ω_d l'espace des phases discret de même dimension que Ω . Les points de Ω_d sont notés $y^n = (p^n, q^n) = (p_1^n, \dots, p_m^n, q_1^n, \dots, q_m^n)$.

Définition 1.3.1 (Flot numérique à 1 pas.) Soit y^n l'approximation numérique au temps t^n des valeurs $y(t^n)$. Le flot numérique à 1 pas associé au système (1.8) est l'application $\Psi_{H,\Delta t}$ qui associe à y^n le point y^{n+1} , approximation de $y(t^n + \Delta t)$:

$$\begin{aligned} \Psi_{H,\Delta t} : \Omega_d &\longrightarrow \Omega_d \\ y^n &\longmapsto y^{n+1} = \Psi_{H,\Delta t}(y^n) \end{aligned}$$

On notera simplement, lorsqu'il n'y a pas d'ambiguïté possible sur le Hamiltonien associé, le flot numérique à 1 pas par $\Psi_{\Delta t}$.

Exemple 1.3.1 Le flot numérique d'un schéma de type Euler (d'ordre 1) s'écrit :

$$\Psi_{\Delta t}^{Euler}(y^n) = y^n + \Delta t F(y^n)$$

Le flot numérique du schéma de Heun (type Runge-Kutta d'ordre 2) s'exprime par :

$$\Psi_{\Delta t}^{Heun}(y^n) = y^n + \frac{\Delta t}{2}(f_1 + f_2)$$

où

$$f_1 = F(y^n), \quad f_2 = F(y^n + \Delta t f_1),$$

Le flot numérique d'un schéma de type Runge-Kutta d'ordre 4 est :

$$\Psi_{\Delta t}^{RK4}(y^n) = y^n + \frac{\Delta t}{6}(f_1 + 2f_2 + 2f_3 + f_4)$$

avec

$$f_1 = F(y^n), \quad f_2 = F(y^n + \frac{\Delta t}{2}f_1), \quad f_3 = F(y^n + \frac{\Delta t}{2}f_2), \quad f_4 = F(y^n + \Delta t f_3),$$

Symplecticité. La symplecticité d'un flot numérique se traduit par la conservation de la forme symplectique discrète au cours du temps :

$$\omega^n = \sum_{i=1}^n dp_i^n \wedge dq_i^n = dp^n \wedge dq^n \quad (1.9)$$

1.3.2 Exemples numériques.

1.3.2.1 L'oscillateur harmonique.

On considère le système (1.1) avec pour Hamiltonien

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2) \quad (1.10)$$

Le Hamiltonien est indépendant du temps, il est donc conservé le long des trajectoires solutions du système. On regarde le comportement des solutions numériques données par les schémas d'Euler d'ordre 1. Ils s'écrivent dans le cas de l'oscillateur harmonique :

$$\begin{cases} p^{n+1} = p^n - \Delta t q^n \\ q^{n+1} = q^n + \Delta t p^n \end{cases} \quad (\text{explicite}) \quad \begin{cases} p^{n+1} = p^n - \Delta t q^{n+1} \\ q^{n+1} = q^n + \Delta t p^{n+1} \end{cases} \quad (\text{implicite})$$

Symplecticité. Lorsque l'espace des phases est de dimension 2, la forme symplectique discrète coïncide avec le volume élémentaire discret $dp^n \wedge dq^n$. La conservation de ce volume est respectée par ces méthodes à $O(\Delta t)^2$ près.

En effet, pour le schéma explicite, on a :

$$\begin{aligned} dp^{n+1} \wedge dq^{n+1} &= (dp^n - \Delta t dq^n) \wedge (dq^n + \Delta t dp^n) \\ &= (1 + (\Delta t)^2)(dp^n \wedge dq^n) \end{aligned} \quad (1.11)$$

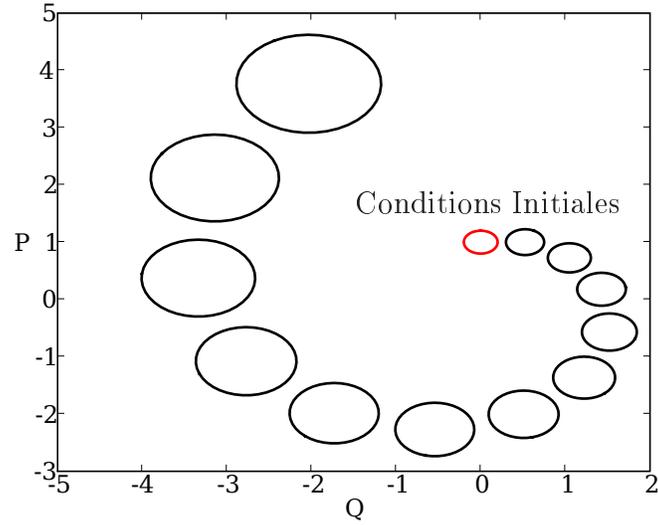
Ce qui signifie qu'un volume élémentaire discret croît à chaque pas de temps d'un facteur $1 + (\Delta t)^2$.

Inversement, un volume élémentaire décroît à chaque nouvelle itération d'un facteur $1 + (\Delta t)^2$ pour le schéma d'Euler implicite :

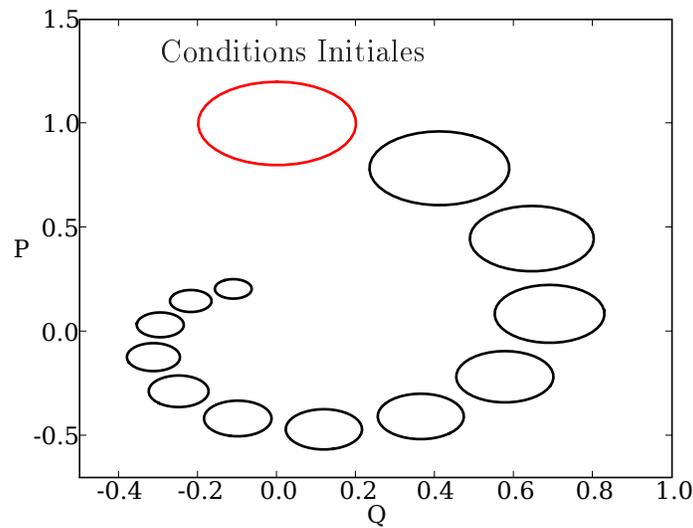
$$dp^{n+1} \wedge dq^{n+1} = \frac{1}{(1 + (\Delta t)^2)}(dp^n \wedge dq^n) \quad (1.12)$$

On illustre le caractère non symplectique des méthodes d'Euler explicite et implicite. En dimension $d = 2$, la symplecticité se traduit par la non conservation de l'aire dans l'espace des phases Ω . On choisit alors une aire initiale \mathcal{A}_0 dans Ω délimitée

par le cercle de centre $p = 1, q = 0$ et de rayon 0.2. La Fig. 1.1 représente l'évolution de \mathcal{A}_0 par les flots numériques associés aux méthodes d'Euler explicite et implicite. L'évolution est représentée à tous les pas de temps $\Delta t = \pi/6$. Sur la Fig. (a),



(a) Euler explicite



(b) Euler implicite

FIG. 1.1 – Oscillateur harmonique 1D. Conservation de l'aire dans l'espace des phases pour l'oscillateur harmonique. L'aire initiale \mathcal{A}_0 (en "—") est celle du disque $\{(p+1)^2 + q^2\}^{\frac{1}{2}} \leq 0.2\}$. Le système est représenté à chaque pas de temps $\Delta t = \pi/6$.

correspondant au schéma d'Euler explicite, on constate que l'aire croît au fur-et-à-mesure du temps, conformément au calcul (1.11). Sur la Fig. (b), correspondant au schéma d'Euler implicite, on observe une diminution de l'aire initiale au cours du

temps, comme le prédit le calcul (1.12).

Dans le cas présent, on interprète l'augmentation de \mathcal{A}_0 par une production d'énergie numérique, la diminution de \mathcal{A}_0 étant associée à une dissipation numérique. Ainsi, au travers d'un exemple élémentaire, la non conservation d'une propriété intrinsèque aux systèmes hamiltoniens se manifeste par une accumulation importante d'erreurs numériques, déformant l'aire initiale et contredisant alors le théorème de Liouville.

Conservation de l'énergie. Le Hamiltonien représente l'énergie totale de l'oscillateur harmonique. Sa conservation traduit l'aspect conservatif du système.

L'énergie discrète correspond au Hamiltonien discret : $H^n = \frac{1}{2}((p^n)^2 + (q^n)^2)$. Pour le schéma d'Euler explicite, on s'attend à un accroissement de l'énergie du même ordre que $(\Delta t)^2$:

$$\frac{1}{2}((p^{n+1})^2 + (q^{n+1})^2) = (1 + (\Delta t)^2) \frac{1}{2}((p^n)^2 + (q^n)^2)$$

De manière similaire, le schéma implicite produit une dissipation de l'énergie, fonction de $(\Delta t)^2$, à chaque pas de temps :

$$\frac{1}{2}((p^{n+1})^2 + (q^{n+1})^2) = \frac{1}{(1 + (\Delta t)^2)} \frac{1}{2}((p^n)^2 + (q^n)^2)$$

On montre dans quelle mesure les schémas d'Euler explicite et implicite ne conservent pas l'énergie discrète. Pour l'exemple présent, on considère un oscillateur harmonique dont la condition initiale est fixée en $(p^0 = 1, q^0 = 0)$. Le pas de temps varie pour chacune des simulations : $\Delta t = 2.10^{-2}, 6.10^{-2}$, puis 1.10^{-1} . Le temps d'intégration vaut $T = 5$. L'énergie initiale discrète est $H_0 = 0.5$. La Fig. (1.2) représente l'évolution de l'erreur relative de l'énergie discrète $E_{rel,H}^n = |H^n - H_0|/|H_0|$ au cours du temps par les méthodes d'Euler explicite et implicite. On constate une croissance de $E_{rel,H}^n$ pour chacune des méthodes. Le raffinement du pas de temps ne permet seulement que de diminuer le taux d'accroissement de l'erreur. Mais même pour un $\Delta t = 2.10^{-2}$, l'erreur relative atteint 10% au bout de 250 itérations. On peut alors s'attendre à une solution numérique loin de la solution physique sur de long temps d'intégration.

Par ailleurs, ce résultat corrobore l'interprétation de l'expérience précédente, selon laquelle les méthodes d'Euler produisent un gain ou une dissipation numérique de l'énergie.

1.3.2.2 Le problème de Kepler

Le problème de Kepler correspond au mouvement plan d'une planète gravitant autour d'une étoile. Il est décrit par un système hamiltonien, de Hamiltonien :

$$H = (p_1^2 + p_2^2)/2 - (q_1^2 + q_2^2)^{-1/2} \quad (1.13)$$

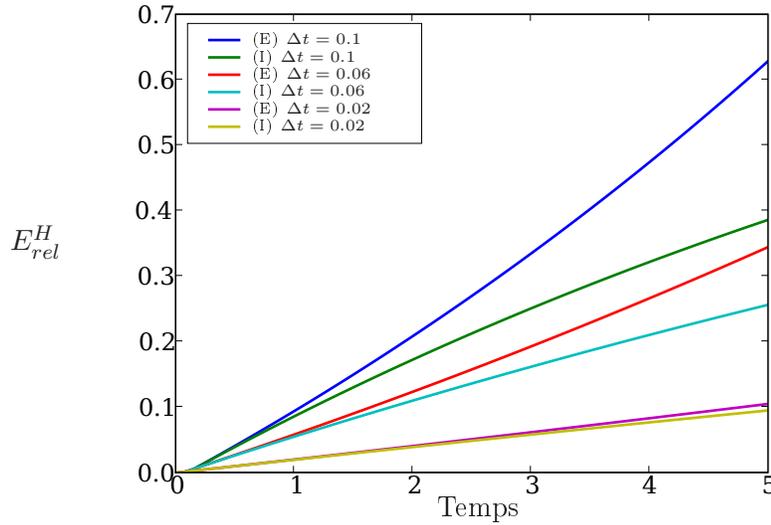


FIG. 1.2 – Oscillateur harmonique 1D. Évolution de l'erreur relative en l'énergie, en fonction du temps, pour les schémas d'Euler explicite (E) et implicite (I). Le pas de temps Δt varie de $2 \cdot 10^{-2}$ à 10^{-1} . Temps d'intégration $T = 5$.

Le système différentiel s'écrit sous forme canonique dans l'espace des phases $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}_*^2$:

$$\begin{cases} \dot{p}_1 &= -q_1(q_1^2 + q_2^2)^{-3/2} \\ \dot{p}_2 &= -q_2(q_1^2 + q_2^2)^{-3/2} \\ \dot{q}_1 &= p_1 \\ \dot{q}_2 &= p_2 \end{cases} \quad (1.14)$$

Le Hamiltonien étant indépendant du temps, il est conservé le long des solutions du système. De plus, le moment angulaire $L = q_1 p_2 - q_2 p_1$ est lui aussi³ conservé au cours du temps le long des trajectoires solutions du système. En effet :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}L &= \frac{\partial L}{\partial t} + \sum_{i=1}^2 \frac{\partial L}{\partial p^i} \frac{dp^i}{dt} + \frac{\partial L}{\partial q^i} \frac{dq^i}{dt} \\ &= 0 - q_2(-q_1(q_1^2 + q_2^2)^{-3/2}) + p_2 p_1 + q_1(-q_2(q_1^2 + q_2^2)^{-3/2}) - p_1 p_2 \\ &= 0 \end{aligned}$$

Conservation des invariants. On propose d'illustrer la non conservation exacte des invariants d'un système hamiltonien par des schémas de type Runge-Kutta (RK). Dans le cas du problème de Kepler de dimension $2m = 4$, on choisit d'observer

³il existe d'autres quantités invariantes pour ce système

l'évolution de l'énergie discrète, coïncidant avec le Hamiltonien discret

$$H^n = ((p_1^n)^2 + (p_2^n)^2)/2 - ((q_1^n)^2 + (q_2^n)^2)^{-1/2}$$

ainsi que celle du moment angulaire discret

$$L^n = q_1^n p_2^n - q_2^n p_1^n$$

La condition initiale du système est fixée à $p_1 = 0$, $p_2 = \sqrt{3}$, $q_1 = 1/2$ et $q_2 = 0$. On effectue quatre simulations pour lesquelles le pas de temps vaut $\Delta t = 1.10^{-2}$, 2.10^{-2} , 4.10^{-2} et 5.10^{-2} . Le temps d'intégration est $T = 10^3$. Le Hamiltonien initial a pour valeur $H_0 = -\frac{1}{2}$. Le moment angulaire initial vaut quant à lui $L_0 = \frac{\sqrt{3}}{2}$. Les Fig. (1.3) et (1.4) représentent l'évolution de l'erreur relative en énergie $E_{err,H}^n$ pour une méthode de type RK respectivement d'ordre 2 (méthode de Heun, notée RK2), et d'ordre 4 (notée RK4). Bien qu'une méthode d'ordre plus élevée permette d'obtenir une erreur relative moins importante, l'évolution de cette dernière est comparable sur de grands temps d'intégration : elle augmente de plusieurs ordre de grandeur. De plus, pour chacune des figures, on constate que le taux d'accroissement de l'erreur relative est le même entre chaque courbe. Ainsi, les méthodes de type RK ne permettent pas de traduire correctement la conservation des invariants. Même l'augmentation de l'ordre de la méthode ne suffit pas lorsqu'on intègre sur de long temps.

1.4 Les schémas symplectiques.

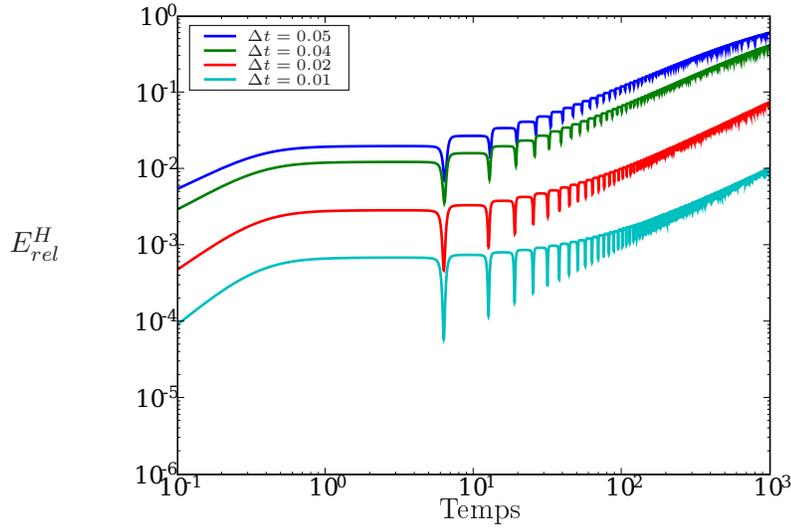
On introduit à présent les intégrateurs symplectiques, ainsi que les résultats essentiels permettant d'évaluer leur performances. On propose des exemples de schémas symplectiques. Avec ces schémas, on reproduit les tests effectués et présentés dans la section précédente afin d'apprécier le gain de performance obtenu.

1.4.1 Définitions et propriétés.

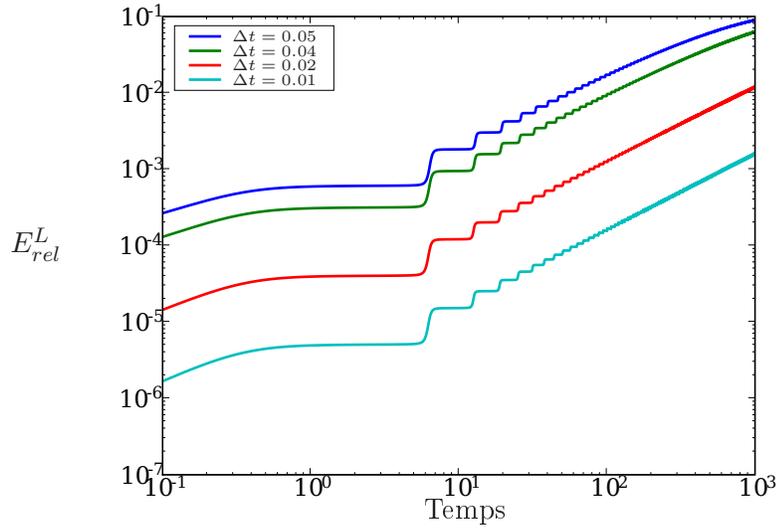
Les schémas symplectiques sont construits pour conserver exactement la forme symplectique discrète.

Définition 1.4.1 (Schéma symplectique.) *Un schéma numérique pour le système d'équations (1.8) est dit symplectique si son flot préserve la 2-forme symplectique discrète :*

$$\omega^n = \sum_{i=1}^m dp_i^n \wedge dq_i^n$$



(a) Erreur relative de l'énergie discrète



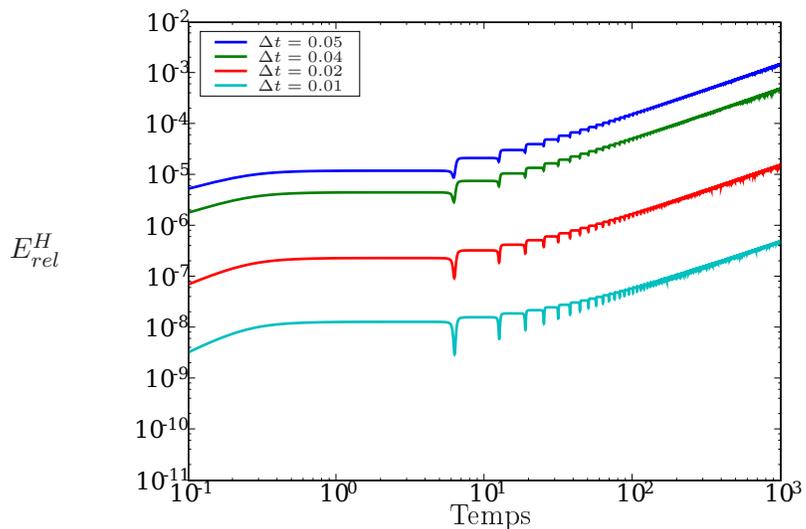
(b) Erreur relative du moment angulaire discret

FIG. 1.3 – Problème de Kepler plan. Évolution par une méthode de type Runge-Kutta d'ordre 2 de grandeurs conservées : l'énergie discrète H^n et le moment angulaire discret L^n . Le pas de temps Δt varie de 1.10^2 à 5.10^2 . Le temps d'intégration est de $T = 10^3$. Echelle log-log.

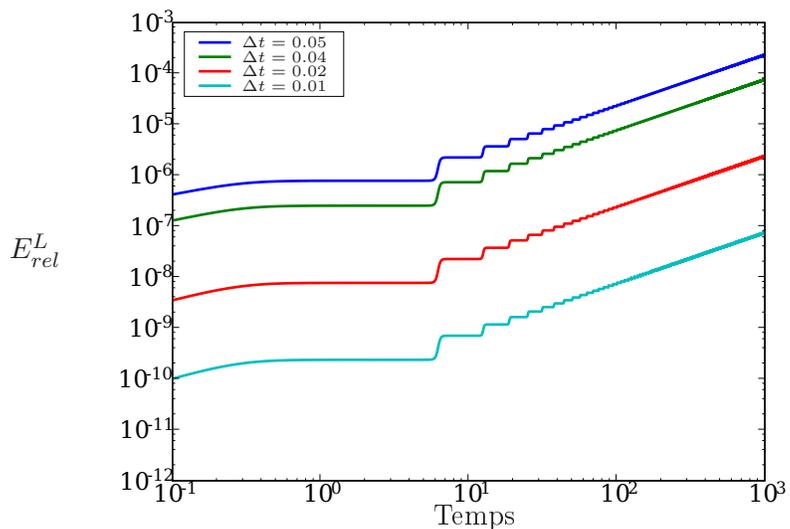
En particulier dans l'espace des phases de dimension 2, l'élément d'aire $dp^n \wedge dq^n$ est conservé au cours du temps :

$$dp_i^{n+1} \wedge dq_i^{n+1} = dp_i^n \wedge dq_i^n \quad (1.15)$$

Les schémas symplectiques garantissent la conservation de la forme symplectique discrète. Cependant, le Hamiltonien discret n'est en général pas conservé exactement,



(a) Erreur relative de l'énergie discrète



(b) Erreur relative du moment angulaire discret

FIG. 1.4 – Problème de Kepler plan. Évolution par une méthode de type Runge-Kutta d'ordre 4 de grandeurs conservées : l'énergie discrète H^n et le moment angulaire discret L^n . Le pas de temps Δt varie de 1.10^2 à 5.10^2 . Le temps d'intégration est de $T = 10^3$. Echelle log-log.

tout comme les autres invariants du système hamiltonien. Il existe néanmoins un résultat de conservation exacte restreint aux invariants quadratiques par les méthodes de type RK [31] :

Théorème 1.4.1 (Conservation des invariants quadratiques) *On note sous*

la forme vectorielle $y(t) = (p(t), q(t))^T$ un point de l'espace des phases, et par y^T sa transposée. Un invariant I pour le système hamiltonien (1.1) est quadratique s'il existe une matrice symétrique constante S telle que

$$I(y) = \frac{1}{2}y^T S y$$

Alors les méthodes de type Runge-Kutta symplectiques conservent l'invariant quadratique discret $I^n = \frac{1}{2}(y^n)^T S y^n$ de façon exacte au cours du temps.

Ce théorème s'applique en fait à tout système différentiel autonome. Cependant, Marsden et Ge [47] ont montré qu'un intégrateur symplectique ne peut pas préserver le Hamiltonien exactement. Toutefois, il existe un théorème permettant d'évaluer l'erreur numérique sur H au cours du temps [55] : on rappelle les idées principales pour établir ce théorème important ; afin d'énoncer le théorème de conservation du Hamiltonien pour les intégrateurs symplectiques. On ne reproduit pas les détails des démonstrations qui se trouvent par exemple dans [140]. Les exemples d'illustration se trouvent dans la section suivante.

Conservation du Hamiltonien. Le théorème de conservation du Hamiltonien par une méthode symplectique s'appuie sur la construction d'un *Hamiltonien modifié* \tilde{H} engendrant un *système d'équations différentielles modifié*. Le Hamiltonien modifié est construit à partir du Hamiltonien H du système d'origine et d'un flot numérique. Lorsque ce dernier est symplectique et d'ordre p , le système d'équations différentielles modifié est aussi hamiltonien. Il existe alors une constante C telle que l'erreur numérique sur le Hamiltonien par la méthode symplectique soit en $C\Delta t^p$ sur des temps d'intégration exponentiellement longs.

Soit un système d'équations différentielles

$$\dot{y}(t) = F(y)$$

dont les solutions associées à la condition initiale $y(0) = y_0$ sont données par le flot $\phi_t(y_0) = y(t)$. On considère une méthode d'intégration pour ce système d'équations différentielles déterminé à chaque pas de temps Δt par le flot numérique $\phi_{\Delta t}(y^n) = y^{n+1}$. On appelle système d'équations différentielles modifié le système différentiel :

$$\begin{aligned} \dot{y}(t) &= F_{\Delta t}(y) \\ F_{\Delta t}(y) &= F(y) + \Delta t F_2(y) + \Delta t^2 F_3(y) + \dots \end{aligned} \quad (1.16)$$

tel que ses solutions $\tilde{y}(t)$ coïncident exactement avec les solutions données par le flot numérique au sens où pour tout n , $\tilde{y}(n\Delta t) = y^n$.

Proposition 1.4.2 (Hamiltonien modifié) *Lorsque le système différentiel est un système hamiltonien autonome de Hamiltonien $H(p,q)$, où (p,q) sont les coordonnées dans l'espace des phases Ω , et que la méthode d'intégration est symplectique d'ordre r , alors le système différentiel modifié est aussi hamiltonien, de Hamiltonien modifié :*

$$\tilde{H}(p,q) = H(p,q) + \Delta t^r H_{r+1}(p,q) + \dots + \Delta t^{N-1} H_N(p,q) \quad (1.17)$$

Le caractère symplectique de la méthode d'intégration est nécessaire pour que le système différentiel modifié soit hamiltonien. Le théorème suivant est un résultat fondamental sur les intégrateurs symplectiques :

Théorème 1.4.3 (Conservation du Hamiltonien) *On se place dans les conditions du théorème précédent, en considérant une méthode symplectique d'ordre r dont le flot numérique est $\phi_{\Delta t} : (p_0, q_0) \mapsto (p^n, q^n)$. Alors le Hamiltonien discret est conservé à $O(\Delta t^r)$ près sur un temps d'intégration exponentiellement long : il existe une constante $\gamma > 0$ telle que :*

$$H^n = H(p^n, q^n) = H_0 + O(\Delta t^r), \quad \text{pour } n\Delta t \leq e^{\frac{\gamma}{2\Delta t}}, \quad (1.18)$$

1.4.2 Quelques intégrateurs symplectiques

On présente quelques méthodes symplectiques ainsi que leurs propriétés [139], [140], [56], [145].

1.4.2.1 Euler symplectique.

À partir du schéma classique d'Euler, on construit un schéma symplectique d'ordre 1 pour le système (1.1) :

$$\begin{cases} p^{n+1} = p^n - \Delta t \nabla_q H(p^{n+1}, q^n) \\ q^{n+1} = q^n + \Delta t \nabla_p H(p^{n+1}, q^n) \end{cases} \quad (1.19)$$

On montre qu'il conserve bien la forme symplectique discrète en écrivant le système sous la forme :

$$\begin{cases} p^{n+1} = p^n - \Delta t F(p^{n+1}, q^n) \\ q^{n+1} = q^n + \Delta t G(p^{n+1}, q^n) \end{cases}$$

où $F \equiv \nabla_q H$ et $G \equiv \nabla_p H$.

et donc

$$\begin{aligned} dp^{n+1} &= dp^n - \Delta t \left(\frac{\partial F}{\partial p^{n+1}} dp^{n+1} + \frac{\partial F}{\partial q^n} dq^n \right) \\ dq^{n+1} &= dq^n + \Delta t \left(\frac{\partial G}{\partial p^{n+1}} dp^{n+1} + \frac{\partial G}{\partial q^n} dq^n \right) \end{aligned}$$

soit :

$$\begin{aligned} (1 + \Delta t \frac{\partial F}{\partial p^{n+1}}) dp^{n+1} &= dp^n - \Delta t \frac{\partial F}{\partial q^n} dq^n \\ (1 + \Delta t \frac{\partial F}{\partial p^{n+1}}) dq^{n+1} &= (1 + \Delta t \frac{\partial F}{\partial p^{n+1}} - \Delta t^2 \frac{\partial G}{\partial p^{n+1}} \frac{\partial F}{\partial q^n} + (1 + \Delta t \frac{\partial F}{\partial p^{n+1}}) \Delta t \frac{\partial G}{\partial q^n}) dq^n \\ &\quad + \Delta t \frac{\partial G}{\partial p^{n+1}} dp^n \end{aligned}$$

grâce à l'égalité des dérivées secondes croisées du Hamiltonien : $\frac{\partial F}{\partial p} = \frac{\partial G}{\partial q}$, on trouve la conservation de la forme volume discrète au cours du temps :

$$dp^{n+1} \wedge dq^{n+1} = dp^n \wedge dq^n$$

1.4.2.2 Méthode du point milieu.

On construit une méthode symplectique d'ordre 2 en considérant le gradient symplectique du Hamiltonien discret au point $(p^{n+1/2}, q^{n+1/2}) = (\frac{p^{n+1}+p^n}{2}, \frac{q^{n+1}+q^n}{2})$:

$$\begin{cases} p^{n+1} = p^n - \Delta t \nabla_q H(p^{n+1/2}, q^{n+1/2}) \\ q^{n+1} = q^n + \Delta t \nabla_p H(p^{n+1/2}, q^{n+1/2}) \end{cases} \quad (1.20)$$

Un calcul analogue au précédant permet d'obtenir le caractère symplectique de la méthode (1.20) :

en écrivant le système sous forme :

$$\begin{cases} p^{n+1} = p^n - \Delta t F(P, Q) \\ q^{n+1} = q^n + \Delta t G(P, Q) \end{cases}$$

où $F \equiv \nabla_q H$ et $G \equiv \nabla_p H$, et $P = p^{n+1/2}$ et $Q = q^{n+1/2}$.

alors :

$$\begin{aligned} dp^{n+1} &= dp^n - \Delta t \left(\frac{\partial F}{\partial P} \left(\frac{\partial P}{\partial p^{n+1}} dp^{n+1} + \frac{\partial P}{\partial p^n} dp^n \right) + \frac{\partial F}{\partial Q} \left(\frac{\partial Q}{\partial q^{n+1}} dq^{n+1} + \frac{\partial Q}{\partial q^n} dq^n \right) \right) \\ dq^{n+1} &= dq^n + \Delta t \left(\frac{\partial G}{\partial P} \left(\frac{\partial P}{\partial p^{n+1}} dp^{n+1} + \frac{\partial P}{\partial p^n} dp^n \right) + \frac{\partial G}{\partial Q} \left(\frac{\partial Q}{\partial q^{n+1}} dq^{n+1} + \frac{\partial Q}{\partial q^n} dq^n \right) \right) \end{aligned}$$

or

$$\frac{\partial P}{\partial p^{n+1}} = \frac{\partial P}{\partial p^n} = \frac{1}{2}, \quad \frac{\partial Q}{\partial q^{n+1}} = \frac{\partial Q}{\partial q^n} = \frac{1}{2},$$

En prenant en compte l'égalité des dérivées secondes croisées du Hamiltonien, c'est-à-dire $\frac{\partial F}{\partial P} = \frac{\partial G}{\partial Q}$, on peut donc écrire le système équivalent sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{bmatrix} A & -B \\ -C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dp^{n+1} \\ dq^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D & B \\ C & A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dp^n \\ dq^n \end{bmatrix}$$

avec :

$$A = 1 + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial F}{\partial P}, \quad B = \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial F}{\partial Q}, \quad C = \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial G}{\partial P}, \quad D = 1 - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial G}{\partial Q},$$

En inversant la matrice du membre de gauche, le système se met sous la forme :

$$\begin{bmatrix} dp^{n+1} \\ dq^{n+1} \end{bmatrix} = \frac{1}{AD - BC} \begin{bmatrix} D^2 + BC & B(D + A) \\ C(D + A) & A^2 + BC \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dp^n \\ dq^n \end{bmatrix}$$

Le calcul du produit extérieur de dp^{n+1} avec dq^{n+1} donne :

$$\begin{aligned} dp^{n+1} \wedge dq^{n+1} &= \frac{1}{(AD - BC)^2} ((D^2 + BC)(A^2 + CB) - CB(D + A)^2) dp^n \wedge dq^n \\ &= dp^n \wedge dq^n \end{aligned}$$

La méthode est bien symplectique.

1.4.2.3 Méthode de type Runge-Kutta.

De nombreuses méthodes symplectiques de type Runge-Kutta sont détaillées dans [140]. La forme générale d'une méthode de Runge-Kutta à s étapes est définie pour les systèmes hamiltoniens par :

$$\left\{ \begin{array}{l} Q_i = q^n + \Delta t \sum_{j=1}^s a_{ij} F_j \quad i = 1 \cdots s. \\ P_i = p^n + \Delta t \sum_{j=1}^s a_{ij} G_j \quad i = 1 \cdots s. \\ q^{n+1} = q^n + \Delta t \sum_{i=1}^s b_i F_i \\ p^{n+1} = p^n + \Delta t \sum_{i=1}^s b_i G_i \end{array} \right. \quad (1.21)$$

où $F_i = \nabla_p H(Q_i, P_i)$ et $G_i = -\nabla_q H(Q_i, P_i)$.

Remarque 1 Une méthode Runge-Kutta est explicite si les coefficients $\{a_{ij}\}$ sont tels que $a_{ij} = 0$ pour $j \geq i$. Elle est implicite sinon.

Théorème 1.4.4 (Schéma Runge-Kutta symplectique) Une condition nécessaire et suffisante pour que la méthode de Runge-Kutta soit symplectique est la nullité de sa matrice de stabilité algébrique [140] :

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0 \quad \forall i, j = 1, \dots, s. \quad (1.22)$$

Remarque 2 Les schémas symplectiques du type Runge-Kutta sont toujours implicites.

Exemple 1.4.1 (Méthode du point milieu) La méthode du point milieu est un cas particulier de méthode du type Runge-Kutta, d'ordre 2 à une étape intermédiaire. Les coefficients de la méthode sont dans ce cas :

$$a = 1/2, \quad b = 1,$$

Dans les applications à la Mécanique des fluides de la section suivante, on utilise une méthode de Runge-Kutta symplectique d'ordre 4 (RKS4) à pas constants. On présente un algorithme de construction d'un tel schéma pour le système (1.8) :

RK symplectique d'ordre 4 à pas fixe. La construction de la méthode de Runge-Kutta est basée sur une méthode de *collocation* : cela consiste à déterminer un polynôme permettant d'évaluer la fonction F sur des points intermédiaires de l'intervalle de temps. Le degré du polynôme dépend du nombre de points intermédiaires que l'on s'est fixé. Notons de plus que le choix des points intermédiaires permet de rendre la méthode symplectique.

La méthode étant choisie à quatre étapes, il y a trois points intermédiaires ξ_1 , ξ_2 et ξ_3 . L'intégration de $y(t)$ à $y(t+h)$ s'effectue de la manière suivante :

$$y(t+h) = y(t) + h b_1 F\left(t + \frac{b_1}{2}h, \xi_1\right) + h b_2 F\left(t + \left(b_1 + \frac{b_2}{2}\right)h, \xi_2\right) + h b_3 F\left(t + \left(b_1 + b_2 + \frac{b_3}{2}\right)h, \xi_3\right)$$

où les ξ_i sont calculés implicitement par :

$$\begin{aligned} \xi_1 &= y(t) + h \frac{b_1}{2} F\left(t + \frac{b_1}{2}h, \xi_1\right) \\ \xi_2 &= y(t) + h b_1 F\left(t + \left(b_1 + \frac{b_2}{2}\right)h, \xi_1\right) + h \frac{b_2}{2} F\left(t + \left(b_1 + \frac{b_2}{2}\right)h, \xi_2\right), \\ \xi_3 &= y(t) + h b_1 F\left(t + \left(b_1 + b_2 + \frac{b_3}{2}\right)h, \xi_1\right) + h b_2 F\left(t + \left(b_1 + b_2 + \frac{b_3}{2}\right)h, \xi_2\right) \\ &\quad + h \frac{b_3}{2} F\left(t + \left(b_1 + b_2 + \frac{b_3}{2}\right)h, \xi_3\right) \end{aligned}$$

Un jeu de coefficients b_i assurant la symplecticité de la méthode est [140] :

$$b_1 = \frac{1}{3}(2 + 2^{1/3} + 2^{-1/3}), \quad b_2 = 1 - 2b_3, \quad b_3 = b_1,$$

Il existe plusieurs variantes de *symplectisation* des méthodes de Runge-Kutta : citons les méthodes de Gauss-Legendre, dont la méthode du point milieu est un exemple. Elles permettent d'optimiser le rapport entre le nombre d'étapes s et l'ordre de la méthode, qui est alors égale à $2s$. Les méthodes de Radau IB et Radau IIB sont construites par collocation par des polynômes de Radau [146]. Si le Hamiltonien est séparable $H(p,q) = T(p) + V(q)$, alors on peut appliquer les méthodes de Runge-Kutta symplectiques partitionnées ; celles-ci peuvent avoir une formulation explicite [56].

Si de plus, l'énergie cinétique prend la forme particulière $T(p) = \frac{1}{2}p^T S p$ où S est une matrice symétrique constante, alors le système hamiltonien peut s'écrire comme une équation du second ordre :

$$q'' = -S \nabla_q V(q)$$

On peut alors appliquer une méthode dite de Runge-Kutta-Nyström [140].

Mentionons aussi les méthodes de type Runge-Kutta symplectique à pas adaptatifs. Un des gains à ces méthodes est qu'en relativement peu d'itérations, il est possible de rendre compte de façon satisfaisante de la trajectoire périodique de certains systèmes hamiltoniens [54]. Il existe aussi les méthodes type RK préservant les invariants algébriques [72], ceux préservant les symétries en général [109], [124].

Les techniques classiques d'amélioration des méthodes numériques pour les systèmes hamiltoniens s'appliquent aux intégrateurs symplectiques comme l'analyse d'erreur rétrograde [135]. Notons par ailleurs que la conservation du volume peut être obtenue par des techniques comme les méthodes de splitting ou de correction [110].

1.4.3 Exemples numériques.

On illustre les performances des intégrateurs symplectiques décrites à la section précédente. Les exemples sont les mêmes que ceux présentés dans la section portant sur les méthodes d'intégration classiques. Les simulations sont effectuées dans les mêmes conditions.

1.4.3.1 L'oscillateur harmonique

On regarde les propriétés des schémas symplectiques d'ordre 1 et 2, appliqués au système (1.1) de Hamiltonien (1.10).

Le schéma d'Euler symplectique (d'ordre 1) s'écrit dans ce cas :

$$\begin{cases} p^{n+1} = p^n - \Delta t q^n \\ q^{n+1} = q^n + \Delta t p^{n+1} \end{cases} \quad (1.23)$$

Le schéma du point milieu (d'ordre 2) s'écrit quant à lui :

$$\begin{cases} p^{n+1} = p^n - \frac{\Delta t}{2}(q^n + q^{n+1}) \\ q^{n+1} = q^n + \frac{\Delta t}{2}(p^n + p^{n+1}) \end{cases} \quad (1.24)$$

Symplecticité. Par construction, la forme symplectique discrète est exactement préservée par ces méthodes. On illustre cette propriété sur l'exemple de l'oscillateur harmonique de dimension $m = 1$. La symplecticité se traduit par la conservation du volume dans l'espace des phases de dimension $2m = 2$. Les conditions de la simulation numérique sont les mêmes que celles décrites dans la sous section (1.3.2.1). Sur la Fig. (1.5) (a), correspondant au schéma d'Euler symplectique, on observe une déformation du disque initial au cours du temps ; cependant l'aire semble y être pratiquement constante. Sur la Fig. (1.5) (b), correspondant à la méthode du point milieu, l'aire du disque initial est conservée ; cela se voit d'autant mieux que la forme du disque paraît inchangée au cours du temps. Ainsi, la symplecticité des méthodes se traduit bien par la préservation exacte de l'aire dans l'espace des phases en dimension 2, mais le domaine initiale peut être déformé.

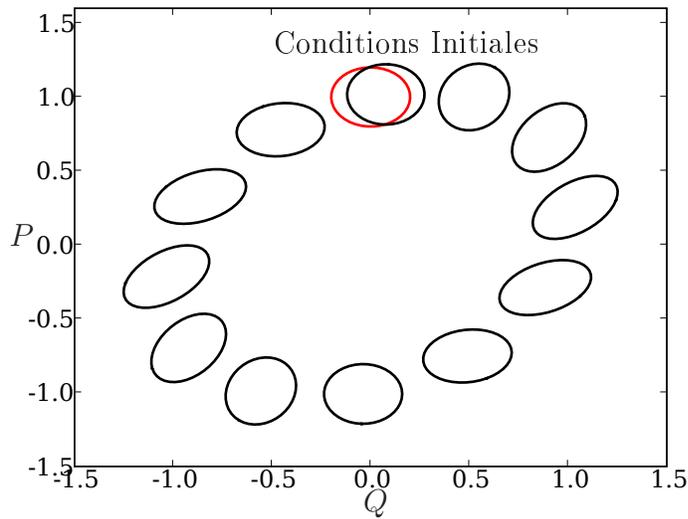
Remarque 3 *En interprétant l'augmentation ou la diminution, ou plus généralement la déformation du domaine initial comme un gain (ou une perte) d'énergie numérique, on s'attend comme conséquence à ce que la production (ou la dissipation) en énergie numérique soit très faible, voire quasi-nulle comme dans le cas de la méthode du point milieu où le domaine initial semble inchangé.*

Conservation de l'énergie. Pour le schéma d'Euler symplectique, le théorème (1.4.3) prédit une conservation de l'énergie de l'ordre de Δt sur des temps exponentiellement longs. En effet, un calcul direct de l'énergie discrète associé à ce schéma donne :

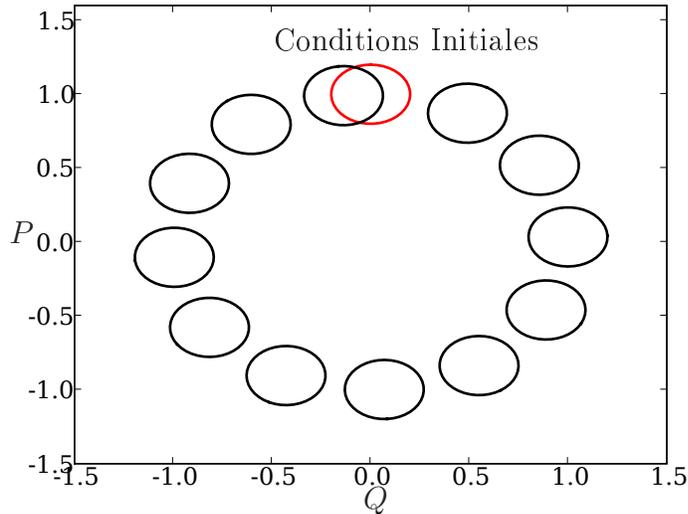
$$\begin{aligned} (p^{n+1})^2 + (q^{n+1})^2 &= (p^n - \Delta t q^n)^2 + (q^n + \Delta t (p^n - \Delta t q^n))^2 \\ &= (p^n)^2 + (q^n)^2 + \Delta t^2 ((p^n)^2 - (q^n)^2 - 2p^n q^n) + \Delta t^4 (q^n)^2 \end{aligned}$$

La méthode du point milieu est une méthode de type RKSymplect. Le Hamiltonien étant un invariant quadratique, le théorème (1.4.1) en garantit une conservation exacte ; en effet, on peut écrire le système (1.24) sous la forme :

$$\begin{cases} p^{n+1} = Ap^n - Bq^n \\ q^{n+1} = Bp^n + Aq^n \end{cases}$$



(a) Euler symplectique



(b) Méthode du point milieu

FIG. 1.5 – Oscillateur harmonique 1D. Conservation de l'aire dans l'espace des phases par des méthodes symplectiques : (a) méthode d'Euler symplectique, (b) : méthode du point milieu. L'aire initiale \mathcal{A}_0 (en "—") est celui du disque $\{((p+1)^2 + q^2)^{\frac{1}{2}} \leq 0.2\}$. Le système est représenté à chaque pas de temps $\Delta t = \pi/6$.

avec :

$$A = \frac{4 - \Delta t^2}{4 + \Delta t^2}, \quad B = \frac{4\Delta t}{4 + \Delta t^2},$$

Alors

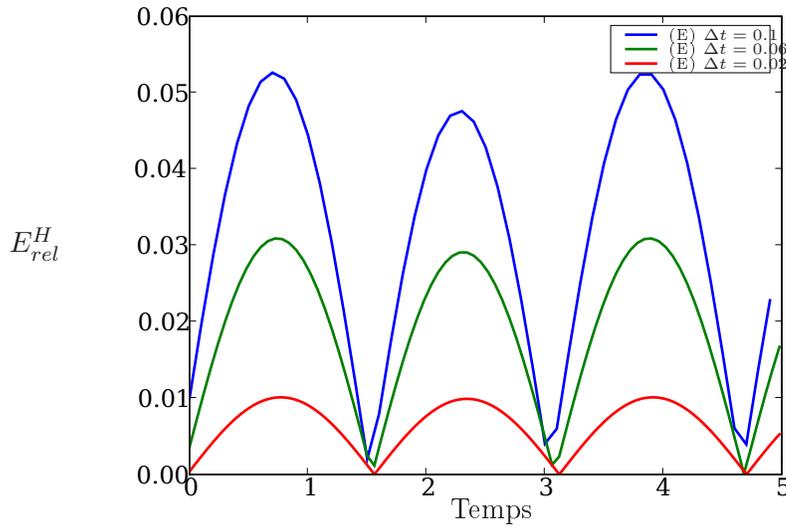
$$\begin{aligned}(p^{n+1})^2 + (q^{n+1})^2 &= (Ap^n - Bq^n)^2 + (Bp^n + Aq^n)^2 \\ &= (A^2 + B^2)((p^n)^2 + (q^n)^2) \\ &= ((p^n)^2 + (q^n)^2)\end{aligned}$$

On illustre numériquement la capacité des méthodes symplectiques d'Euler et du point milieu à l'énergie discrète. Les conditions de simulation sont analogues à celles du test du paragraphe (1.3.2.1) pour les méthodes d'intégration classiques. La Fig. (1.6) affiche l'évolution de l'erreur relative de l'énergie discrète $|H^n - H_0|/H_0$, où $H^n = \frac{1}{2}((p^n)^2 + (q^n)^2)$, pour $n \geq 0$, sur un temps d'intégration égal à $T = 5$. Trois simulations sont effectuées ; pour chacune d'elles, le pas de temps vaut $\Delta t = 2.10^{-2}$, 6.10^{-2} et 1.10^{-1} . On voit sur la Fig. (1.6) (a) que la variation de l'erreur relative est périodique ; la moyenne sur chaque période paraît constante. Le fait de raffiner le pas de temps permet d'obtenir, comme dans le cas classique, une diminution de la valeur de l'erreur relative. On souligne cependant que même avec un pas de temps de 10^{-1} , l'erreur relative en énergie pour le schéma d'Euler symplectique est comparable à celle donnée par un schéma d'Euler classique avec un pas de temps 10 fois plus petit ! Sur la Fig. (1.6) (b), on constate que la méthode du point milieu préserve exactement l'énergie discrète, aux erreurs machine près (10^{-15}). Ceci s'explique par le fait que la méthode du point milieu est une méthode du type Runge-Kutta d'ordre 2, et que le Hamiltonien est un invariant quadratique de l'oscillateur harmonique. On retrouve alors une illustration du théorème (1.4.1), qui corrobore la Remarque 3. Ainsi, bien que ces méthodes soient d'ordre faible, leur symplecticité assure une conservation du Hamiltonien discret tout à fait satisfaisante.

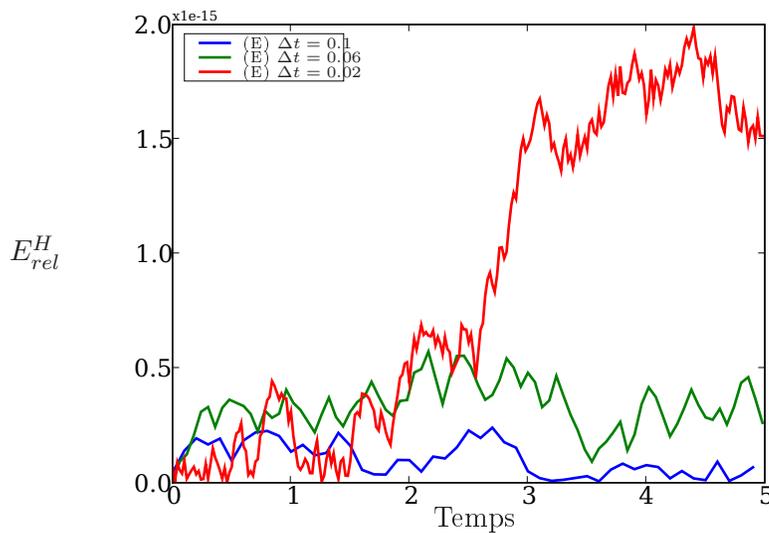
1.4.3.2 Le problème de Kepler

On s'intéresse aux performances numériques de schémas de type Runge-Kutta symplectique d'ordre 4 (RKS4) décrits dans le paragraphe (1.4.2.3). L'exemple traité est celui du système d'Hamiltonien (1.13) décrivant le problème de Kepler. On reproduit les conditions identiques à celles décrites dans la sous section (1.3.2.2).

Conservation des invariants. On illustre la conservation des invariants comme le Hamiltonien et le moment angulaire par une méthode RKS4. On regarde l'évolution de l'erreur relative de ces invariants en fonction du temps. Sur la Fig. (1.7) (a), on constate que le taux de variation de l'erreur relative du Hamiltonien discret $H^n = ((p_1^n)^2 + (p_2^n)^2)/2 - ((q_1^n)^2 + (q_2^n)^2)^{-1/2}$ est quasiment le même pour les différents pas de temps. Ce taux reste constant (en échelle log-log) sur de grands temps d'intégration. Ce résultat illustre le théorème (1.4.3) de conservation du Hamiltonien



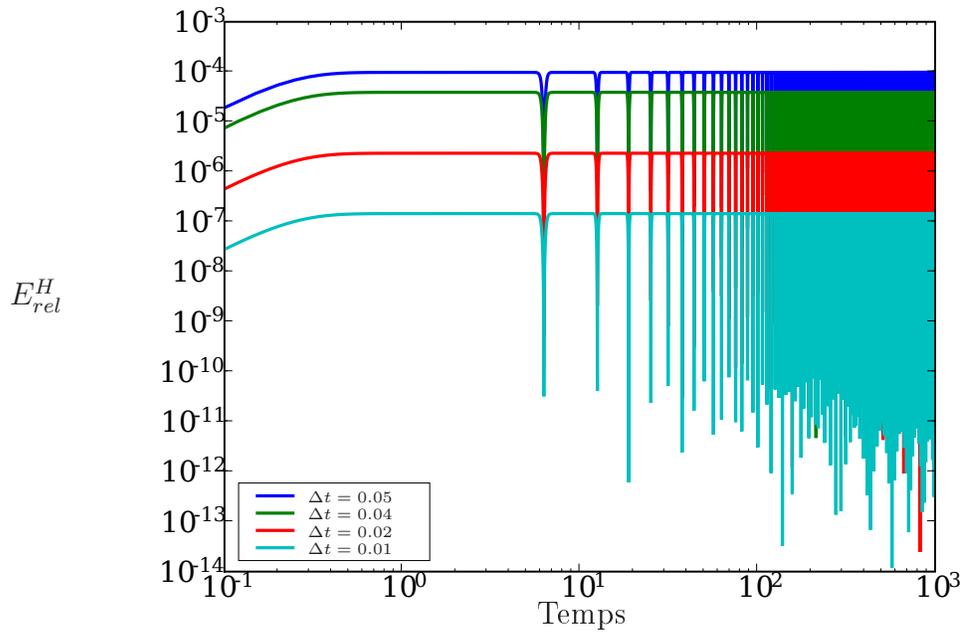
(a) Euler symplectique



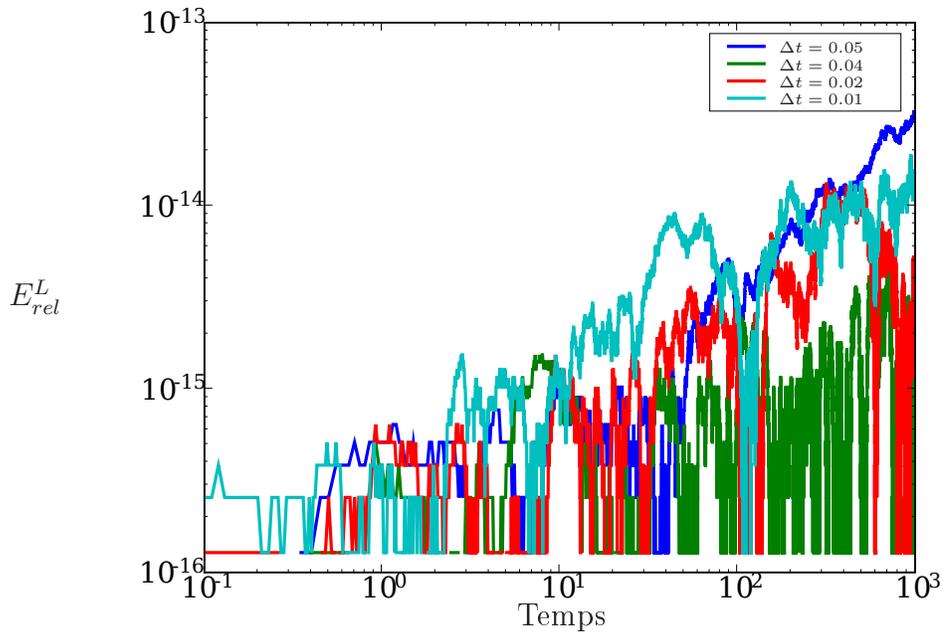
(b) Méthode du point milieu

FIG. 1.6 – Oscillateur harmonique 1D. Conservation de l'énergie par des méthodes symplectiques d'ordre faible.

pour les schémas symplectiques : la variation de l'erreur relative reste bornée sur des temps exponentiellement longs. Sur la Fig. (1.7) (b), on voit que le moment angulaire discret $L^n = q_1^n p_2^n - q_2^n p_1^n$ reste constant au cours du temps. Il est, aux erreurs machine près, exactement préservé. En effet, le moment angulaire est un invariant quadratique du problème hamiltonien de Kepler. Le théorème (1.4.1) garantit sa conservation par les méthodes symplectiques de type Runge-Kutta.



(a) Erreur relative du Hamiltonien discret



(b) Erreur relative du moment angulaire discret

FIG. 1.7 – Problème de Kepler. *Erreur relative de deux invariants* : (a) : le Hamiltonien discret H^n , (b) : le moment angulaire discret L^n . Le pas de temps varie $\Delta t = 1.10^{-2}$, 2.10^{-2} , 4.10^{-2} et 5.10^{-2} . Le temps d'intégration vaut $T = 10^3$. Echelle log-log.

1.5 Application à l'hydrodynamique bidimensionnelle

La turbulence bidimensionnelle se trouve ordinairement en Mécanique des fluides, en météorologie (les cyclones de l'atmosphère, dont l'écoulement s'organise en couches planaires stratifiées) ainsi qu'en astrophysique (où la formation des amas de galaxie est quasi-bidimensionnelle). Une des propriétés spécifique à la "turbulence" bidimensionnelle est l'émergence de structures cohérentes, appelées vortex, au sein d'un environnement désordonné. Ces structures sont stables sur des temps longs (parmi les exemples célèbres de tels systèmes la tâche rouge de Jupiter, observée depuis plus de 400 ans), et sont essentielles dans la convection de chaleur et de matière des systèmes turbulents. Kirchhoff (1876) [81] a construit un modèle de turbulence bidimensionnelle à partir des équations d'Euler pour un fluide parfait incompressible. On note par $\mathbf{u} = (u, v)$ le champ de vitesse dépendant des variables indépendantes spatiales (x, y) et du temps t . La pression est notée p . Les équations d'Euler pour un fluide parfait incompressible s'écrivent :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0,$$

Le champ de vorticité, défini par $\omega = \text{rot } \mathbf{u}$, vérifie alors :

$$\frac{d\omega}{dt} = 0, \quad \frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla,$$

Cette équation exprime le fait que la vorticité du système est convectée au cours du temps le long des trajectoires. Comme $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, il existe dans un domaine simplement connexe une fonction ψ , dite fonction de courant, telle que :

$$\mathbf{u}(x, y) = \left(\frac{\partial \psi}{\partial y}, -\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)$$

La vorticité s'écrit alors :

$$\omega = \Delta \psi$$

Il s'agit d'une équation de Poisson avec ω comme terme source. La solution formelle s'écrit donc en fonction du champ de vorticité, et d'un noyau de Green :

$$\psi(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \omega(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad \mathbf{r} = (x, y),$$

En dimension deux, la fonction de Green s'écrit $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{-1}{4\pi} \log \|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\|^2$.

Ainsi les équations d'Euler pour un fluide parfait incompressible s'écrivent sous forme Hamiltonienne grâce à la fonction de courant, jouant le rôle de Hamiltonien, et du champ de vorticité :

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad \frac{dy}{dt} = -\frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad \psi(\mathbf{r}) = \frac{-1}{4\pi} \int \log \|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\|^2 \omega(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (1.25)$$

Remarque 4 La formulation hamiltonienne n'est ici en fait qu'apparente : les variables de position x et y ne sont pas duales l'une de l'autre : elles appartiennent au même espace des configurations. Alors que dans le formalisme hamiltonien, la variable p est le moment conjugué de q ; le couple (p,q) est un point de T^*Q , où Q est l'espace des configurations dans lequel se trouve la variable de position q .

1.5.1 Le modèle des vortex ponctuels

Dans le modèle des vortex ponctuels, le champ de vorticit  est concentr  en des points singuliers. Dans le plan, pour N vortex, le champ de vorticit  au point $\mathbf{r} = (x, y)$ a pour valeur :

$$\omega(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \gamma_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (1.26)$$

o  γ_i repr ente la circulation du i - me vortex situ  en \mathbf{r}_i . Ainsi le syst me bidimensionnel des N vortex ponctuels s' crit sous forme hamiltonienne par :

$$\gamma_i \frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial y_i}, \quad \gamma_i \frac{dy_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}, \quad (1.27)$$

o  H est la discr tisation du Hamiltonien :

$$H = -\frac{1}{4\pi} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \gamma_i \gamma_j \ln |r_{ij}| \quad (1.28)$$

avec $r_{ij}^2 = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2$. Ce qui s' crit explicitement :

$$\gamma_i \frac{dx_i}{dt} = -\frac{1}{2\pi} \sum_j^N \gamma_j \frac{y_i - y_j}{r_{ij}^2}, \quad \gamma_i \frac{dy_i}{dt} = \frac{1}{2\pi} \sum_j^N \gamma_j \frac{x_i - x_j}{r_{ij}^2}, \quad (1.29)$$

Les $2N$ variables (x_i, y_i) sont canoniquement conjugu es ; il s'en suit que l'espace des phases est confondu avec l'espace des configurations. Les int grales premi res du syst me sont, en plus de l'Hamiltonien H , le moment cin tique L , les quantit s de mouvement P_x et P_y dans le plan, par rapport   x et   y :

$$L = \sum_i^N \gamma_i (x_i^2 + y_i^2), \quad P_x = \sum_i^N \gamma_i x_i, \quad P_y = \sum_i^N \gamma_i y_i,$$

En plus de ces int grales premi res, l'entrophie Z est une constante du syst me :

$$Z = \sum_i^N \left(\sum_{j \neq i}^N \gamma_j r_{ij} \right)^2$$

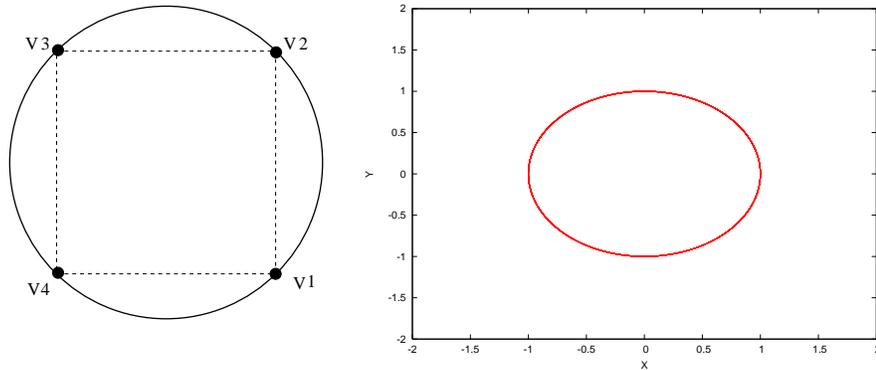
1.5.2 Dynamique qualitative d'un système de 4 vortex ponctuels

1.5.2.1 Problématique

On s'intéresse à la nature du mouvement d'un vortex, appelé traceur, parmi un système de 4 vortex ponctuels de même intensité $\gamma_i = \gamma$ pour $i = 1, 2, 3, 4$. Selon les conditions initiales, le mouvement peut être soit périodique, quasi-périodique, soit tendre vers un système chaotique [2]. En considérant une configuration initiale de référence, à savoir une disposition en carré, le traceur se meut selon un mouvement périodique stable. Cette configuration donne au système une symétrie discrète reliant par paires la position des vortex :

$$x_i = -x_{i+2}, \quad y_i = -y_{i+2}, \quad i = 1, 2,$$

Cette symétrie est conservée au cours du temps. L'invariance par rotation du système dans l'espace des phases, confondue avec l'espace des configurations, indique que le mouvement des trois autres vortex est identique.



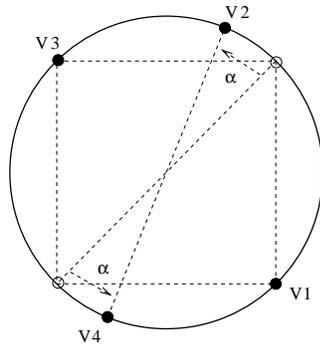
(a) Configuration carré des vortex V_i , $i = 1, 2, 3, 4$ (b) Mouvement périodique stable

FIG. 1.8 – Modèle de vortex ponctuels bidimensionnel. En (a) : configuration initiale de référence. En (b) : la trajectoire d'un vortex associé à une configuration initiale carré.

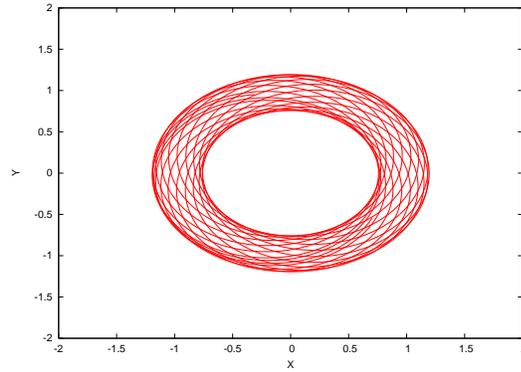
Lorsque cette configuration initiale est légèrement perturbée par une variation angulaire, le moment cinétique du système $L = \gamma \sum_{i=1}^4 (x_i^2 + y_i^2)$ ne varie pas. Alors deux cas de figure se présentent :

- la perturbation angulaire conserve la symétrie discrète. Le mouvement typique est de nature quasi-périodique. Les trajectoires sont restreintes dans un domaine annulaire.

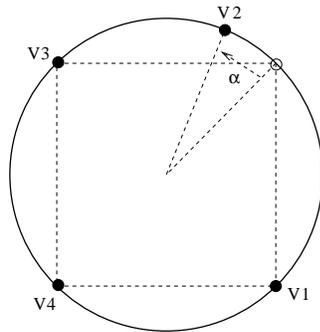
– la perturbation brise cette symétrie discrète. Le mouvement est chaotique.



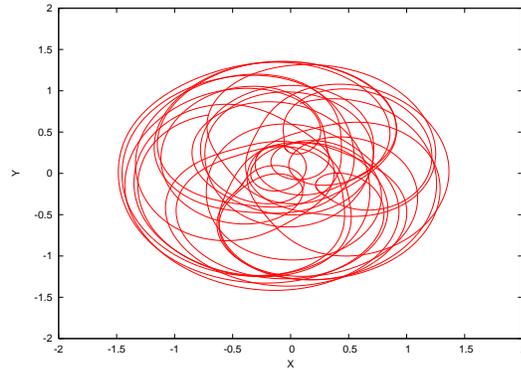
(a) Configuration initiale présevant la symétrie discrète



(b) Mouvement quasi-périodique



(c) Configuration initiale brisant la symétrie discrète



(d) Mouvement chaotique

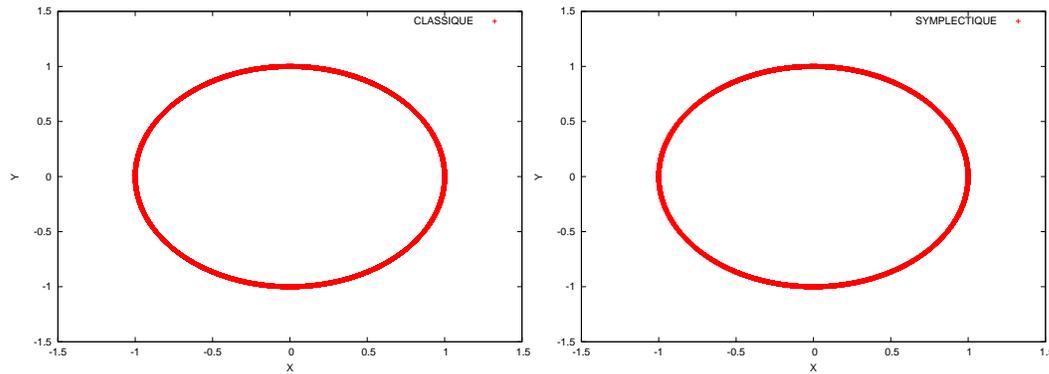
FIG. 1.9 – Modèle de vortex ponctuels bidimensionnel. En (a) : la perturbation d'angle α est symétrique ; en (b), le mouvement pseudo-périodique typique d'un vortex associé à la configuration de référence perturbée symétriquement. En (c) : la perturbation d'angle α est asymétrique ; en (d), le mouvement chaotique typique d'un vortex associé à la configuration de référence perturbée asymétriquement.

Le caractère intégrable du système est lié à cette brisure de symétrie discrète. S. Boatto *et al.* ont étudié le mouvement d'un traceur dans des cas où le système possède une faible brisure de symétrie. Ils ont notamment montré l'existence de frontières pour la trajectoire d'un vortex, selon la nature du mouvement [85] [23] [11]. La méthode numérique pour confirmer leurs résultats est de type Runge-Kutta d'ordre 8 à pas adaptatif. Pour notre part, on illustre les conséquences de la non conservation des invariants d'un tel système lors d'une simulation numérique sur des

temps longs : il apparaît un résultat en désaccord avec l'analyse qualitative. Ce qui justifie donc le choix des auteurs cités à utiliser un intégrateur d'ordre élevé à pas adaptatifs.

1.5.2.2 Étude numérique

On compare un intégrateur Runge-Kutta d'ordre 4 classique et symplectique. On voit que lorsque les conditions initiales donnent lieu à un mouvement périodique pour un des vortex, les deux intégrateurs traduisent la bonne physique, même sur des temps longs ($5 \cdot 10^5$ itérations, avec un pas $\Delta t = 5 \cdot 10^{-3}$).



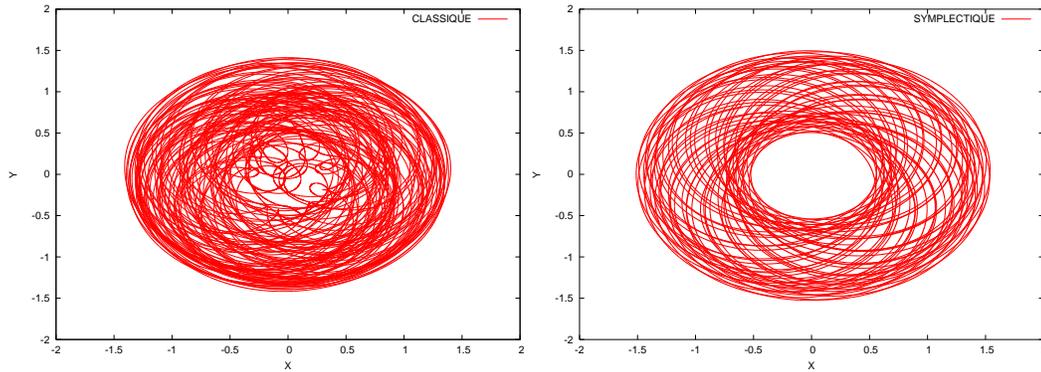
(a) RK4 classique

(b) RK4 symplectique (RKS4)

FIG. 1.10 – Modèle de vortex ponctuels bidimensionnel. Solution numérique de la trajectoire d'un vortex pour (a) : RK4, et (b) : RKS4. La configuration initiale est la configuration de référence carré associée à un mouvement périodique. $5 \cdot 10^5$ itérations. $\Delta t = 5 \cdot 10^{-3}$.

Lorsque les conditions initiales correspondent à un mouvement quasi-périodique -une perturbation angulaire de $\alpha = \pi/5$ respectant la symétrie discrète, les accumulations d'erreurs numériques sur le Hamiltonien produisent une dynamique chaotique du vortex sur un même temps d'intégration. Alors que le schéma symplectique de même ordre traduit la bonne physique : le vortex reste sur un domaine annulaire.

Comme on s'y attend, l'emploi d'un RK4 classique produit une dissipation numérique faussant qualitativement la physique du système. La comparaison entre différentes méthodes pour ce système à 4 vortex-ponctuels a déjà été produite [11] mais dans la configuration associée à un mouvement chaotique des vortex ; le pas de temps étant aussi quatre fois inférieur ($\Delta t = 1,25 \cdot 10^{-3}$) à celui utilisé ici ($\Delta t = 5 \cdot 10^{-3}$). Toutefois leur analyse corrobore : l'intégrateur classique RK4 produit un accroissement du Hamiltonien, et l'intégrateur de type Runge-Kutta d'ordre 4 symplectique



(a) RK4 classique

(b) RK4 symplectique (RKS4)

FIG. 1.11 – Modèle de vortex ponctuels bidimensionnel. *Solution numérique de la trajectoire d'un vortex pour (a) : RK4, et (b) : RKS4. La configuration initiale correspond à une perturbation symétrique ($\alpha = \frac{\pi}{5}$) associée à un mouvement quasi-périodique. $5 \cdot 10^5$ itérations. $\Delta t = 5 \cdot 10^{-3}$.*

est comparable à celui d'un Runge-Kutta d'ordre 8 à pas adaptatifs. Une différence notable entre un RK4 et RKS4 a aussi été soulignée [123] dans un contexte équivalent ; la constatation est similaire : les qualités numériques du RKS4 sont dues à son caractère symplectique.

1.5.3 Dynamique quantitative des systèmes de vortex

1.5.3.1 Problématique

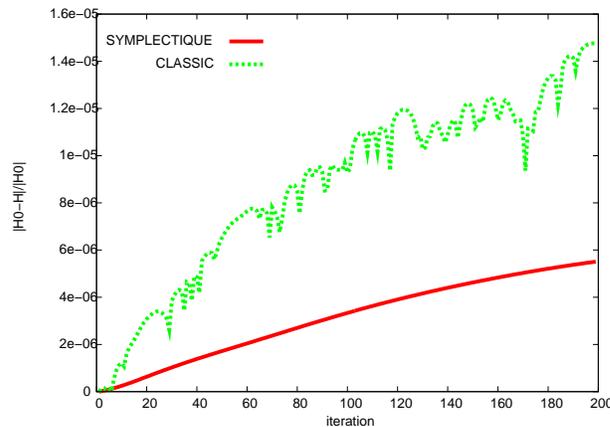
Le modèle décrit dans la section 1.5.1 devrait pouvoir renseigner sur la formation et l'évolution d'un système de $N \gg 1$ vortex ne pouvant se confondre. Notamment dans quelle mesure différentes conditions initiales conduisent à un même état stable ? Les travaux de E. Bécu et V. Pavlov [9] [10] ont montré que des conditions initiales différentes, mais avec les mêmes invariants globaux, produisent des états finaux différents. Pour appuyer ces résultats, des simulations numériques ont été réalisées avec un intégrateur de type Runge-Kutta classique d'ordre 4. Cependant, comme il a été montré précédemment, les intégrateurs non symplectiques, même d'ordre respectable, produisent des erreurs numériques sur des temps longs. Dans le cas présent, où il s'agit d'observer l'état final des amas de vortex, il est indispensable d'éviter ces accumulations d'erreurs numériques : la non conservation de l'Hamiltonien conduirait à augmenter numériquement le processus d'agglomération/d'éloignement des vortex, et donc aboutirait à un état final ne correspondant pas à la physique

observable, Pour palier à ces effets numériques, E. Bécu *et al.* [10] contrôlent, par une méthode d'auto-régulation, la conservation de l'énergie à chaque instant [34]. Les positions des vortex sont ensuite modifiées en conséquence, de sorte à respecter cette loi de conservation du système.

Dans un premier temps, on confirme que l'utilisation d'un intégrateur symplectique permet de conserver de façon satisfaisante *tous* les invariants du système, et donc qu'il n'est plus alors nécessaire de réajuster artificiellement la disposition des vortex à chaque instant. Puis, on compare les résultats avec ceux obtenus par un intégrateur classique du même ordre.

1.5.3.2 Étude numérique

On compare alors la conservation des invariants⁴ H, Z, L, P_x et P_y entre deux schémas de type Runge-Kutta d'ordre 4 classique (RK4) et symplectique (RKS4). Sur la Fig. 1.12, on observe un accroissement plus important de l'Hamiltonien pour



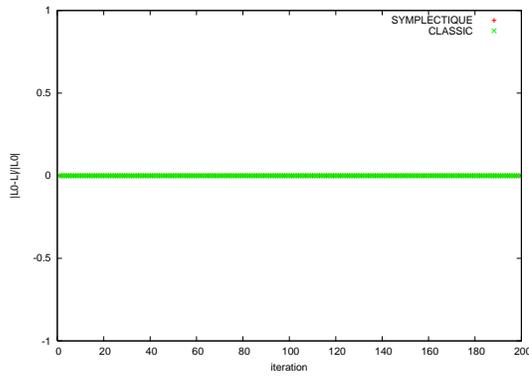
(a) Conservation du Hamiltonien

FIG. 1.12 – Modèle d'hydrodynamique bidimensionnel. Conservation du Hamiltonien pour les intégrateurs RK4 classique et RKS4 symplectique. Configuration de $N = 250$ tourbillons ponctuels pour 200 itérations. $\Delta t = 5 \cdot 10^{-2}$.

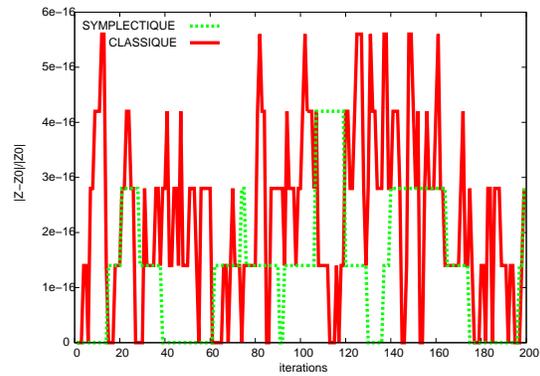
l'intégrateur classique RK4. Le Hamiltonien correspond dans le cas présent à l'énergie cinétique du système. La non conservation au cours du temps de cette énergie produit une dissipation numérique. Celle-ci traduit un processus non physique d'intensification (ou de relâchement) de la dynamique des vortex. L'intégrateur RK4

⁴les variations de l'invariant I sont données par $\frac{|I_0-I|}{|I_0|}$, où I_0 correspond à la valeur initiale de l'invariant

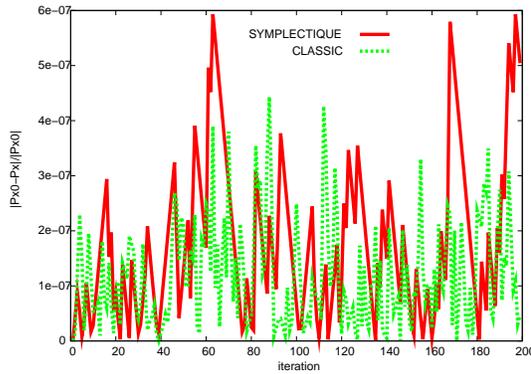
étant explicite, il tend à faire croître l'énergie cinétique totale du système. Il s'en suit une suragglomération des vortex. La symplecticité de la méthode RKS4 n'ap-



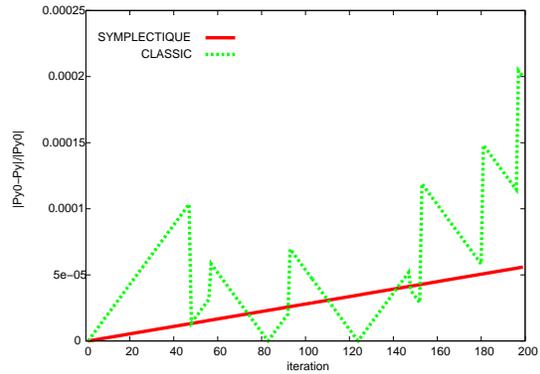
(a) Variation du moment cinétique L



(b) Variation de l'entropie Z



(c) Variation de l'impulsion P_x



(d) Variation de l'impulsion P_y

FIG. 1.13 – Modèle d'hydrodynamique bidimensionnel. Conservation des intégrales premières L, P_x, p_y et Z pour les intégrateurs RK4 et RKS4. Configuration de $N = 250$ tourbillons ponctuels pour 200 itérations. $\Delta t = 5 \cdot 10^{-2}$.

porte pas de gain en ce qui concerne la préservation des invariants Z, L, P_x et P_y . Les schémas de type Runge-Kutta d'ordre 4 suffisent à conserver ces grandeurs de façon satisfaisante.

L'accroissement du Hamiltonien confirme l'insuffisance des méthodes classiques à rendre compte de la dynamique d'un système de vortex ponctuels. Les méthodes basées sur une technique de régulation pour conserver l'énergie cinétique totale du système sont alors justifiées lors d'utilisation d'intégrateurs non symplectique pour des

systèmes hamiltoniens. Cependant, le remplacement des vortex pour conserver l'énergie totale peut ne pas être unique. Sur un certain temps d'intégration, il est donc possible d'obtenir une configuration des vortex dans l'espace des phases énergétiquement cohérente mais ne correspondant pas à la physique représentée par le modèle. L'utilisation d'un intégrateur symplectique garantit la conservation des propriétés géométriques du système. Cela permet en particulier de conserver le Hamiltonien de façon naturelle. La physique décrite par les équations est transportée au cours du temps de façon structurelle. Il s'en suit une configuration finale des vortex fidèle au modèle théorique des vortex ponctuels.

1.6 Commentaires

Dans ce premier chapitre, on a présenté la famille d'intégrateurs géométriques la plus connue : les intégrateurs symplectiques. On a montré que la conservation de la structure géométrique des systèmes hamiltoniens confère à la méthode d'intégration des propriétés numériques remarquables, surpassant celles des intégrateurs classiques. La très bonne conservation de l'énergie (Théorème 1.4.3) et celle d'autres invariants sur de longs temps d'intégration ont été illustrées sur des cas académiques (Fig. 1.6 et 1.7). Une application à un modèle d'hydrodynamique bidimensionnel a été finalement exposée. On a montré que la dynamique qualitative d'un système de vortex est bien reproduit sur des temps long grâce à un intégrateur symplectique. La seconde application est parallèle aux travaux de E. Bécu *et al.* [9] qui modélisent l'évolution d'un système de plusieurs centaines de vortex avec un intégrateur non symplectique. Par contre, à chaque itération un réajustement des positions des vortex est effectué afin de conserver l'énergie globale du système. En effet, on peut argumenter que sur des temps courts, la symplecticité d'une méthode n'induit *a priori* pas de performances numériques surpassant celles les autres méthodes, en particulier celles des méthodes construites pour conserver l'énergie exactement. Toutefois, la conservation de la symplecticité est une propriété propre aux systèmes hamiltoniens, alors qu'il existe des systèmes non hamiltoniens dont l'énergie est un invariant. De plus, Sanz-Serna [140] fait remarquer que la dynamique d'un système hamiltonien est décrite dans un espace des phases Ω de dimension $2n$. Alors l'ensemble des points représentant une dynamique telle que le Hamiltonien $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ soit constant est un sous espace de dimension $2n - 1$: sans autres restrictions, les points décrivant la dynamique y sont libres de mouvement. Lorsque le système possède un grand nombre de libertés, $n \gg 1$, le sous-espace $\{(p,q) \in \Omega \mid H(p,q) = \text{Cste}\}$ devient lui aussi grand. La contrainte de l'énergie constante devient faible. Alors que la conservation de la forme symplectique est une contrainte qui s'applique dans toutes les directions de l'espace des phases, puisqu'elle est équivalente, comme on

l'a vue, à la conservation des volumes $dp_i \wedge dq_i$, $i = 1, \dots, n$ correspondant à la projection de la forme symplectique sur chacun des plans vectoriels bidimensionnels $\mathcal{P}_i = \{(p, q) \in \Omega \mid (p_i, q_i) = (0, 0)\}^\perp$. Ainsi, la symplecticité conditionne de la même manière la dynamique d'un système hamiltonien, quelque soit la dimension de l'espace des phases.

Chapitre 2

Intégrateurs variationnels

2.1 Introduction

Les systèmes lagrangiens représentent une classe importante de systèmes mécaniques. Ils englobent notamment les systèmes hamiltoniens, permettent de décrire les systèmes conservatifs. Notamment en mécanique des fluides où il existe une formulation lagrangienne pour les équations d'Euler. Les systèmes lagrangiens bénéficient d'une interprétation physique naturelle (Principe de moindre action, lois de conservation, invariance de jauge...). Les propriétés physiques des systèmes lagrangiens sont ainsi décrites grâce à leur structure variationnelle. D'un point de vue numérique, on aimerait que les méthodes d'intégration conservent la structure variationnelle. Cela semble nécessaire pour traduire correctement les caractéristiques lagrangiennes. Les méthodes d'intégration construites à cette fin sont dites variationnelles. Elles généralisent les intégrateurs symplectiques pour une famille plus importante d'équations.

Les intégrateurs variationnels sont apparus la première fois dans le domaine du contrôle optimal au milieu des années 60 [75] [19]. Peu de temps après, Logan proposa la construction d'intégrateurs obtenus à partir du calcul des variations de l'action lagrangienne discrète [98]. Maeda poursuivit en étudiant les lois de conservation associées aux systèmes discrets [99] [100] [101]. Lee proposa d'introduire le temps comme variable discrète dynamique [86] [87]. Ensuite Veselov a étendu la théorie aux systèmes intégrables [150]. Enfin Wendlandt et Marsden ont développé l'approche variationnelle des systèmes mécaniques discrets [156] [157]. D'importants développements des intégrateurs variationnels sont apparus à l'issue des travaux de Marsden *et al.* : Kane, Marsden et Ortiz ont construit un intégrateur symplectique préservant l'énergie [76] ; l'adaptation aux systèmes dissipatifs a été proposée pour la première fois par Kane, Marsden, Ortiz et West [77] ; une extension aux EDP a été donnée

par Marsden, Pekarsky et Shkoller [102].

Dans un premier temps, on rappelle le principe de moindre action permettant d'obtenir les équations d'Euler-Lagrange. Puis on propose un calcul de variation sur l'action lagrangienne conduisant à la fois aux équations d'Euler-Lagrange et à une loi d'évolution de l'énergie. Ce calcul conduit aussi au théorème de Noëther liant les symétries variationnelles et les grandeurs conservées. Les intégrateurs variationnels sont construits en suivant une version discrète de ce calcul de variation. On obtient ainsi un système d'équations composé des équations d'Euler-Lagrange discrètes et de la loi discrète d'évolution de l'énergie. On remarque de plus que le flot numérique variationnel est symplectique. On illustre la démarche sur l'exemple de l'oscillateur harmonique. Puis on étend la théorie aux cas des EDP lagrangiennes : on présente le calcul de variation pour le cas particulier d'un Lagrangien possédant une variable dépendante et deux variables indépendantes. On construit ensuite l'intégrateur variationnel associé. Cependant, les équations d'évolution issues de la mécanique des fluides ne peuvent être dérivées d'un Lagrangien. On propose alors d'établir un bilagrangien construit à partir d'une équation adjointe à l'équation d'évolution. Un calcul de variation sur l'action du bilagrangien permet alors d'obtenir des équations d'Euler-Lagrange comprenant l'équation d'évolution. Ainsi, il est possible de transposer formellement la construction des intégrateurs variationnels aux équations d'évolution. La méthode de construction des intégrateurs variationnels pour les systèmes différentiels et les équations aux dérivées partielles décrite dans le présent chapitre s'inspire des travaux de Marsden *et al.* [102] [105] [106] et Chen [25] [26].

Notation du chapitre. Les notations utilisées pour les équations différentielles sont les suivantes :

- La variable indépendante correspondant au temps est notée $t \in \mathbb{R}$,
- On note l'espace des configurations de dimension s par Q , et son espace tangent TQ . Les points de Q sont les fonctions $q : t \mapsto q(t) = (q_1(t), \dots, q_s(t))$.
- On note les vecteurs tangents par $\dot{q} = \dot{q}(t) = (\dot{q}_1(t), \dots, \dot{q}_s(t)) \in T_q Q$, où pour tout $k = 1, \dots, s$, $\dot{q}_k(t) = \frac{dq_k}{dt}(t)$. Ainsi, les éléments de l'espace tangent sont $(q, \dot{q}) \in TQ$.
- On note l'espace tangent étendu par $\mathcal{Q} = \mathbb{R} \times TQ$.

Pour les équations aux dérivées partielles, on utilise la notation suivante :

- On note par X l'espace des variables indépendantes $x = (t, x^1, \dots, x^m)$ de dimension $m + 1$; on continue à noter par $t = x^0$ la variable de temps et par x^μ , $\mu = 1, \dots, m$ les variables d'espace.
- U représente l'espace de dimension N des variables dépendantes $u = (u^1, \dots, u^N)$.
- L'espace des configurations étendu est symbolisé par $\Omega = X \times U$. On note $\Omega^{(1)}$

le prolongement d'ordre 1 de Ω défini¹ par :

$$\Omega^{(1)} = X \times U \times U^{(1)} \quad (2.1)$$

où $U^{(1)}$ est l'espace dont les éléments sont les dérivées d'ordre 1 des u^i , $i = 1, \dots, N$ par rapport aux x^μ , $\mu = 0, 1, \dots, m$. Les éléments de $\Omega^{(1)}$ sont donc les triplets (x, u, u_x) où $u_x = \left(\frac{\partial u^1}{\partial x^0}, \dots, \frac{\partial u^1}{\partial x^m}, \dots, \frac{\partial u^N}{\partial x^0}, \dots, \frac{\partial u^N}{\partial x^m} \right) \in U^{(1)}$.

2.2 Systèmes lagrangiens

On rappelle le principe de moindre action conduisant aux équations de la dynamique des systèmes lagrangiens. Puis on montre un calcul de variation partant d'une transformation de l'action lagrangienne, et permettant d'obtenir un système d'équations variationnelles dont font partie les équations d'Euler-Lagrange. Ce calcul présente l'avantage d'établir les lois de conservation associées aux symétries variationnelles, c'est-à-dire aux transformations continues laissant l'action lagrangienne inchangée.

2.2.1 Les équations d'Euler-Lagrange

On définit la densité lagrangienne l associée au Lagrangien $L : \mathcal{Q} \rightarrow \mathbb{R}$ par :

$$\begin{aligned} l : \quad \mathcal{Q} &\longrightarrow \Lambda(\mathbb{R}) \\ (t, q, \dot{q}) &\longmapsto L(t, q, \dot{q})dt \end{aligned}$$

où $\Lambda(\mathbb{R})$ est l'espace des 1-formes différentielles sur \mathbb{R} . L'action lagrangienne associée est alors l'application :

$$\begin{aligned} \mathcal{L} : \quad \mathcal{C}_{[t_0, t_1]}(Q) &\longrightarrow \mathbb{R} \\ q &\longmapsto \int_{t_0}^{t_1} L(t, q, \dot{q})dt \end{aligned}$$

où $\mathcal{C}_{[t_0, t_1]}(Q)$ représente l'ensemble des trajectoires possibles $q(t)$ ² dans Q entre le point $q_0 = q(t_0)$ et le point $q_1 = q(t_1)$.

¹ $\Omega^{(1)}$ correspond à l'espace des jets d'ordre 1

²où $q : t \mapsto q(t)$ est supposée suffisamment régulière

Principe de moindre action. Le principe de Hamilton, ou principe de moindre action, énonce que l'évolution d'une particule lagrangienne $q(t)$ sur l'intervalle de temps $[t_0, t_1]$ est telle que l'action lagrangienne \mathcal{L} est extrémale : le Lagrangien L représente l'énergie cinétique et l'énergie potentielle du système $L = E_{cin} - E_{pot}$. La condition d'extrémalité revient à un calcul de variation $\delta\mathcal{L}$ correspondant à déterminer la trajectoire *optimale*.

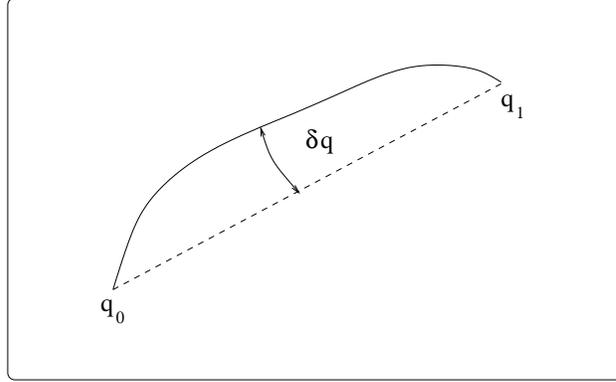


FIG. 2.1 – Illustration du principe de moindre action. *La trajectoire physique est celle qui est extrémale pour l'action lagrangienne.*

$$\begin{aligned}
 0 &= \delta\mathcal{L} \\
 &= \delta \int_{t_0}^{t_1} L(t, q(t), \dot{q}(t)) dt \\
 &= \int_{t_0}^{t_1} \frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} dt \\
 &= \int_{t_0}^{t_1} \frac{\partial L}{\partial q} \delta q dt + \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right) - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right) dt \\
 0 &= \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q dt + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_0}^{t_1} \tag{2.2}
 \end{aligned}$$

En considérant le terme de bord nul, signifiant une variation nulle des extrémités de la trajectoire, on obtient les équations d'Euler-Lagrange :

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0 \tag{2.3}$$

C'est ainsi que les équations d'Euler-Lagrange sont traditionnellement obtenues.

2.2.2 Équations variationnelles.

Cependant, il est possible d'obtenir les équations d'Euler-Lagrange à partir d'un calcul basé sur l'invariance de l'action lagrangienne sous l'action d'une transfor-

mation. L'avantage de procéder de cette manière est qu'une loi d'évolution locale de l'énergie est naturellement obtenue en même temps que les équations d'Euler-Lagrange. De plus, une forme symplectique lagrangienne est conservée par le flot lagrangien. Plus généralement, cette approche permet de relier l'invariance de \mathcal{L} par une transformation à la conservation de certaines grandeurs le long des solutions des équations d'Euler-Lagrange.

On considère une transformation :

$$t \mapsto t + \delta t, \quad q \mapsto q + \delta q, \quad \dot{q} \mapsto \dot{q} + \delta \dot{q},$$

où δt et δq représentent les variations infinitésimales associées à la transformation, et dépendant de t et de q . Pour savoir à quoi correspond $\delta \dot{q}$, on écrit :

$$dq = \dot{q} dt$$

Il s'en suit :

$$\delta(dq) = \delta \dot{q} dt + \dot{q} \delta(dt)$$

et comme les opérateurs d et δ commutent :

$$d \delta q = \delta \dot{q} dt + \dot{q} d \delta t$$

d'où

$$\delta \dot{q} = \frac{d}{dt} \delta q - \dot{q} \frac{d}{dt} \delta t \quad (2.4)$$

On calcule ainsi la variation par rapport à cette transformation de l'action lagrangienne définie par l'intégrale sur un intervalle de temps $[a, b]$ du Lagrangien L :

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{L} &= \delta \int_a^b L(t, q(t), \dot{q}(t)) dt \\ &= \int_a^b [\delta L(t, q(t), \dot{q}(t)) dt + L(t, q(t), \dot{q}(t)) \delta dt] \end{aligned}$$

avec d'une part :

$$\int_a^b L(t, q(t), \dot{q}(t)) \delta dt = \int_a^b \frac{d}{dt} (L \delta t) dt - \int_a^b \left(\frac{dL}{dt} \delta t \right) dt$$

car :

$$L \delta dt = d(L \delta t) - dL \delta t$$

et d'autre part :

$$\begin{aligned} \delta L(t, q(t), \dot{q}(t)) &= \frac{\partial L}{\partial t} \delta t + \frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \\ &= \frac{\partial L}{\partial t} \delta t + \frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \left(\frac{d}{dt} \delta q - \dot{q} \frac{d}{dt} \delta t \right) \\ &= \left(\frac{\partial L}{\partial t} + \frac{d}{dt} \left(\dot{q} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right) \delta t + \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right) \delta q - \frac{d}{dt} \left[\dot{q} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta t \right] + \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right] \end{aligned}$$

Ainsi, on a :

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{L} = & \int_a^b \left[\left(\frac{\partial L}{\partial t} + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} - L \right) \right) \delta t + \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q \right] dt \\ & + \left[\left(L - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} \right) \delta t + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_a^b \end{aligned} \quad (2.5)$$

En supposant que les points aux extrémités sont invariants par la transformation :

$$\delta t(a, q(a)) = 0, \quad \delta t(b, q(b)) = 0, \quad \delta q(a, q(a)) = 0, \quad \delta q(b, q(b)) = 0, \quad (2.6)$$

la condition d'invariance de l'action lagrangienne $\delta\mathcal{L} = 0$ induit les équations d'Euler-Lagrange, issues de la variation de δq :

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0 \quad (2.7)$$

ainsi qu'une équation d'évolution obtenue par la variation de δt :

$$\frac{\partial L}{\partial t} + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} - L \right) = 0 \quad (2.8)$$

Par la suite, on la désignera, par abus de langage, comme l'équation d'évolution de l'énergie ; en effet, lorsque le Lagrangien est indépendant du temps, on retrouve la loi de conservation de l'énergie :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} - L \right) = 0$$

et en anticipant un peu, l'invariance de l'action lagrangienne par rapport au temps est reliée à la conservation de l'énergie.

Le système d'équations (2.7) et (2.8) est appelé système d'équations variationnelles. Le calcul de (2.8) indique que cette équation est redondante : toute solution de (2.7) vérifie automatiquement l'équation d'évolution de l'énergie. Cependant, on verra qu'il n'en est pas de même lorsque l'on passe sur le plan discret.

2.2.2.1 Lois de conservation

En relachant la condition (2.6), l'invariance de l'action lagrangienne le long des solutions se traduit par la conservation de la quantité définie par les termes de bord dans 2.5. Autrement dit, le long des solutions, les quantités associées aux symétries variationnelles sont conservées au cours du temps : il s'agit du théorème de Noether.

Théorème 2.2.1 (Théorème de Noether) *Soit L un lagrangien dépendant du temps t , de la variable q et de sa dérivée \dot{q} . Si une transformation :*

$$t \mapsto t + \delta t, \quad q \mapsto q + \delta q,$$

laisse invariante l'action lagrangienne associée à L , alors pour toutes solutions des équations d'Euler-Lagrange, on a la loi de conservation suivante :

$$\frac{d}{dt} \left(\left(L - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} \right) \delta t + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right) = 0 \quad (2.9)$$

Par exemple, si l'on considère une particule libre de masse m évoluant dans \mathbb{R}^3 . Son mouvement peut être décrit par le lagrangien :

$$L(q) = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 \quad (2.10)$$

L'action lagrangienne associée est invariante par translation temporelle :

$$t \mapsto t + \delta t, \quad q \mapsto q,$$

Il en résulte, d'après le théorème de Noether que la quantité conservée le long des trajectoires est :

$$\text{Cste} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} - L = \frac{1}{2} m \dot{q}^2$$

2.2.2.2 Symplecticité

Le terme de bord peut être vu comme une 1-forme $\theta_L \in \Lambda^1(\mathbb{R} \times Q)$, appelée forme de Liouville :

$$\begin{aligned} \theta_L : \quad T(\mathbb{R} \times Q) &\longrightarrow \mathbb{R} \\ ((t, q); (\delta t, \delta q)) &\longmapsto \left(L - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} \right) \delta t + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \end{aligned} \quad (2.11)$$

En prenant la dérivée extérieure de celle-ci, on obtient la forme symplectique lagrangienne :

$$\omega_L \equiv d\theta_L \quad (2.12)$$

Alors le flot lagrangien préserve cette forme symplectique le long des solutions des équations variationnelles [106].

Ainsi, le calcul des variations conduisant au théorème de Noether permet d'établir une loi d'évolution de l'énergie en même temps que les équations d'Euler-Lagrange. En particulier, lorsque le Lagrangien est indépendant du temps, il apparaît alors une loi de conservation de l'énergie. De plus, le long de ces solutions, une forme symplectique lagrangienne est conservée.

Le principe des intégrateurs variationnels est de reproduire au niveau discret ces mêmes propriétés. On s'attend alors à ce que les intégrateurs variationnels aient une propriété de symplecticité, et que dans le cas des systèmes autonomes, ils garantissent la conservation exacte de l'énergie discrète.

2.3 Intégrateurs variationnels pour les EDO

On présente la méthode de construction d'un intégrateur variationnel pour une équation différentielle ordinaire (EDO) [26] [106] [158]. Il est composé d'une version discrète des équations d'Euler-Lagrange et d'une version discrète de la loi d'évolution de l'énergie. On montre que le flot numérique d'un tel intégrateur est nécessairement symplectique [156] ; le lien avec les schémas symplectiques étant assuré par une transformation de Legendre discrète. On illustre enfin les performances des intégrateurs variationnels sur l'exemple de l'oscillateur harmonique.

2.3.1 Intégrateurs variationnels

On considère $I_d = \{t_k\}_{k=0,\dots,N}$ une partition de I , dont les intervalles de subdivision sont notés $\Delta t_k = t_{k+1} - t_k$, ou plus simplement Δt lorsqu'il n'y a pas d'ambiguïté possible. On associe à l'espace discret I_d , l'espace des configurations discret Q_d dont les éléments sont les points q_k , $k = 0, \dots, N$. Le produit de ces deux espaces donne l'espace discret des configurations étendu $\Omega_d = I_d \times Q_d$, dont les éléments sont notés $w_k = (t_k, q_k)$, $k = 0, \dots, N$. L'espace tangent discret à Q_d en q_k est noté $T_{q_k} Q_d$.

On écrit l'action lagrangienne comme une somme d'intégrale sur les subdivisions de I_d :

$$\mathcal{L}(q) = \sum_{k=0}^{N-1} \int_{t_k}^{t_{k+1}} L(t, q, \dot{q}) dt \quad (2.13)$$

Chaque intégrale est approximée par \mathcal{L}_d^k :

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} L(t, q, \dot{q}) dt = \mathcal{L}_d^k(t_{k_0}, \dots, t_{k_p}, q_{k_0}, \dots, q_{k_p}) + O(\Delta t^p)$$

par une méthode de quadrature d'ordre p définie sur l'intervalle $[t_k = t_{k_0}; t_{k+1} = t_{k_p}]$ (Fig. 2.2). Dans la suite, on se propose d'illustrer la méthode de construction d'un intégrateur variationnel avec un exemple simple mais suffisamment pédagogique pour lequel l'action lagrangienne est approximée à l'ordre 1 :

$$\mathcal{L}_d = \sum_{k=0}^{N-1} (t_{k+1} - t_k) L_d(w_k, w_{k+1})$$

où L_d est une discrétisation à l'ordre 1 en différences finies du Lagrangien L . En particulier, la dérivée première est approximée pour tout $0 \leq k \leq (N - 1)$ par :

$$\frac{dq}{dt} \simeq \frac{q_{k+1} - q_k}{t_{k+1} - t_k}$$

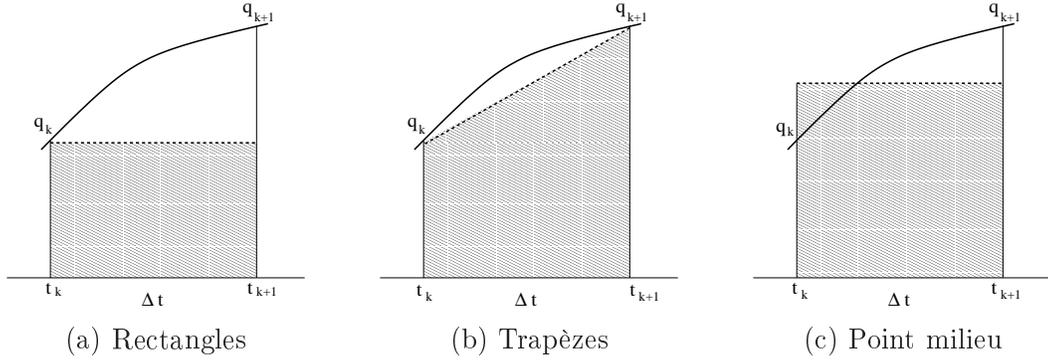


FIG. 2.2 – Différentes méthodes de quadrature.

De façon analogue au cas continu, on considère alors la transformation sur Ω_d :

$$t_k \mapsto t_k + \delta t_k, \quad q_k \mapsto q_k + \delta q_k,$$

où $\delta w_k = (\delta t_k, \delta q_k)$ est un élément de l'espace tangent à Ω_d en w_k . On calcule alors une petite variation. On note $z_k = (w_k, w_{k+1})$:

$$\begin{aligned}
 \delta \sum_{k=0}^{N-1} \mathcal{L}_d^k(z_k) &= \sum_{k=0}^{N-1} \delta(t_{k+1} - t_k) L_d(z_k) + (t_{k+1} - t_k) \delta L_d(z_k) \\
 &= \sum_{k=0}^{N-1} L_d(z_k) (\delta t_{k+1} - \delta t_k) + \sum_{k=0}^{N-1} \left(\frac{\partial L_d(z_k)}{\partial t_k} \delta t_k + \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial t_{k+1}} \delta t_{k+1} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial q_k} \delta q_k + \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial q_{k+1}} \delta q_{k+1} \right) (t_{k+1} - t_k) \\
 &= \sum_{k=0}^{N-1} \left((t_{k+1} - t_k) \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial t_k} - L_d(z_k) \right) \delta t_k + \sum_{k=0}^{N-1} \left((t_{k+1} - t_k) \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial t_{k+1}} + L_d(z_k) \right) \delta t_{k+1} \\
 &\quad + \sum_{k=0}^{N-1} \left((t_{k+1} - t_k) \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial q_k} \right) \delta q_k + \sum_{k=0}^{N-1} \left((t_{k+1} - t_k) \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial q_{k+1}} \right) \delta q_{k+1}
 \end{aligned}$$

en décalant les indices de sommation dans la deuxième et quatrième somme, on

obtient :

$$\begin{aligned}
\delta \sum_{k=0}^{N-1} \mathcal{L}_d^k(z_k) &= \sum_{k=0}^{N-1} \left((t_{k+1} - t_k) \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial t_k} - L_d(z_k) \right) \delta t_k \\
&+ \sum_{k=1}^N \left((t_k - t_{k-1}) \frac{\partial L_d(z_{k-1})}{\partial t_k} + L_d(z_{k-1}) \right) \delta t_k \\
&+ \sum_{k=0}^{N-1} \left((t_{k+1} - t_k) \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial q_k} \right) \delta q_k + \sum_{k=1}^N \left((t_k - t_{k-1}) \frac{\partial L_d(z_{k-1})}{\partial q_k} \right) \delta q_k \\
&= \sum_{k=1}^{N-1} \left((t_{k+1} - t_k) \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial t_k} + (t_k - t_{k-1}) \frac{\partial L_d(z_{k-1})}{\partial t_k} + L_d(z_{k-1}) - L_d(z_k) \right) \delta t_k \\
&+ \sum_{k=1}^{N-1} \left((t_{k+1} - t_k) \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial q_k} + (t_k - t_{k-1}) \frac{\partial L_d(z_{k-1})}{\partial q_k} \right) \delta q_k \\
&+ ((t_1 - t_0) \frac{\partial L_d(z_0)}{\partial t_0} - L_d(z_0)) \delta t_0 + ((t_N - t_{N-1}) \frac{\partial L_d(z_{N-1})}{\partial t_N} + L_d(z_{N-1})) \delta t_N \\
&+ ((t_1 - t_0) \frac{\partial L_d(z_0)}{\partial q_0}) \delta q_0 + ((t_N - t_{N-1}) \frac{\partial L_d(z_{N-1})}{\partial q_N}) \delta q_N
\end{aligned}$$

En supposant les variations aux bords nulles :

$$\delta t_0 = \delta t_N = 0, \quad \delta q_0 = \delta q_N = 0,$$

on obtient une relation de récurrence entre $((t_{k-1}, q_{k-1}); (t_k, q_k))$ et (t_{k+1}, q_{k+1}) pour tout $k = 1, \dots, N - 1$ définie par le système :

$$0 = (t_{k+1} - t_k) \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial q_k} + (t_k - t_{k-1}) \frac{\partial L_d(z_{k-1})}{\partial q_k} \quad (2.14)$$

$$0 = (t_{k+1} - t_k) \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial t_k} + (t_k - t_{k-1}) \frac{\partial L_d(z_{k-1})}{\partial t_k} + L_d(z_{k-1}) - L_d(z_k) \quad (2.15)$$

La méthode d'intégration variationnelle est composée de ces deux équations. La première équation (2.14) représente une discrétisation des équations d'Euler-Lagrange. L'ordre de cette discrétisation dépend de la méthode de quadrature pour approximer l'action lagrangienne \mathcal{L} , ainsi que l'ordre de troncature pour approcher les termes dérivés $\dot{q}(t)$. La seconde équation (2.15) correspond à une version discrète de l'équation d'évolution de l'énergie. Contrairement au cas continu, elle n'est *a priori* pas redondante avec l'équation (2.14). On s'aperçoit alors qu'il est nécessaire de considérer la variable de temps t_{k+1} comme une inconnue du système pour obtenir la position q_{k+1} solution du système d'équations. Autrement dit, afin de vérifier la loi discrète d'évolution de l'énergie, le pas de temps $\Delta t_k = t_{k+1} - t_k$ ne doit pas être constant.

2.3.2 Propriétés et lois de conservation

Comme dans le cas continu, le calcul précédent fait apparaître naturellement deux 1-formes différentielles discrètes, appelées formes de Liouville discrètes. Celles-ci engendrent la forme symplectique lagrangienne discrète ω_d^L qui est conservée par le flot numérique lagrangien Φ_d^L . On relie ensuite la forme symplectique lagrangienne à la forme symplectique canonique issue du formalisme hamiltonien grâce à une transformation de Legendre discrète. Ainsi, on aura montré que les solutions des équations variationnelles (2.14) et (2.15) vérifient par construction à la fois une loi discrète de conservation de l'énergie et qu'une forme symplectique discrète est préservée au cours du temps.

Définition 2.3.1 (Flot numérique lagrangien) *On note $w_k = (t_k, q_k)$, $k \geq 0$ un point de l'espace discret des configurations étendu $\Omega_d = I_d \times Q_d$, où I_d est une subdivision d'un intervalle $I \subset \mathbb{R}$, et Q_d est l'espace des configurations discret. Le flot numérique lagrangien associé au lagrangien L est l'application définie par :*

$$\begin{aligned} \Phi_d^L : \Omega_d \times \Omega_d &\longrightarrow \Omega_d \times \Omega_d \\ (w_k, w_{k+1}) &\longmapsto (w_{k+1}, w_{k+2}) \end{aligned} \quad (2.16)$$

telle que pour tout $k \geq 0$, (w_{k+1}, w_{k+2}) vérifient les équations variationnelles discrètes (2.14) et (2.15) dès que (w_k, w_{k+1}) sont aussi solutions des ces équations.

Par composition du flot, on peut associer à tout couple de conditions initiales (w_0, w_1) le couple de solutions numériques au temps $(N, N + 1)$:

$$\Phi_d^{L,N} = \underbrace{\Phi_d^L \circ \dots \circ \Phi_d^L}_{N \text{ fois}}$$

Par la suite, lorsqu'il n'y aura pas d'ambiguïté possible sur le Lagrangien, on notera le flot numérique lagrangien simplement par Φ_d , et par Φ_d^N sa composée N fois, $N \geq 1$.

La forme symplectique lagrangienne discrète qui est conservée par le flot numérique lagrangien est obtenue à partir des termes de bord apparaissant dans le calcul des variations précédent de la manière suivante :

On rappelle que la variation de l'action lagrangienne discrète s'écrit :

$$\begin{aligned}
\delta \mathcal{L}_d &= \sum_{k=1}^{N-1} \left((t_{k+1} - t_k) \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial t_k} + (t_k - t_{k-1}) \frac{\partial L_d(z_{k-1})}{\partial t_k} + L_d(z_{k-1}) - L_d(z_k) \right) \delta t_k \\
&+ \sum_{k=1}^{N-1} \left((t_{k+1} - t_k) \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial q_k} + (t_k - t_{k-1}) \frac{\partial L_d(z_{k-1})}{\partial q_k} \right) \delta q_k \\
&+ \left((t_1 - t_0) \frac{\partial L_d(z_0)}{\partial t_0} - L_d(z_0) \right) \delta t_0 + \left((t_N - t_{N-1}) \frac{\partial L_d(z_{N-1})}{\partial t_N} + L_d(z_{N-1}) \right) \delta t_N \\
&+ \left((t_1 - t_0) \frac{\partial L_d(z_0)}{\partial q_0} \right) \delta q_0 + \left((t_N - t_{N-1}) \frac{\partial L_d(z_{N-1})}{\partial q_N} \right) \delta q_N
\end{aligned}$$

Le long des solutions $\{w_k = (t_k, q_k)\}_{k=0, \dots, N}$ des équations (2.14) et (2.15), seuls les termes de bords ne s'annulent pas. En introduisant les 1-formes différentielles :

$$\begin{aligned}
\theta_L^- : \Omega_d \times \Omega_d &\longrightarrow T^*(\Omega_d \times \Omega_d) & (2.17) \\
(w_k, w_{k+1}) &\longmapsto \left((t_{k+1} - t_k) \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial t_k} - L_d(z_k) \right) dt_k + \left((t_{k+1} - t_k) \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial q_k} \right) dq_k
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
\theta_L^+ : \Omega_d \times \Omega_d &\longrightarrow T^*(\Omega_d \times \Omega_d) & (2.18) \\
(w_k, w_{k+1}) &\longmapsto \left((t_{k+1} - t_k) \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial t_{k+1}} + L_d(z_k) \right) dt_{k+1} + \left((t_{k+1} - t_k) \frac{\partial L_d(z_k)}{\partial q_{k+1}} \right) dq_{k+1}
\end{aligned}$$

On obtient ainsi :

$$\begin{aligned}
\delta \mathcal{L}_d &= d\mathcal{L}_d(w_0, \dots, w_N) \cdot (\delta w_0, \dots, \delta w_N) \\
&= \theta_L^-(w_0, w_1) \cdot (\delta w_0, \delta w_1) + \theta_L^+(w_{N-1}, w_N) \cdot (\delta w_{N-1}, \delta w_N) \\
&= \theta_L^-(w_0, w_1) \cdot (\delta w_0, \delta w_1) + (\Phi_d^{N-1})^* \theta_L^+(w_0, w_1) \cdot (\delta w_0, \delta w_1)
\end{aligned}$$

où l'application image réciproque $(\Phi_d^{N-1})^*$ est définie comme en (1.4). Les 1-formes θ_L^- et θ_L^+ sont appelées les formes de Liouville discrètes. On remarque que leur somme est une forme exacte au sens où elle est la différentielle d'une application :

$$\begin{aligned}
d((t_{k+1} - t_k)L_d)(z_k) &= (t_{k+1} - t_k) \left(\frac{\partial L_d}{\partial t_k} dt_k + \frac{\partial L_d}{\partial q_k} dq_k + \frac{\partial L_d}{\partial t_{k+1}} dt_{k+1} + \frac{\partial L_d}{\partial q_{k+1}} dq_{k+1} \right) \\
&+ (dt_{k+1} - dt_k)L_d(z_k) \\
&= (\theta_L^- + \theta_L^+)(z_k)
\end{aligned}$$

Or, par définition de la dérivée extérieure : $d^2 = 0$, on a :

$$\begin{aligned}
d^2((t_{k+1} - t_k)L_d) &= 0 \\
&= d\theta_L^- + d\theta_L^+
\end{aligned}$$

On définit alors la 2-forme symplectique lagrangienne discrète par :

$$\omega_d^L = -d\theta_L^- = d\theta_L^+ \quad (2.19)$$

Pour montrer que le flot numérique lagrangien Φ_d préserve cette forme, on remarque :

$$d\mathcal{L}_d = \theta_L^- + (\Phi_d)^*\theta_L^+$$

En prenant la dérivée extérieure de cette égalité :

$$\begin{aligned} d^2\mathcal{L}_d &= 0 \\ &= d\theta_L^- + (\Phi_d)^*d\theta_L^+ \end{aligned}$$

soit, d'après la définition de la forme symplectique lagrangienne discrète :

$$(\Phi_d)^*\omega_d^L = \omega_d^L \quad (2.20)$$

Ceci montre la symplecticité lagrangienne du flot.

2.3.3 Formulation hamiltonienne

On montre que cette forme symplectique lagrangienne discrète est reliée à la forme symplectique canonique issue du formalisme hamiltonien par une transformation de Legendre.

De la même manière que les systèmes lagrangiens sont reliés aux systèmes hamiltoniens par la transformation de Legendre :

$$\begin{aligned} \mathbb{F} : \mathbb{R} \times TQ &\longrightarrow \mathbb{R} \times T^*Q \\ (t, q, \dot{q}) &\longmapsto (t, q, p) \end{aligned}$$

il existe une transformation discrète reliant les variables discrètes. On se place dans le cas où les systèmes considérés sont autonomes. Les opérateurs de transformation de Legendre amont $\mathbb{F}_{L_d}^+$ et aval $\mathbb{F}_{L_d}^-$ sont définis par :

$$\begin{aligned} \mathbb{F}_{L_d}^+ : Q_d \times Q_d &\longrightarrow Q_d \times T_{q_{k+1}}Q_d \\ (q_k, q_{k+1}) &\longmapsto (q_{k+1}, p_{k+1}) = \left(q_{k+1}, \frac{\partial}{\partial q_{k+1}}L_d(q_k, q_{k+1})\right) \end{aligned} \quad (2.21)$$

et

$$\begin{aligned} \mathbb{F}_{L_d}^- : Q_d \times Q_d &\longrightarrow Q_d \times T_{q_k}Q_d \\ (q_k, q_{k+1}) &\longmapsto (q_k, p_k) = \left(q_k, -\frac{\partial}{\partial q_k}L_d(q_k, q_{k+1})\right) \end{aligned} \quad (2.22)$$

Les transformations de Legendre discrètes $\mathbb{F}_{L_d}^\pm$ permettent d'établir une correspondance entre la forme symplectique lagrangienne ω_L et la forme symplectique hamiltonienne canonique $\omega_H = dp^n \wedge dq^n$. Considérons un système hamiltonien discret

d'Hamiltonien discret H_d . On rappelle que le flot numérique hamiltonien d'un intégrateur symplectique :

$$\begin{aligned} \Phi_{H_d}^s : Q_d \times T_{q_k} Q_d &\longrightarrow Q_d \times T_{q_k} Q_d \\ (q_k, p_k) &\longmapsto (q_{k+1}, p_{k+1}) \end{aligned}$$

préserve la forme symplectique discrète canonique ω_H . Marsden *et al.* ont montré le résultat suivant [106] :

Proposition 2.3.1 *Pour tout flot hamiltonien symplectique $\Phi_{H_d}^s$, il existe un lagrangien discret L_d tel que le flot lagrangien associé Φ_{L_d} est la transformée de Legendre de $\Phi_{H_d}^s$:*

$$\Phi_{H_d}^s(q_k, p_k) = \mathbb{F}^\pm L_d \circ \Phi_{L_d} \circ \mathbb{F}^\pm L_d^{-1}(q_k, p_k) \quad (2.23)$$

On peut représenter les relations entre le flot lagrangien discret et le flot hamiltonien discret par le diagramme commutatif suivant [106] :

$$\begin{array}{ccccc} & & (q_k, q_{k+1}) & \xrightarrow{\Phi_{L_d}} & (q_{k+1}, q_{k+2}) & & \\ & \mathbb{F}^-_{L_d} \swarrow & & \searrow \mathbb{F}^+_{L_d} & & \mathbb{F}^-_{L_d} \swarrow & \searrow \mathbb{F}^+_{L_d} \\ (q_k, p_k) & \xrightarrow{\Phi_{H_d}^s} & (q_{k+1}, p_{k+1}) & \xrightarrow{\Phi_{H_d}^s} & (q_{k+2}, p_{k+2}) & & \end{array}$$

Cela signifie que tout intégrateur variationnel est symplectique.

Par exemple, en choisissant une quadrature du terme intégral de type point milieu (Fig. (2.2) (c)) et une discrétisation des termes dérivées par une méthode de type Euler, on obtient la méthode symplectique du point milieu :

$$\begin{aligned} \frac{q_{k+1} - q_k}{\Delta t} &= \frac{\partial H}{\partial p} \left(\frac{q_{k+1} + q_k}{2}, \frac{p_{k+1} + p_k}{2} \right) \\ \frac{p_{k+1} - p_k}{\Delta t} &= -\frac{\partial H}{\partial q} \left(\frac{q_{k+1} + q_k}{2}, \frac{p_{k+1} + p_k}{2} \right) \end{aligned}$$

2.3.4 L'oscillateur harmonique.

On présente un intégrateur variationnel pour le lagrangien autonome :

$$L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2}(\dot{q}^2 - q^2) \quad (2.24)$$

L'équation d'Euler-Lagrange obtenue correspond à la dynamique d'un oscillateur harmonique décrite dans l'espace des configurations :

$$\ddot{q} + q = 0 \quad (2.25)$$

La loi de conservation de l'énergie s'exprime comme :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} (\dot{q}^2 + q^2) \right) = 0 \quad (2.26)$$

Par transformation de Legendre, on retrouve la conservation de $H = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} - L$ au cours du temps.

On propose un exemple d'intégrateur variationnel pour décrire un tel système. On en illustre les performances numériques.

2.3.4.1 Intégrateur variationnel

On considère l'action lagrangienne :

$$\mathcal{L}(q) = \sum_{k=0}^{N-1} \int_{t_k}^{t_{k+1}} L(q(t), \dot{q}(t)) dt = \sum_{k=0}^{N-1} \mathcal{L}^k(q)$$

sur une partition $\{t_k\}_{k=0, \dots, N}$ d'un intervalle de temps $I \subset \mathbb{R}$.

On choisit d'approximer l'intégrale \mathcal{L}^k par la méthode des rectangles :

$$\mathcal{L}^k(q) \simeq (t_{k+1} - t_k) L(q(t_k), \dot{q}(t_k)) \quad (2.27)$$

Le Lagrangien L est discrétisé en différences finies par le Lagrangien discret L_d , pour tout $0 \leq k \leq N - 1$:

$$L_d(t_k, q_k, t_{k+1}, q_{k+1}) = \frac{1}{2} \left(\left(\frac{q_{k+1} - q_k}{t_{k+1} - t_k} \right)^2 - q_k^2 \right) \quad (2.28)$$

Les équations variationnelles discrètes sont données par :

$$0 = \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{t_{k+1} - t_k} \right) - \left(\frac{q_k - q_{k-1}}{t_k - t_{k-1}} \right) + q_k (t_{k+1} - t_k) \quad (2.29)$$

$$0 = \left(\left(\frac{q_{k+1} - q_k}{t_{k+1} - t_k} \right)^2 - \left(\frac{q_k - q_{k-1}}{t_k - t_{k-1}} \right)^2 \right) + (q_k^2 - q_{k-1}^2) \quad (2.30)$$

La première équation correspond à l'équation d'Euler-Lagrange discrétisée, alors que la seconde équation impose la conservation à chaque pas de temps de l'énergie discrète :

$$H_d^k = \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{t_{k+1} - t_k} \right)^2 + q_k^2, \quad \forall k \geq 0, \quad (2.31)$$

Le flot de l'intégrateur variationnel est une relation de récurrence :

$$\Psi_L : ((t_{k-1}, q_{k-1}); (t_k, q_k)) \mapsto ((t_k, q_k); (t_{k+1}, q_{k+1})), \quad k = 1, \dots, N - 1$$

Ainsi, la condition initiale porte sur (t_0, q_0) et (t_1, q_1) . Les inconnues sont (t_{k+1}, q_{k+1}) . L'équation de conservation de l'énergie réalise une relation de récurrence avec la condition initiale :

$$\left(\frac{q_{k+1} - q_k}{t_{k+1} - t_k}\right)^2 + q_k^2 = H_d^0, \quad \forall k \geq 0, \quad (2.32)$$

L'équation d'Euler-Lagrange discrète devient alors :

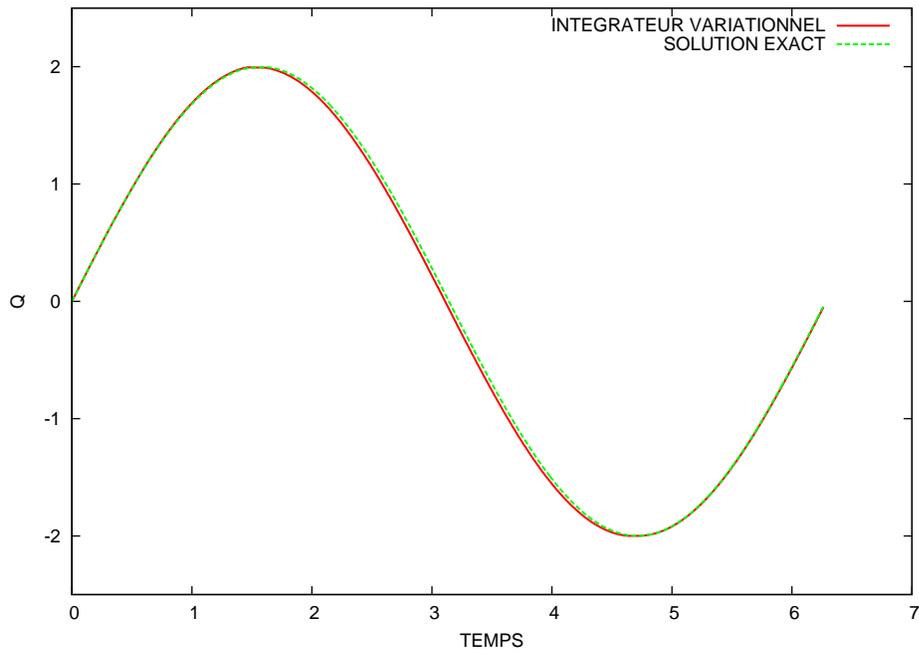
$$0 = (q_{k+1} - q_k) - \left(\frac{q_k - q_{k-1}}{t_k - t_{k-1}}\right) \frac{|q_{k+1} - q_k|}{\sqrt{H_d^0 - q_k^2}} + q_k \frac{(q_{k+1} - q_k)^2}{H_d^0 - q_k^2} \quad (2.33)$$

2.3.4.2 Résultat numérique.

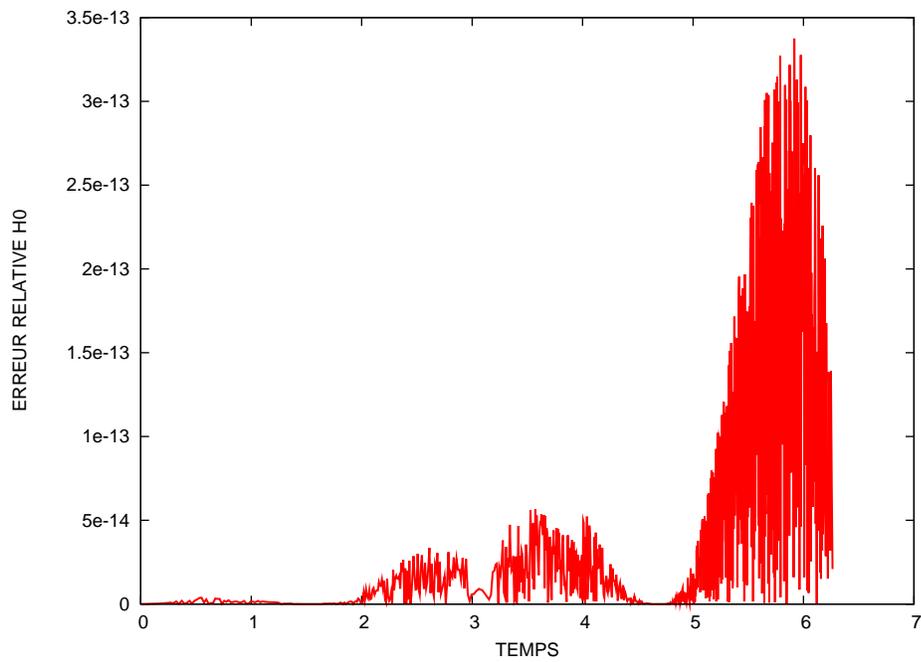
On illustre numériquement les propriétés de l'intégrateur variationnel. On effectue une simulation numérique avec comme condition initiale $(t_0, q_0) = (0, 0)$ et $(t_1, q_1) = (0.01, 0.2)$. Notamment $\Delta t_0 = t_1 - t_0 = 1.10^{-2}$. La Fig. (2.3) illustre les solutions numériques des deux équations composant l'intégrateur variationnel. En (a), la solution de l'équation d'Euler-Lagrange correspondant à la trajectoire d'une particule au cours du temps dans l'espace des configurations. Elle comparée à la solution analytique sur une période. En (b) : erreur relative sur la conservation de l'énergie. Comme on pouvait s'y attendre, la méthode traduit de façon satisfaisante la conservation de l'énergie au cours du temps. L'erreur est de l'ordre de 10^{-13} .

2.4 EDP lagrangiennes

On présente un calcul de variation pour les équations aux dérivées partielles dérivant d'un Lagrangien. La variation, associée à une transformation de l'action lagrangienne, agit sur les variables dépendantes et indépendantes. Comme pour les équations différentielles lagrangiennes, on obtient les équations de la dynamique décrites par les équation d'Euler-Lagrange, et des équations correspondant à des lois d'évolution ; notamment celle de l'énergie associée aux variations de la variable de temps t et celle de la quantité de mouvement associée aux variations de la variable d'espace x . On retrouve en particulier les lois de conservation de l'énergie (respectivement de la quantité de mouvement) lorsque le Lagrangien est indépendant de t (respectivement de x). De plus, le terme de bord définit les quantités invariantes le long des solutions des équations d'Euler-Lagrange. On retrouve une autre forme du théorème de Nœther.



(a) Solution numérique de l'intégrateur variationnel



(b) Erreur relative sur l'énergie mécanique

FIG. 2.3 – Oscillateur harmonique. *Intégrateur variationnel* : (a) : trajectoire numérique comparée à la solution analytique, (b) : conservation de l'énergie au cours du temps. Condition initiale : $(t_0, q_0) = (0, 0)$ et $(t_1, q_1) = (0.01, 0.2)$.

2.4.1 Équations variationnelles

On définit alors une densité lagrangienne l associée au Lagrangien $L : \Omega^{(1)} \rightarrow \mathbb{R}$ comme l'application :

$$\begin{aligned} l : \Omega^{(1)} &\longrightarrow \Lambda^{m+1}(X) \\ (x, u, u_x) &\longmapsto L(x, u, u_x) d^{m+1}x \end{aligned}$$

où $\Lambda^{m+1}(X)$ est l'espace des $(m+1)$ -formes différentielles sur X , et $d^{m+1}x = dt \wedge dx^1 \wedge \dots \wedge dx^m$. La fonctionnelle d'action \mathcal{L} associée est l'application :

$$\begin{aligned} \mathcal{L} : \mathcal{C}_{[x_0, x_1]}(U) &\longrightarrow \mathbb{R} \\ u &\longmapsto \int_{x_0}^{x_1} L(x, u, u_x) d^{m+1}x \end{aligned}$$

où $\mathcal{C}_{[x_0, x_1]}(U)$ représente l'ensemble des trajectoires possibles $u(x)$ dans U reliant les points $u_0 = u(x_0)$ et $u_1 = u(x_1)$.

Les exemples traités par la suite ne concernent que le cas particulier de deux variables indépendantes ($m = 1$) et une variable dépendante ($N = 1$). Cela permet de ne pas alourdir les notations, et le calcul se généralise sans difficultés aux dimensions supérieures. On note les variables indépendantes (x, t) et la variable dépendante u . Les éléments de $U^{(1)}$ sont u_t et u_x . Les éléments de $\Omega^{(1)}$ sont alors notés $z = (t, x, u, u_t, u_x)$.

On considère alors une transformation sur les éléments de $\Omega^{(1)}$:

$$\begin{aligned} x &\mapsto x + \delta x, & t &\mapsto t + \delta t, & u &\mapsto u + \delta u, \\ u_x &\mapsto u_x + \delta u_x, & u_t &\mapsto u_t + \delta u_t, \end{aligned} \quad (2.34)$$

où δx , δt et δu sont les variations infinitésimales dues à la transformation. Elle dépendent chacune de t , x et u . Regardons à quoi correspondent δu_x et δu_t . Comme

$$du = u_x dx + u_t dt$$

et

$$\begin{aligned} \delta(du) &= \delta u_x dx + \delta u_t dt + u_x \delta dx + u_t \delta dt \\ &= \delta u_x dx + \delta u_t dt + u_x d\delta x + u_t d\delta t \\ &= d(\delta u) \end{aligned}$$

on a alors :

$$\delta u_x = \frac{d}{dx} \delta u - u_x \frac{d}{dx} \delta x - u_t \frac{d}{dx} \delta t \quad (2.35)$$

D'une manière analogue, on obtient :

$$\delta u_t = \frac{d}{dt} \delta u - u_t \frac{d}{dt} \delta t - u_x \frac{d}{dt} \delta x \quad (2.36)$$

Les équations variationnelles dérivent de la variation de l'action lagrangienne :

$$\begin{aligned}
\delta \mathcal{L} &= \delta \int_M L(t, x, u, u_x, u_t) dx \wedge dt \\
&= \int_M \delta L(t, x, u, u_x, u_t) dx \wedge dt + \int_M L(t, x, u, u_x, u_t) \delta(dx \wedge dt) \\
&= A + B
\end{aligned}$$

Le calcul de la première intégrale A s'obtient à partir de :

$$\delta L = \frac{\partial L}{\partial t} \delta t + \frac{\partial L}{\partial x} \delta x + \frac{\partial L}{\partial u} \delta u + \frac{\partial L}{\partial u_t} \delta u_t + \frac{\partial L}{\partial u_x} \delta u_x$$

avec :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial u_t} \delta u_t &= \frac{\partial L}{\partial u_t} \frac{d}{dt} \delta u - u_t \frac{\partial L}{\partial u_t} \frac{d}{dt} \delta t - u_x \frac{\partial L}{\partial u_t} \frac{d}{dt} \delta x \\
&= \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial u_t} \delta u \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial u_t} \right) \delta u - \frac{d}{dt} \left(u_t \frac{\partial L}{\partial u_t} \delta t \right) \\
&\quad + \frac{d}{dt} \left(u_t \frac{\partial L}{\partial u_t} \right) \delta t - \frac{d}{dt} \left(u_x \frac{\partial L}{\partial u_t} \delta x \right) + \frac{d}{dt} \left(u_x \frac{\partial L}{\partial u_t} \right) \delta x \\
&= \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial u_t} \delta u - u_t \frac{\partial L}{\partial u_t} \delta t - u_x \frac{\partial L}{\partial u_t} \delta x \right] - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial u_t} \right) \delta u + \frac{d}{dt} \left(u_t \frac{\partial L}{\partial u_t} \right) \delta t + \frac{d}{dt} \left(u_x \frac{\partial L}{\partial u_t} \right) \delta x
\end{aligned}$$

et de manière similaire :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial u_x} \delta u_x &= \frac{d}{dx} \left[\frac{\partial L}{\partial u_x} \delta u - u_x \frac{\partial L}{\partial u_x} \delta x - u_t \frac{\partial L}{\partial u_x} \delta t \right] \\
&\quad - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial u_x} \right) \delta u + \frac{d}{dx} \left(u_x \frac{\partial L}{\partial u_x} \right) \delta x + \frac{d}{dx} \left(u_t \frac{\partial L}{\partial u_x} \right) \delta t
\end{aligned}$$

On obtient alors au final :

$$\begin{aligned}
A &= \int_M \left(\left[\frac{\partial L}{\partial t} + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial u_t} u_t \right) + \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial u_x} u_t \right) \right] \delta t + \left[\frac{\partial L}{\partial x} + \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial u_x} u_x \right) + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial u_t} u_x \right) \right] \delta x \right. \\
&\quad \left. + \left[\frac{\partial L}{\partial u} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial u_t} - \frac{d}{dx} \frac{\partial L}{\partial u_x} \right] \delta u \right) dx \wedge dt \tag{2.37}
\end{aligned}$$

Le calcul de la seconde intégrale B s'effectue en remarquant d'une part que :

$$\delta(dx \wedge dt) = (\delta dx) \wedge dt + dx \wedge (\delta dt)$$

et d'autre part que :

$$\begin{aligned}
d(L(\delta x dt + \delta t dx)) &= dL \wedge (\delta x dt + \delta t dx) + L d(\delta x dt + \delta t dx) \\
&= \delta x dL \wedge dt + \delta t dL \wedge dx + L d(\delta x dt + \delta t dx)
\end{aligned}$$

alors :

$$\begin{aligned}
B &= \int_M L(t, x, u, u_x, u_t) \delta(dx \wedge dt) \\
&= \int_M L ((\delta dx) \wedge dt + dx \wedge (\delta dt)) \\
&= \int_M L d(\delta x dt - \delta t dx) \\
&= \int_M d(L (\delta x dt - \delta t dx)) - \int_M (\delta x dL \wedge dt + \delta t dL \wedge dx)
\end{aligned}$$

Soit :

$$B = \int_{\partial M} L (\delta x dt - \delta t dx) - \int_M (\delta x \frac{dL}{dx} dx \wedge dt + \delta t \frac{dL}{dt} dt \wedge dx) \quad (2.38)$$

Ainsi, en regroupant tous les termes A et B , on obtient l'expression de la variation de l'action lagrangienne :

$$\delta \mathcal{L} = I_M + I_{\partial M}$$

où I_M est le terme intégral :

$$\begin{aligned}
I_M &= \int_M [(\frac{\partial L}{\partial t} + \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial u_t} u_t - L) + \frac{d}{dx}(\frac{\partial L}{\partial u_x} u_t)) \delta t + (\frac{\partial L}{\partial x} + \frac{d}{dx}(\frac{\partial L}{\partial u_x} u_x - L) + \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial u_t} u_x)) \delta x \\
&\quad + (\frac{\partial L}{\partial u} - \frac{d}{dx} \frac{\partial L}{\partial u_x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial u_t}) \delta u] dx \wedge dt \quad (2.39)
\end{aligned}$$

Et I_2 est le terme s'intégrant sur le bord ∂M du domaine :

$$\begin{aligned}
I_{\partial M} &= \int_{\partial M} [((\frac{\partial L}{\partial u_t} u_t - L) dx - (\frac{\partial L}{\partial u_x} u_t) dt) \delta t + ((L - \frac{\partial L}{\partial u_x} u_x) dt + (\frac{\partial L}{\partial u_t} u_x) dx) \delta x \\
&\quad + (\frac{\partial L}{\partial u_x} dt - \frac{\partial L}{\partial u_t} dx) \delta u] \quad (2.40)
\end{aligned}$$

Ce terme de bord s'annule lorsque l'on suppose les variations δt , δx et δu nulles sur le bord ∂M . Dans ce cas alors, la condition d'invariance de l'action lagrangienne par rapport à la transformation $\delta \mathcal{L} = 0$ fait apparaître les équations suivantes, appelées équations variationnelles :

$$0 = \frac{\partial L}{\partial u} - \frac{d}{dx} \frac{\partial L}{\partial u_x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial u_t} \quad (2.41)$$

$$0 = \frac{\partial L}{\partial t} + \frac{d}{dt} (\frac{\partial L}{\partial u_t} u_t - L) + \frac{d}{dx} (\frac{\partial L}{\partial u_x} u_t) \quad (2.42)$$

$$0 = \frac{\partial L}{\partial x} + \frac{d}{dx} (\frac{\partial L}{\partial u_x} u_x - L) + \frac{d}{dt} (\frac{\partial L}{\partial u_t} u_x) \quad (2.43)$$

Les variations de δu donnent l'équation d'Euler-Lagrange (2.41). Par les variations de δt , on obtient l'équation (2.42). Là encore, on appelle cette équation l'équation d'évolution locale de l'énergie. Des variations de δx , on obtient l'équation (2.43), que l'on nomme équation d'évolution locale de la quantité de mouvement. En effet, lorsque le Lagrangien est indépendant du temps t et de l'espace x , on obtient un loi de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement. Comme pour le cas des EDO, les équations (2.42) et (2.43) sont automatiquement vérifiées par toute solution de (2.41). Cependant, on va voir que la redondance n'est plus vérifiée lors du passage au discret.

2.4.1.1 Lois de conservation

En supposant que la transformation (2.34) ne laisse pas inchangé le bord du domaine, l'invariance de \mathcal{L} le long des solutions se traduit par la conservation des quantités définies par les termes de bord. On obtient ainsi une extension aux EDP lagrangiennes du théorème de Nœther.

Théorème 2.4.1 (Théorème de Nœther) *Soit L un Lagrangien dépendant de l'espace x et du temps t , de la variable u et de ses dérivées partielles u_x et u_t . Si une transformation :*

$$t \mapsto t + \delta t, \quad x \mapsto x + \delta x, \quad u \mapsto u + \delta u,$$

laisse invariante l'action lagrangienne associée à L , alors pour toute solution des équations d'Euler-Lagrange, on a la loi de conservation suivante :

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \left(\left(L - \frac{\partial L}{\partial u_t} u_t \right) \delta t - \left(\frac{\partial L}{\partial u_t} u_x \right) \delta x + \frac{\partial L}{\partial u_t} \delta u \right) \\ &\quad + \frac{d}{dx} \left(\left(L - \frac{\partial L}{\partial u_x} u_x \right) \delta x - \left(\frac{\partial L}{\partial u_x} u_t \right) \delta t + \frac{\partial L}{\partial u_x} \delta u \right) \end{aligned} \quad (2.44)$$

2.4.1.2 Multisymplecticité.

En plus des lois de conservation, on énonce que le flot lagrangien préserve une forme multisymplectique lagrangienne. La démonstration, omise ici, nécessite d'introduire d'autres concepts. On renvoie aux articles originaux de Marsden *et al.* [102] [103] et Chen [25] pour les détails.

Définition 2.4.1 (Flot lagrangien multisymplectique) *Soit $\Omega^{(1)}$ l'espace des configurations étendu défini comme en (2.1) dont les éléments sont notés $z =$*

(t, x, u, u_t, u_x) . Soit un Lagrangien $L : \Omega^{(1)} \rightarrow \mathbb{R}$. On appelle flot lagrangien sur $\Omega^{(1)}$ pour les équations (2.41 - 2.43) l'application

$$\begin{aligned} \Psi_{01}^L : \Omega^{(1)} &\longrightarrow \Omega^{(1)} \\ z_0 &\longmapsto z_1 \end{aligned}$$

où $z_1 = (t_1, x_1, u(t_1, x_1), u_t(t_1, x_1), u_x(t_1, x_1))$ est une solution des équations variationnelles (2.41 - 2.43) dès lors que $z_0 = (t_0, x_0, u(t_0, x_0), u_t(t_0, x_0), u_x(t_0, x_0))$ est aussi une solution des ces mêmes équations.

Lorsqu'il n'y aura pas de confusion possible sur l'antécédant z_0 et l'image z_1 du flot lagrangien multisymplectique, celui-ci sera noté simplement Ψ^L .

La multisymplecticité de Ψ^L s'établit en construisant la forme multisymplectique lagrangienne. Celle-ci correspond à la dérivée extérieure de la forme différentielle obtenue à partir des termes de bord le long des solutions des équations variationnelles. Or, le long des solutions de (2.41 - 2.43), la condition d'invariance de l'action lagrangienne $\delta\mathcal{L} = 0$ par rapport à la transformation (2.34) se réduit au terme de bord :

$$\begin{aligned} 0 = \int_{\partial M} & \left[\left(\left(\frac{\partial L}{\partial u_t} u_t - L \right) dx - \left(\frac{\partial L}{\partial u_x} u_t \right) dt \right) \delta t + \left(\left(L - \frac{\partial L}{\partial u_x} u_x \right) dt + \left(\frac{\partial L}{\partial u_t} u_x \right) dx \right) \delta x \right. \\ & \left. + \left(\frac{\partial L}{\partial u_x} dt - \frac{\partial L}{\partial u_t} dx \right) \delta u \right] \end{aligned}$$

Ce terme de bord s'écrit à l'aide de la forme de Cartan :

$$\begin{aligned} \Theta_L : \quad T^*\Omega &\longrightarrow \mathbb{R} & (2.45) \\ ((t, x, u); (\delta t, \delta x, \delta u)) &\longmapsto \frac{\partial L}{\partial u_x} du \wedge dt - \frac{\partial L}{\partial u_t} du \wedge dx + \left(L - \frac{\partial L}{\partial u_x} u_x - \frac{\partial L}{\partial u_t} u_t \right) dx \wedge dt \end{aligned}$$

En prenant la dérivée extérieure de cette forme, on obtient la forme multisymplectique lagrangienne :

$$\Omega_L \equiv d\Theta_L$$

2.5 Intégrateurs variationnels multisymplectiques

On décrit le principe de construction d'un intégrateur variationnel pour les équations aux dérivées partielles dérivant d'un Lagrangien. L'intégrateur variationnel est obtenu grâce à une version discrète du calcul de variation par rapport à une symétrie de l'action lagrangienne. On obtient alors, comme dans le cas continu, un système d'équations correspondant aux équations d'Euler-Lagrange, à des lois locales d'évolution de l'énergie et de la quantité de mouvement. Le flot numérique lagrangien

préserve une forme multisymplectique discrète.

On illustre les propos encore une fois dans le cas de deux variables indépendantes (t, x) et d'une variable dépendante u .

On utilise la notation suivante : la version discrète de l'espace des variables indépendantes constitue le maillage $X_d = \{(t^n; x_i^n)\}_{n=0, \dots, N; i=0, \dots, m}$. L'espace des configuration discret est noté U_d . Il est étendu par $\Omega_d = X_d \times U_d$ dont les éléments sont les triplets de la forme $w_i^n = (t^n, x_i^n, u_i^n)$, avec $(n, i) \in \mathbb{N} \cap [0; N] \times \mathbb{N} \cap [0; m]$. On note aussi par Δt_n , ou simplement par Δt lorsqu'il n'y a pas de confusion possible, le pas de temps $t^{n+1} - t^n$. De même, Δx_i^n , ou simplement Δx , représente le pas d'espace $x_{i+1}^n - x_i^n$.

2.5.1 Intégrateurs variationnels

En considérant une partition $[t^0, \dots, t^N] \times [x_0, \dots, x_m]$ d'un ouvert M de X , l'action lagrangienne s'écrit :

$$\mathcal{L} = \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=0}^{m-1} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_i^n}^{x_{i+1}^n} L(t, x, u, u_t, u_x) dx \wedge dt$$

On approxime les termes intégraux pour tout $n \in [0; N - 1]$ et $i \in [0; m - 1]$, par :

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_i^n}^{x_{i+1}^n} L(t, x, u, u_t, u_x) dx \wedge dt = \mathcal{L}_d(t^{n_0}, \dots, t^{n_p}, x_{i_0}, \dots, x_{i_q}, u_{i_0}^{n_0}, \dots, u_{i_q}^{n_0}, \dots, u_{i_0}^{n_p}, \dots, u_{i_q}^{n_p}) + O(\Delta t^p, \Delta x^q)$$

où \mathcal{L}_d est obtenu par une méthode de quadrature d'ordre $(\Delta t^p, \Delta x^q)$, définie à partir d'un motif élémentaire du maillage X_d . On peut par exemple considérer les motifs élémentaires suivants :

- motif triangulaire supérieur : $\{(n, i), (n + 1, i), (n + 1, i + 1)\}$.
- motif triangulaire inférieur : $\{(n, i), (n + 1, i), (n, i + 1)\}$.
- motif rectangulaire : $\{(n, i), (n + 1, i), (n, i + 1), (n + 1, i + 1)\}$.
- motif hexagonal : $\{(n, i), (n + 1, i), (n, i + \frac{1}{2}), (n + 1, i + \frac{1}{2}), (n, i + 1), (n + 1, i + 1)\}$.

comme illustrés sur la Fig. 2.4. La discrétisation des dérivées s'effectue ensuite selon la méthode de quadrature utilisée. On se propose là encore d'expliciter les calculs permettant d'obtenir les équations variationnelles discrètes définissant l'intégrateur variationnel dans un cas particulier. Cela permet de rendre plus lisible les étapes du calcul et servira dans l'exemple d'illustration. Le motif élémentaire considéré

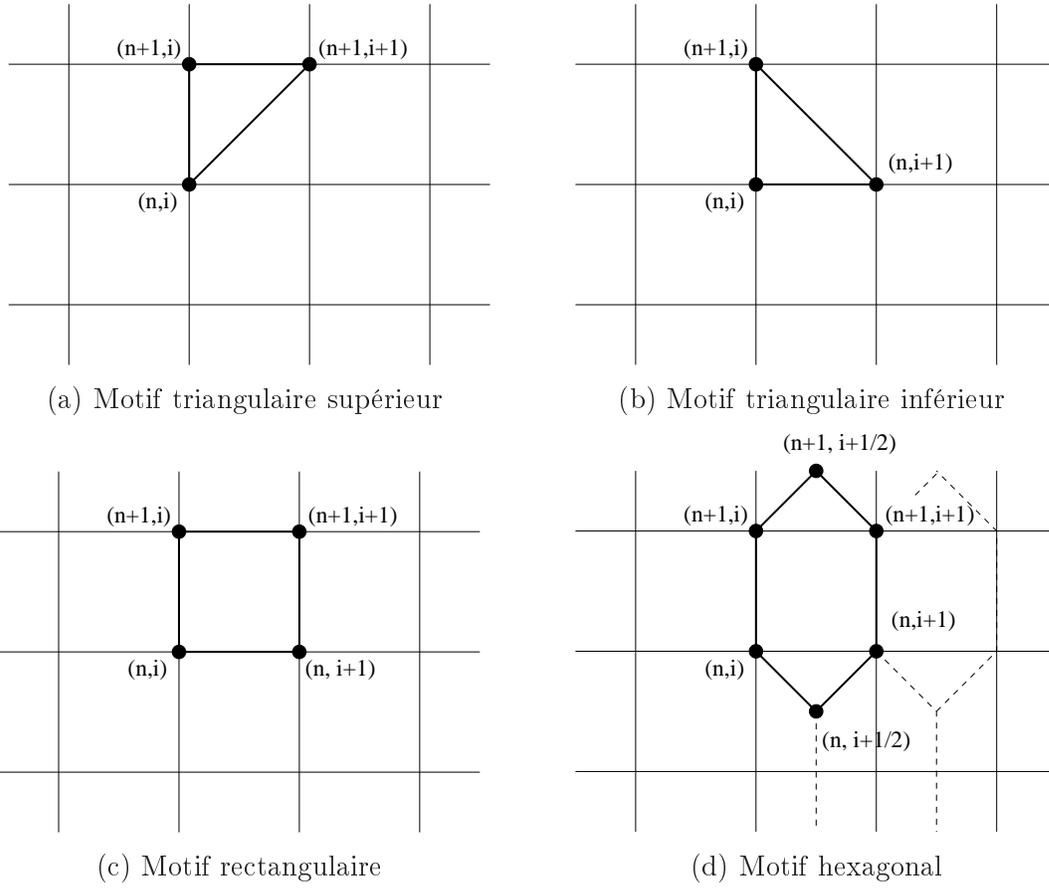


FIG. 2.4 – Différents motifs permettant d'approximer l'action lagrangienne discrète.

est triangulaire inférieur. La méthode de quadrature pour calculer les intégrales est la méthode des rectangles d'ordre 1, de sorte que que l'action lagrangienne soit approximée par :

$$\mathcal{L} \simeq \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=0}^{m-1} (t^{n+1} - t^n)(x_{i+1}^n - x_i^n) L_d(z_i^n)$$

où L_d est une discrétisation en différences finies du Lagrangien, pour laquelle les dérivées premières sont approximées par une méthode de type Euler :

$$\frac{\partial u}{\partial t} \simeq \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t^n}, \quad \frac{\partial u}{\partial x} \simeq \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x_i^n},$$

Le Lagrangien discret L_d est une fonction du point z_i^n appartenant au motif élémentaire $z_i^n = (w_i^n, w_i^{n+1}, w_{i+1}^n)$, où on rappelle qu'un point du maillage $\Omega_d = X_d \times U_d$ est noté :

$$w_i^n = (t^n, x_i^n, u_i^n)$$

D'autre part, on considère une transformation agissant sur les variables discrètes :

$$w_i^n = (t^n, x_i^n, u_i^n) \longmapsto w_i^n + \delta w_i^n = (t^n + \delta t^n, x_i^n + \delta x_i^n, u_i^n + \delta u_i^n)$$

où $\delta w_i^n = (\delta t^n, \delta x_i^n, \delta u_i^n)$ représente un déplacement infinitésimal dans l'espace tangent à $\Omega_d = X_d \times U_d$ au point w_i^n .

On calcule alors une variation infinitésimale par rapport à cette transformation :

$$\begin{aligned}\delta \mathcal{L} &= \delta \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=0}^{m-1} (t^{n+1} - t^n)(x_{i+1}^n - x_i^n) L_d(z_i^n) \\ &= A_d + B_d + C_d\end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned}A_d &= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=0}^{m-1} (\delta t^{n+1} - \delta t^n)(x_{i+1}^n - x_i^n) L_d(z_i^n) \\ B_d &= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=0}^{m-1} (t^{n+1} - t^n)(\delta x_{i+1}^n - \delta x_i^n) L_d(z_i^n) \\ C_d &= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=0}^{m-1} (t^{n+1} - t^n)(x_{i+1}^n - x_i^n) \delta L_d(z_i^n)\end{aligned}$$

où dans C , la variation de la densité lagrangienne s'écrit :

$$\begin{aligned}\delta L_d(z_i^n) &= \frac{\partial L_d}{\partial t^n}(z_i^n) \delta t^n + \frac{\partial L_d}{\partial t^{n+1}}(z_i^n) \delta t^{n+1} + \frac{\partial L_d}{\partial x_i^n}(z_i^n) \delta x_i^n + \frac{\partial L_d}{\partial x_{i+1}^n}(z_i^n) \delta x_{i+1}^n \\ &\quad + \frac{\partial L_d}{\partial u_i^n}(z_i^n) \delta u_i^n + \frac{\partial L_d}{\partial u_i^{n+1}}(z_i^n) \delta u_i^{n+1} + \frac{\partial L_d}{\partial u_{i+1}^n}(z_i^n) \delta u_{i+1}^n\end{aligned}$$

En réindiquant les sommes et en regroupant les termes, on fait apparaître les termes de bords dans chacun des termes de sommation A_d , B_d et C_d :

$$\begin{aligned}A_d &= \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{i=0}^{m-1} (x_{i+1}^n - x_i^n) (L_d(z_i^{n-1}) - L_d(z_i^n)) \delta t^n \\ &\quad - \sum_{i=0}^{m-1} ((x_{i+1}^n - x_i^n) L_d(z_i^0)) \delta t^0 + \sum_{i=0}^{m-1} ((x_{i+1}^n - x_i^n) L_d(z_i^{N-1})) \delta t^N \\ &= \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{i=1}^{m-1} (x_{i+1}^n - x_i^n) (L_d(z_i^{n-1}) - L_d(z_i^n)) \delta t^n \\ &\quad + \underbrace{\sum_{i=0}^{m-1} (x_{i+1}^n - x_i^n) (L_d(z_i^{N-1}) \delta t^N - L_d(z_i^0) \delta t^0) + \sum_{n=1}^{N-1} (x_1 - x_0) (L_d(z_0^{n-1}) - L_d(z_0^n)) \delta t^n}_{A_{d\text{bord}}}\end{aligned}$$

De même :

$$\begin{aligned}
B_d &= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=1}^{m-1} (t^{n+1} - t^n) (L_d(z_{i-1}^n) - L_d(z_i^n)) \delta x_i^n \\
&\quad - \sum_{n=0}^{N-1} (t^{n+1} - t^n) (L_d(z_0^n)) \delta x_0 + \sum_{n=0}^{N-1} (t^{n+1} - t^n) (L_d(z_{m-1}^n)) \delta x_m \\
&= \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{i=1}^{m-1} (t^{n+1} - t^n) (L_d(z_{i-1}^n) - L_d(z_i^n)) \delta x_i^n \\
&\quad + \underbrace{\sum_{n=0}^{N-1} (t^{n+1} - t^n) (L_d(z_{m-1}^n) \delta x_m - L_d(z_0^n) \delta x_0) + \sum_{i=1}^{m-1} (t^1 - t^0) (L_d(z_{i-1}^0) - L_d(z_i^0)) \delta x_i^n}_{B_{d\text{bord}}}
\end{aligned}$$

Enfin, un calcul analogue pour la dernière somme donne :

$$\begin{aligned}
C_d &= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=0}^{m-1} (t^{n+1} - t^n) (x_{i+1}^n - x_i^n) \left(\frac{\partial L_d}{\partial t^n}(z_i^n) \delta t^n + \frac{\partial L_d}{\partial x_i^n}(z_i^n) \delta x_i^n + \frac{\partial L_d}{\partial u_i^n}(z_i^n) \delta u_i^n \right) \\
&\quad + \sum_{n=1}^N \sum_{i=0}^{m-1} (t^n - t^{n-1}) (x_{i+1}^n - x_i^n) \left(\frac{\partial L_d}{\partial t^n}(z_i^{n-1}) \delta t^n + \frac{\partial L_d}{\partial u_i^n}(z_i^{n-1}) \delta u_i^n \right) \\
&\quad + \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=1}^m (t^{n+1} - t^n) (x_i^n - x_{i-1}^n) \left(\frac{\partial L_d}{\partial x_i^n}(z_{i-1}^n) \delta x_i^n + \frac{\partial L_d}{\partial u_i^n}(z_{i-1}^n) \delta u_i^n \right) \\
&= \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{i=1}^{m-1} \left\{ (x_{i+1}^n - x_i^n) \left((t^n - t^{n-1}) \frac{\partial L_d}{\partial t^n}(z_i^{n-1}) + (t^{n+1} - t^n) \frac{\partial L_d}{\partial t^n}(z_i^n) \right) \delta t^n \right. \\
&\quad + (t^{n+1} - t^n) \left((x_i^n - x_{i-1}^n) \frac{\partial L_d}{\partial x_i^n}(z_{i-1}^n) + (x_{i+1}^n - x_i^n) \frac{\partial L_d}{\partial x_i^n}(z_i^n) \right) \delta x_i^n \\
&\quad + \left((t^n - t^{n-1}) (x_{i+1}^n - x_i^n) \frac{\partial L_d}{\partial u_i^n}(z_i^{n-1}) + (t^{n+1} - t^n) (x_i^n - x_{i-1}^n) \frac{\partial L_d}{\partial u_i^n}(z_{i-1}^n) \right. \\
&\quad \left. \left. + (t^{n+1} - t^n) (x_{i+1}^n - x_i^n) \frac{\partial L_d}{\partial u_i^n}(z_i^n) \right) \delta u_i^n \right\} + C_{\text{bord}}
\end{aligned}$$

où $C_{d\text{bord}}$ regroupe tous les termes de bord de C :

$$\begin{aligned}
C_{d\text{bord}} = & \sum_{i=0}^{m-1} (t^N - t^{N-1})(x_{i+1}^n - x_i^n) \left(\frac{\partial L_d}{\partial t^N}(z_i^{N-1}) \delta t^N + \frac{\partial L_d}{\partial u_i^N}(z_i^{N-1}) \delta u_i^N \right) \\
& + \sum_{n=1}^{N-1} (t^n - t^{n-1})(x_1 - x_0) \left(\frac{\partial L_d}{\partial t^n}(z_0^{n-1}) \delta t^n + \frac{\partial L_d}{\partial u_0^n}(z_0^{n-1}) \delta u_0^n \right) \\
& + \sum_{n=0}^{N-1} (t^{n+1} - t^n)(x_m - x_{m-1}) \left(\frac{\partial L_d}{\partial x_m}(z_{m-1}^n) \delta x_m + \frac{\partial L_d}{\partial u_m^n}(z_{m-1}^n) \delta u_m^n \right) \\
& + \sum_{i=1}^{m-1} (t^1 - t^0)(x_i^n - x_{i-1}^n) \left(\frac{\partial L_d}{\partial x_i^n}(z_{i-1}^0) \delta x_i^n + \frac{\partial L_d}{\partial u_i^0}(z_{i-1}^0) \delta u_i^0 \right) \\
& + \sum_{i=0}^{m-1} (t^1 - t^0)(x_{i+1}^n - x_i^n) \left(\frac{\partial L_d}{\partial t^0}(z_i^0) \delta t^0 + \frac{\partial L_d}{\partial x_i^n}(z_i^0) \delta x_i^n + \frac{\partial L_d}{\partial u_i^0}(z_i^0) \delta u_i^0 \right) \\
& + \sum_{n=1}^{N-1} (t^{n+1} - t^n)(x_1 - x_0) \left(\frac{\partial L_d}{\partial t^n}(z_0^n) \delta t^n + \frac{\partial L_d}{\partial x_0}(z_0^n) \delta x_0 + \frac{\partial L_d}{\partial u_0^n}(z_0^n) \delta u_0^n \right)
\end{aligned}$$

Finalement, l'intégrateur variationnel multisymplectique est donné par le système d'équations suivant, pour tout $1 \leq n \leq N-1$ et $1 \leq i \leq m-1$:

$$\begin{aligned}
0 = & (t^n - t^{n-1})(x_{i+1}^n - x_i^n) \frac{\partial L_d}{\partial u_i^n}(z_i^{n-1}) + (t^{n+1} - t^n)(x_i^n - x_{i-1}^n) \frac{\partial L_d}{\partial u_i^n}(z_{i-1}^n) \\
& + (t^{n+1} - t^n)(x_{i+1}^n - x_i^n) \frac{\partial L_d}{\partial u_i^n}(z_i^n) \tag{2.46}
\end{aligned}$$

$$0 = (t^n - t^{n-1}) \frac{\partial L_d}{\partial t^n}(z_i^{n-1}) + (t^{n+1} - t^n) \frac{\partial L_d}{\partial t^n}(z_i^n) + L_d(z_i^{n-1}) - L_d(z_i^n) \tag{2.47}$$

$$0 = (x_i^n - x_{i-1}^n) \frac{\partial L_d}{\partial x_i^n}(z_{i-1}^n) + (x_{i+1}^n - x_i^n) \frac{\partial L_d}{\partial x_i^n}(z_i^n) + L_d(z_{i-1}^n) - L_d(z_i^n) \tag{2.48}$$

Ce système d'équations est appelé système d'équations variationnelles discrètes. L'équation (2.46) correspond à l'équation d'Euler-Lagrange obtenue d'après les variations de δu_i^n . Les équations (2.47) et (2.48) correspondent respectivement aux versions discrètes des équations d'évolution de l'énergie et de la quantité de mouvement, obtenues par les variations respectives de δt^n et δx_i^n . Contrairement au cas continu, ces deux dernières équations ne sont pas systématiquement vérifiées par l'équation (2.46).

2.5.2 L'équation des ondes.

À titre d'exemple pour illustrer la construction d'un intégrateur variationnel, on propose d'étudier l'équation des ondes :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (2.49)$$

sur un domaine spatial $\Omega = [a, b]$, pour $t \geq 0$ et des conditions limites de la forme :

$$u(x, 0) = f(x), \quad \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = g(x), \quad u(a, t) = A, \quad u(b, t) = B,$$

L'énergie du système est :

$$\mathcal{E}(t) = \int_a^b \left(\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right) dx, \quad t \geq 0, \quad (2.50)$$

Elle conservée au cours du temps.

Le Lagrangien associé est :

$$L(x, t, u, u_x, u_t) = -\frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 - \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right) \quad (2.51)$$

L'équation d'Euler-Lagrange est bien l'équation des ondes (2.49). Les équations (2.42) et (2.43) s'écrivent :

$$\frac{\partial u}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) = 0 \quad (2.52)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) = 0 \quad (2.53)$$

À première vue, ces équations sont redondantes avec l'équation d'Euler-Lagrange, dans le sens où toute solution de (2.49) est aussi solution de (2.52) et (2.53). Cependant, une autre manière de les considérer est de remarquer d'une part qu'elles s'écrivent aussi sous la forme de loi de conservation :

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right) + \frac{d}{dx} \left(- \left(\frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right) \\ &= \frac{d}{dt} C_1^t + \frac{d}{dx} C_2^t \end{aligned} \quad (2.54)$$

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \left(\left(\frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right) + \frac{d}{dx} \left(- \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right) \right) \\ &= \frac{d}{dt} C_1^x + \frac{d}{dx} C_2^x \end{aligned} \quad (2.55)$$

L'équation (2.54), obtenue comme le facteur en δt de la variation de l'action lagrangienne, représente donc la divergence du vecteur C^t :

$$C^t = (C_1^t, C_2^t)^T = \left(\frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right), - \left(\frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right)^T \quad (2.56)$$

Il est en fait la quantité invariante associée à la translation temporelle :

$$t \mapsto t + \delta t, \quad x \mapsto x, \quad u \mapsto u,$$

En effet, la quantité conservée pour cette transformation est donnée par le théorème de Noether (2.4.1) :

$$C_1^t = L - u_t \frac{\partial L}{\partial u_t}, \quad C_2^t = -u_t \frac{\partial L}{\partial u_x},$$

où $u_t = \frac{\partial u}{\partial t}$ et $u_x = \frac{\partial u}{\partial x}$.

De même, l'équation (2.55), obtenue comme le facteur en δx de la variation de l'action lagrangienne, correspond à la divergence du vecteur C^x :

$$C^x = (C_1^x, C_2^x)^T = \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial u}{\partial x} \right), - \left(\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right) \right)^T \quad (2.57)$$

Il peut être obtenu en considérant la symétrie variationnelle par rapport à la translation spatiale :

$$t \mapsto t, \quad x \mapsto x + \delta x, \quad u \mapsto u,$$

où C^x est donné par la théorème de Noether :

$$C_1^x = -u_x \frac{\partial L}{\partial u_t}, \quad C_2^x = L - u_x \frac{\partial L}{\partial u_x},$$

Cela permet ainsi de comprendre pourquoi les équations (2.52) et (2.53) correspondent respectivement aux lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement.

2.5.2.1 Intégrateur variationnel

On formule un intégrateur variationnel pour l'équation (2.49). On s'attend à ce qu'il prenne en compte les équations de conservation (2.52) et (2.53). En prenant comme approximation de l'action lagrangienne :

$$\mathcal{L} \simeq \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=0}^{M-1} (t^{n+1} - t^n) (x_{i+1}^n - x_i^n) L_d$$

où L_d est une discrétisation en différences finies du Lagrangien (2.51) :

$$L_d = -\frac{1}{2} \left(\left(\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{t^{n+1} - t^n} \right)^2 - \left(\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{x_{i+1}^n - x_i^n} \right)^2 \right)$$

D'après les équations (2.46), (2.47) et (2.48), associées respectivement aux variations par rapport à δu_i^n , δt^n et δx_i^n , l'intégrateur variationnel pour l'équation des ondes s'écrit :

$$0 = (t^{n+1} - t^n) \left(\frac{(u_{i+1}^n - u_i^n)}{x_{i+1}^n - x_i^n} - \frac{(u_i^n - u_{i-1}^n)}{x_i^n - x_{i-1}^n} \right) \quad (2.58)$$

$$- (u_i^{n+1} - u_i^n) \frac{x_{i+1}^n - x_i^n}{t^{n+1} - t^n} + (u_i^n - u_i^{n-1}) \frac{x_{i+1}^{n-1} - x_i^{n-1}}{t^n - t^{n-1}}$$

$$0 = \left(\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{t^{n+1} - t^n} \right)^2 (x_{i+1}^n - x_i^n) - \left(\frac{u_i^n - u_i^{n-1}}{t^n - t^{n-1}} \right)^2 (x_{i+1}^{n-1} - x_i^{n-1}) \quad (2.59)$$

$$+ \left(\frac{(u_{i+1}^n - u_i^n)^2}{x_{i+1}^n - x_i^n} \right) - \left(\frac{(u_{i+1}^{n-1} - u_i^{n-1})^2}{x_{i+1}^{n-1} - x_i^{n-1}} \right)$$

$$0 = \left(\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{t^{n+1} - t^n} \right)^2 - \left(\frac{u_{i-1}^{n+1} - u_{i-1}^n}{t^{n+1} - t^n} \right)^2 + \left(\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{x_{i+1}^n - x_i^n} \right)^2 - \left(\frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{x_i^n - x_{i-1}^n} \right)^2 \quad (2.60)$$

2.6 EDP d'évolution

Lorsque l'équation aux dérivées partielles ne dérive pas d'un Lagrangien, il est possible de lui associer une équation duale de sorte à ce que le système dérive d'un bilagrangien. Les équations d'Euler-Lagrange obtenues à partir des variations de la variable duale correspondent alors à l'EDP étudiée. Il est ainsi possible de construire un intégrateur variationnel à partir d'une formulation discrète du principe variationnel à partir du bilagrangien. Cependant, l'expression du bilagrangien n'est pas unique.

2.6.1 Bilagrangien

La construction d'un bilagrangien peut s'établir grâce à la définition de l'équation adjointe. Ibragimov en donne une définition formelle [71] [70] :

Définition 2.6.1 (Équation adjointe) *Soit un système de N équations aux dérivées partielles d'ordre s :*

$$F_\alpha(x, u, \dots, u_{(s)}) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (2.61)$$

où les variables indépendantes sont $x = (x^1, \dots, x^m)$ et les variables N dépendantes $u = (u^1(x), \dots, u^N(x))$. La différentielle de u d'ordre s est notée par $u_{(s)}$. Le système (2.61) a pour système adjoint les N équations aux dérivées partielles :

$$F_\alpha^*(x, u, v, \dots, u_{(s)}, v_{(s)}) \equiv \frac{\delta}{\delta u^\alpha} \sum_{i=1}^N v^i F_i = 0, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (2.62)$$

où $v = (v^1(x), \dots, v^N(x))$ sont les N variables duales dépendantes, et

$$\frac{\delta}{\delta u^\alpha} = \frac{\partial}{\partial u^\alpha} - \sum_{i=1}^m \frac{D}{Dx^i} \left(\frac{\partial}{\partial u_i^\alpha} \right), \quad \alpha = 1, \dots, N$$

On a noté par $\frac{D}{Dx^i}$ la dérivation totale par rapport à x^i , et $u_i^\alpha = \frac{\partial u^\alpha}{\partial x^i}$.

Dans cette définition, Ibragimov propose implicitement une forme particulière du bilagrangien :

$$L(x, u, v, \dots, u_{(s)}, v_{(s)}) = \sum_{i=1}^n v^i F_i \quad (2.63)$$

dont les équations d'Euler-Lagrange sont les $2N$ équations

$$F_\alpha(x, u, \dots, u_{(s)}) = 0, \quad F_\alpha^*(x, u, v, \dots, u_{(s)}, v_{(s)}) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, N$$

L'expression (2.63) permet de comprendre qu'un bilagrangien $L(x, u, v, \dots, u_{(s)}, v_{(s)})$ est construit grâce à l'ajout d'une variable duale $v(x)$. Alors on peut étendre la définition d'un système adjoint comme étant les N équations aux dérivées partielles telles que

$$\frac{\delta}{\delta u^\alpha} L(x, u, v, \dots, u_{(s)}, v_{(s)}) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (2.64)$$

Les variations de v conduisent aux équations d'Euler-Lagrange ne dépendant uniquement que de la variable primale u . Réciproquement, l'équation adjointe, ne faisant intervenir que la variable duale, est obtenue grâce aux variations de la variable primale. Par ailleurs, on rappelle que deux Lagrangiens donnent les mêmes équations d'Euler-Lagrange dès lors que leur différence s'exprime comme une divergence. Il en est de même pour les bilagrangiens : ils conduisent aux mêmes équations d'Euler-Lagrange si les bilagrangiens sont égaux modulo une divergence dépendant de la variable primale et/ou de la variable duale.

Dans les cas qui vont suivre, on ne considèrera que des bilagrangiens à $(1 + 1)$ variables indépendantes (x, t) , et à une variable dépendante et son adjointe (u, v) . Comme on le verra dans la section suivante, les équations d'Euler-Lagrange s'écrivent alors :

$$\frac{\partial L}{\partial u} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial u_t} - \frac{d}{dx} \frac{\partial L}{\partial u_x} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial v} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial v_t} - \frac{d}{dx} \frac{\partial L}{\partial v_x} = 0,$$

On donne quelques exemples de bilagrangiens pour l'équation de la chaleur et l'équation de Burgers.

2.6.1.1 Bilagrangiens pour l'équation de la chaleur.

Les fonctionnelles :

$$\begin{aligned} L_1(u,v) &= v\left(\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) \\ L_2(u,v) &= \frac{1}{2}\left(v\frac{\partial u}{\partial t} - u\frac{\partial v}{\partial t}\right) + \nu \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} \\ L_3(u,v) &= -u\frac{\partial v}{\partial t} + \nu \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} \end{aligned}$$

ont pour équation d'Euler-Lagrange commune l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Les équations adjointes calculées par (2.62) sont respectivement $F_1^* = 0$, $F_2^* = 0$ et $F_3^* = 0$ où :

$$F_1^* = -\frac{\partial v}{\partial t}, \quad F_2^* = F_3^* = -\left(\frac{\partial v}{\partial t} + \nu \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}\right),$$

2.6.1.2 Bilagrangiens pour l'équation Burgers.

De la même manière, l'équation de Burgers

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

est une équation d'Euler-Lagrange pour les bilagrangiens suivants :

$$\begin{aligned} L_1(u,v) &= v\left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) \\ L_2(u,v) &= -u\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial v}{\partial x} \left(-\frac{1}{2}u^2 + \nu \frac{\partial u}{\partial x}\right) \\ L_3(u,v) &= \frac{1}{2}\left(v\frac{\partial u}{\partial t} - u\frac{\partial v}{\partial t}\right) - \frac{1}{3}u\left(u\frac{\partial v}{\partial x} - v\frac{\partial u}{\partial x}\right) + \nu \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} \end{aligned}$$

Les équations adjointes $F_1^* = 0$, $F_2^* = 0$ et $F_3^* = 0$ sont données par :

$$F_1^* = \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x}, \quad F_2^* = F_3^* = -\left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}\right),$$

Les fonctionnelles bilagrangiennes associées à l'équations de Burgers sont similaires à celles de l'équation de la chaleur, à un facteur de convection près. Les équations adjointes correspondent à l'équation de convection diffusion linéaire.

Remarque 5 (a) On constate au travers de ces exemples que la définition (2.63), illustrée par L_1 , fait conserver au bilagrangien des termes de dérivées du second ordre. Ce qui n'est pas le cas pour les expressions de L_2 et L_3 .

(b) Les bilagrangiens L_2 et L_3 ont mêmes équations d'Euler-Lagrange. Il existe donc un terme s'exprimant comme une divergence qui les différencie.

2.6.2 Équations bi-variationnelles

Les équations bi-variationnelles dérivant d'un bilagrangien sont analogues aux équations variationnelles (2.41), (2.42) et (2.43), dans la mesure où l'on a juste rajouter une variable dépendante.

En effet, l'action bilagrangienne s'écrit :

$$\mathcal{L}(u, v) = \int_M L(x, t, u, u_x, v_x, u_t, v_t) dx \wedge dt$$

En considérant alors une transformation :

$$\begin{aligned} x &\mapsto x + \delta x, & t &\mapsto t + \delta t, \\ u &\mapsto u + \delta u, & u_x &\mapsto u_x + \delta u_x, & u_t &\mapsto u_t + \delta u_t, \\ v &\mapsto v + \delta v, & v_x &\mapsto v_x + \delta v_x, & v_t &\mapsto v_t + \delta v_t, \end{aligned} \quad (2.65)$$

Une variation de l'action se décompose comme :

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{L} &= \int_M \delta L(x, t, u, u_x, v_x, u_t, v_t) dx \wedge dt + \int_M L(t, x, u, u_x, u_t) \delta(dx \wedge dt) \\ &= A' + B' \end{aligned}$$

Le calcul de A' s'obtient grâce à :

$$\delta L = \frac{\partial L}{\partial t} \delta t + \frac{\partial L}{\partial x} \delta x + \frac{\partial L}{\partial u} \delta u + \frac{\partial L}{\partial v} \delta v + \frac{\partial L}{\partial u_t} \delta u_t + \frac{\partial L}{\partial v_t} \delta v_t + \frac{\partial L}{\partial u_x} \delta u_x + \frac{\partial L}{\partial v_x} \delta v_x$$

où δu_x et δu_t sont donnés par les équations (2.35) et (2.36). De manière similaire, on obtient δv_x et δv_t :

$$\delta v_x = \frac{d}{dx} \delta v - v_x \frac{d}{dx} \delta x - v_t \frac{d}{dx} \delta t \quad (2.66)$$

$$\delta v_t = \frac{d}{dt} \delta v - v_t \frac{d}{dt} \delta t - v_x \frac{d}{dt} \delta x \quad (2.67)$$

En utilisant des intégrations par parties pour faire apparaître des termes de bord, la première intégrale s'exprime comme :

$$\begin{aligned} A' &= \int_M \left(\left[\frac{\partial L}{\partial t} + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial u_t} u_t + \frac{\partial L}{\partial v_t} v_t \right) + \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial u_x} u_t + \frac{\partial L}{\partial v_x} v_t \right) \right] \delta t \right. \\ &\quad \left. + \left[\frac{\partial L}{\partial x} + \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial u_x} u_x + \frac{\partial L}{\partial v_x} v_x \right) + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial u_t} u_x + \frac{\partial L}{\partial v_t} v_x \right) \right] \delta x \right. \\ &\quad \left. + \left[\frac{\partial L}{\partial u} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial u_t} - \frac{d}{dx} \frac{\partial L}{\partial u_x} \right] \delta u + \left[\frac{\partial L}{\partial v} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial v_t} - \frac{d}{dx} \frac{\partial L}{\partial v_x} \right] \delta v \right) dx \wedge dt \end{aligned} \quad (2.68)$$

L'expression de la seconde intégrale B' est indentique à l'équation (2.38).

En considérant l'invariance des termes de bord par la transformation, on peut écrire

les équations bi-variationnelles comme :

$$0 = \frac{\partial L}{\partial u} - \frac{d}{dx} \frac{\partial L}{\partial u_x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial u_t} \quad (2.69)$$

$$0 = \frac{\partial L}{\partial v} - \frac{d}{dx} \frac{\partial L}{\partial v_x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial v_t} \quad (2.70)$$

$$0 = \frac{\partial L}{\partial t} + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial u_t} u_t + \frac{\partial L}{\partial v_t} v_t - L \right) + \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial u_x} u_t + \frac{\partial L}{\partial v_x} v_t \right) \quad (2.71)$$

$$0 = \frac{\partial L}{\partial x} + \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial u_x} u_x + \frac{\partial L}{\partial v_x} v_x - L \right) + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial u_t} u_x + \frac{\partial L}{\partial v_t} v_x \right) \quad (2.72)$$

On retrouve les équations d'Euler-Lagrange pour la variable primale u (équ. 2.69) et la variable duale v (équ. 2.70), issues des variations de δv et δu . L'équation portant sur u ne fait pas intervenir directement sa variable duale. Par contre, les équations (2.71) et (2.72) issues des variations de δx et δt , font apparaître une corrélation entre les variables dépendantes.

2.6.2.1 Propriétés

Pour déterminer les lois d'évolution des grandeurs associées aux symétries de l'action bilagrangienne le long des solutions des équations d'Euler-Lagrange (2.69) et (2.70), on suppose encore une fois que les termes de bords ne s'annulent pas lorsqu'on transforme l'action bilagrangienne. L'invariance par symétrie bi-variationnelle est alors équivalente, le long des solutions, à :

$$0 = \frac{d}{dt} \left[\left(L - \frac{\partial L}{\partial u_t} u_t - \frac{\partial L}{\partial v_t} v_t \right) \delta t - \left(\frac{\partial L}{\partial u_t} u_x + \frac{\partial L}{\partial v_t} v_x \right) \delta x + \frac{\partial L}{\partial u_t} \delta u + \frac{\partial L}{\partial v_t} \delta v \right] \quad (2.73)$$

$$+ \frac{d}{dx} \left[\left(L - \frac{\partial L}{\partial u_x} u_x - \frac{\partial L}{\partial v_x} v_x \right) \delta x - \left(\frac{\partial L}{\partial u_x} u_t + \frac{\partial L}{\partial v_x} v_t \right) \delta t + \frac{\partial L}{\partial u_x} \delta u + \frac{\partial L}{\partial v_x} \delta v \right]$$

On obtient ainsi une extension du théorème de Noether, qui associe à chaque transformation sur les variables indépendantes (x, t) et les variables dépendantes (u, v) une loi de conservation se formulant comme la divergence d'un vecteur. Un point à souligner est que cette quantité peut dépendre aussi de la variable duale v , qui a été construite comme solution d'une équation adjointe définie à une divergence près.

2.7 Intégrateurs bi-variationnels

La méthode de construction des intégrateurs bi-variationnels est similaire en tout point à celle des intégrateurs variationnels pour les EDP lagrangiennes. Il est juste

à noter que, comme dans le cas continu, ce sont les variations de la variable discrète duale δv_i^n qui mènent aux équations d'Euler-Lagrange discrètes ne dépendant uniquement que de la variable primale u_i^n ; et réciproquement. Cependant, les équations d'Euler-Lagrange discrètes sont corrélées au travers des variables indépendantes discrètes. De manière analogue aux EDP lagrangiennes, les variations du temps δt^n et de l'espace δx_i^n conduisent à des équations d'évolution locales. Ces équations d'évolution dépendent des variables primale u_i^n et duale v_i^n . Elles permettent en pratique de déterminer la structure du maillage, en donnant l'expression des pas de temps Δt^n et d'espace Δx_i^n . Ce qui a pour conséquence la nécessité d'imposer un maillage adaptatif afin de respecter les lois d'évolutions locales, comme pour les intégrateurs variationnels.

2.7.1 Intégrateurs bi-variationnels

On se restreint au cas particulier considéré à la section précédente, pour lequel l'action lagrangienne est approximée par :

$$\mathcal{L} \simeq \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=0}^{m-1} (t^{n+1} - t^n)(x_{i+1}^n - x_i^n) L_d(\zeta_i^n)$$

où L_d est une discrétisation en différences finies du Lagrangien, pour laquelle les dérivées sont approximées par une méthode de type Euler. Le Lagrangien discret L_d est fonction du point ζ_i^n du motif élémentaire $\zeta_i^n = (\vartheta_i^n, \vartheta_i^{n+1}, \vartheta_{i+1}^n)$, où on note un point du maillage par :

$$\vartheta_i^n = (t^n, x_i^n, u_i^n, v_i^n)$$

D'autre part, on considère une transformation agissant sur les variables discrètes :

$$\vartheta_i^n = (t^n, x_i^n, u_i^n, v_i^n) \longmapsto \vartheta_i^n + \delta \vartheta_i^n = (t^n + \delta t^n, x_i^n + \delta x_i^n, u_i^n + \delta u_i^n, v_i^n + \delta v_i^n)$$

où $\delta \vartheta_i^n = (\delta t^n, \delta x_i^n, \delta u_i^n, \delta v_i^n)$ représente un déplacement infinitésimal.

On calcule alors une variation infinitésimale par rapport à cette transformation :

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{L} &= \delta \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=0}^{m-1} (t^{n+1} - t^n)(x_{i+1}^n - x_i^n) L_d(\zeta_i^n) \\ &= A'_d + B'_d + C'_d \end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned}
A'_d &= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=0}^{m-1} (\delta t^{n+1} - \delta t^n) (x_{i+1}^n - x_i^n) L_d(\zeta_i^n) \\
B'_d &= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=0}^{m-1} (t^{n+1} - t^n) (\delta x_{i+1}^n - \delta x_i^n) L_d(\zeta_i^n) \\
C'_d &= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=0}^{m-1} (t^{n+1} - t^n) (x_{i+1}^n - x_i^n) \delta L_d(\zeta_i^n)
\end{aligned}$$

où le terme C'_d contient les variations par rapport à la variable duale :

$$\begin{aligned}
\delta L_d(\zeta_i^n) &= \frac{\partial L_d}{\partial t^n}(\zeta_i^n) \delta t^n + \frac{\partial L_d}{\partial t^{n+1}}(\zeta_i^n) \delta t^{n+1} + \frac{\partial L_d}{\partial x_i^n}(\zeta_i^n) \delta x_i^n + \frac{\partial L_d}{\partial x_{i+1}^n}(\zeta_i^n) \delta x_{i+1}^n \\
&+ \frac{\partial L_d}{\partial u_i^n}(\zeta_i^n) \delta u_i^n + \frac{\partial L_d}{\partial u_i^{n+1}}(\zeta_i^n) \delta u_i^{n+1} + \frac{\partial L_d}{\partial u_{i+1}^n}(\zeta_i^n) \delta u_{i+1}^n \\
&+ \frac{\partial L_d}{\partial v_i^n}(\zeta_i^n) \delta v_i^n + \frac{\partial L_d}{\partial v_i^{n+1}}(\zeta_i^n) \delta v_i^{n+1} + \frac{\partial L_d}{\partial v_{i+1}^n}(\zeta_i^n) \delta v_{i+1}^n
\end{aligned}$$

Finalement, l'intégrateur bi-variationnel est composé du système d'équations suivant, pour tout $1 \leq n \leq N-1$ et $1 \leq i \leq m-1$:

$$\begin{aligned}
0 &= (t^n - t^{n-1})(x_{i+1}^n - x_i^n) \frac{\partial L_d}{\partial u_i^n}(\zeta_i^{n-1}) + (t^{n+1} - t^n)(x_i^n - x_{i-1}^n) \frac{\partial L_d}{\partial u_i^n}(\zeta_{i-1}^n) \\
&+ (t^{n+1} - t^n)(x_{i+1}^n - x_i^n) \frac{\partial L_d}{\partial u_i^n}(\zeta_i^n) \quad (2.74)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
0 &= (t^n - t^{n-1})(x_{i+1}^n - x_i^n) \frac{\partial L_d}{\partial v_i^n}(\zeta_i^{n-1}) + (t^{n+1} - t^n)(x_i^n - x_{i-1}^n) \frac{\partial L_d}{\partial v_i^n}(\zeta_{i-1}^n) \\
&+ (t^{n+1} - t^n)(x_{i+1}^n - x_i^n) \frac{\partial L_d}{\partial v_i^n}(\zeta_i^n) \quad (2.75)
\end{aligned}$$

$$0 = (t^n - t^{n-1}) \frac{\partial L_d}{\partial t^n}(\zeta_i^{n-1}) + (t^{n+1} - t^n) \frac{\partial L_d}{\partial t^n}(\zeta_i^n) + L_d(\zeta_i^{n-1}) - L_d(\zeta_i^n) \quad (2.76)$$

$$0 = (x_i^n - x_{i-1}^n) \frac{\partial L_d}{\partial x_i^n}(\zeta_{i-1}^n) + (x_{i+1}^n - x_i^n) \frac{\partial L_d}{\partial x_i^n}(\zeta_i^n) + L_d(\zeta_{i-1}^n) - L_d(\zeta_i^n) \quad (2.77)$$

Ce système d'équations est appelé système d'équations variationnelles discrètes. L'équation (2.74) correspond à l'équation d'Euler-Lagrange obtenue d'après les variations de δu_i^n , et l'équation (2.75) correspond à celle obtenue par les variations de δv_i^n . Les équations (2.76) et (2.77) correspondent respectivement aux équations d'évolution locale de l'énergie et de la quantité de mouvement, obtenues par les variations respectives de δt^n et δx_i^n .

2.7.2 L'équation de la chaleur

On propose d'illustrer la construction d'un intégrateur bi-variationnel sur l'exemple de l'équation de la chaleur. On part du bilagrangien :

$$L(u,v) = \frac{1}{2} \left(v \frac{\partial u}{\partial t} - u \frac{\partial v}{\partial t} \right) + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} \quad (2.78)$$

Les équations d'Euler-Lagrange associées sont l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (2.79)$$

et son équation duale :

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = 0 \quad (2.80)$$

Ce bilagrangien est indépendant du temps, et donc il est invariant par translation temporelle :

$$t \mapsto t + \delta t, \quad x \mapsto x, \quad u \mapsto u, \quad v \mapsto v,$$

La quantité conservée associée, d'après l'extension du théorème de Noether (2.73), est le vecteur :

$$\Gamma^t = \left[\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x}, - \left(\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial t} \right) \right]^T \quad (2.81)$$

L'équation de conservation associée, correspondant aussi à l'équation (2.71), est :

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \left(- \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial t} \right) \\ &= \frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{\partial v}{\partial t} \end{aligned} \quad (2.82)$$

De manière analogue, la quantité conservée le long des solutions des équations (2.79) et (2.80) et qui est associée à l'invariance du bilagrangien par translation spatiale :

$$t \mapsto t, \quad x \mapsto x + \delta x, \quad u \mapsto u, \quad v \mapsto v,$$

est le vecteur :

$$\Gamma^x = \left[- \frac{1}{2} \left(v \frac{\partial u}{\partial x} - u \frac{\partial v}{\partial x} \right), \frac{1}{2} \left(v \frac{\partial u}{\partial t} - u \frac{\partial v}{\partial t} \right) - \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} \right]^T \quad (2.83)$$

L'équation variationnelle associée, correspondante à (2.72), est :

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \left(v \frac{\partial u}{\partial x} - u \frac{\partial v}{\partial x} \right) - \frac{d}{dx} \left(v \frac{\partial u}{\partial t} - u \frac{\partial v}{\partial t} \right) \\ &= \frac{\partial v}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) - \frac{\partial u}{\partial x} \left(\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right) \end{aligned} \quad (2.84)$$

2.7.2.1 Intégrateur bi-variationnel

L'action lagrangienne associée au bilagrangien (2.78) est :

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(u,v) &= \int_{\mathcal{X}} \frac{1}{2} \left(v \frac{\partial u}{\partial t} - u \frac{\partial v}{\partial t} \right) + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} dt \wedge dx \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=0}^{m-1} \underbrace{\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_i^n}^{x_{i+1}^n} \frac{1}{2} \left(v \frac{\partial u}{\partial t} - u \frac{\partial v}{\partial t} \right) + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} dt \wedge dx}_{\mathcal{L}_i^n}\end{aligned}$$

où \mathcal{X} est un domaine dans l'espace des variables indépendantes X , et les subdivisions $\{t^n\}_{n=0,\dots,N}$ et $\{x_i^n\}_{i=0,\dots,m}$ forment une discrétisation X_d de \mathcal{X} .

On approxime chaque \mathcal{L}_i^n sur un élément triangulaire inférieure $\zeta_i^n = (\vartheta_i^n, \vartheta_i^{n+2}, \vartheta_{i+1}^n)$ de X_d , où $\vartheta_i^n = (t^n, x_i^n, u_i^n, v_i^n)$, par une méthode de quadrature d'ordre 1 :

$$\mathcal{L}_i^n = (t^{n+1} - t^n)(x_{i+1}^n - x_i^n)L$$

En discrétisant les termes de dérivation du bilagrangien par une méthode de type Euler en différences finies :

$$L_d = \frac{1}{2} \left[v_i^n \left(\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{t^{n+1} - t^n} \right) - u_i^n \left(\frac{v_i^{n+1} - v_i^n}{t^{n+1} - t^n} \right) \right] + \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{x_{i+1}^n - x_i^n} \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{x_{i+1}^n - x_i^n} \quad (2.85)$$

L'action discrète ainsi obtenue a pour expression :

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_d &= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{i=0}^{m-1} (t^{n+1} - t^n)(x_{i+1}^n - x_i^n) \\ &\quad \left(\frac{1}{2} \left[v_i^n \left(\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{t^{n+1} - t^n} \right) - u_i^n \left(\frac{v_i^{n+1} - v_i^n}{t^{n+1} - t^n} \right) \right] + \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{x_{i+1}^n - x_i^n} \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{x_{i+1}^n - x_i^n} \right) \quad (2.86)\end{aligned}$$

À partir de là, on calcul l'intégrateur bi-variationnel dont chacune des équations est associée à la variation d'une variable discrète :

– La variation de δt^n donne l'équation d'évolution locale de l'énergie :

$$0 = \frac{(u_{i+1}^{n-1} - u_i^{n-1})(v_{i+1}^{n-1} - v_i^{n-1})}{(x_{i+1}^{n-1} - x_i^{n-1})^2} - \frac{(u_{i+1}^n - u_i^n)(v_{i+1}^n - v_i^n)}{(x_{i+1}^n - x_i^n)^2} \quad (2.87)$$

– La variation de δx_i^n conduit à l'équation d'évolution locale de la quantité de mouvement :

$$\begin{aligned}0 &= \frac{(u_i^n - u_{i-1}^n)(v_i^n - v_{i-1}^n)}{(x_i^n - x_{i-1}^n)^2} - \frac{(u_{i+1}^n - u_i^n)(v_{i+1}^n - v_i^n)}{(x_{i+1}^n - x_i^n)^2} \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(\frac{v_{i-1}^n u_{i-1}^{n+1} - u_{i-1}^n v_{i-1}^{n+1} - v_i^n u_i^{n+1} + v_i^{n+1} u_i^n}{t^{n+1} - t^n} \right) \quad (2.88)\end{aligned}$$

- La variation de δv_i^n conduit à l'équation d'Euler-Lagrange en la variable primale discrète :

$$0 = \frac{u_i^{n+1}(x_{i+1}^n - x_i^n) - u_i^{n-1}(x_{i+1}^{n-1} - x_i^{n-1})}{2(t^{n+1} - t^n)} + \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{x_i^n - x_{i-1}^n} - \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{x_{i+1}^n - x_i^n} \quad (2.89)$$

- De même, la variation de δu_i^n conduit à l'équation d'Euler-Lagrange en la variable duale discrète :

$$0 = \frac{v_i^{n+1}(x_{i+1}^n - x_i^n) - v_i^{n-1}(x_{i+1}^{n-1} - x_i^{n-1})}{2(t^{n+1} - t^n)} - \frac{v_i^n - v_{i-1}^n}{x_i^n - x_{i-1}^n} + \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{x_{i+1}^n - x_i^n} \quad (2.90)$$

Les équations variationnelles discrètes correspondent à une discrétisation du système suivant :

$$0 = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (2.91)$$

$$0 = \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{2} \left(v \frac{\partial u}{\partial t} - u \frac{\partial v}{\partial t} \right) - \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (2.92)$$

$$0 = \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2.93)$$

$$0 = \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2.94)$$

Ainsi, l'expression du bilagrangien discret ne conduit pas à une discrétisation des équations variationnelles.

2.8 Commentaires

Dans ce chapitre, on a présenté les intégrateurs variationnels pour les systèmes différentiels dérivant d'un Lagrangien. Le procédé de construction de ces intégrateurs s'établit naturellement comme une version discrète du calcul des variations permettant d'obtenir les lois de conservation (Théorème de Noether 2.2.1). De tels intégrateurs sont par construction symplectiques et conservent exactement une loi d'évolution discrète. Cependant, l'exemple élémentaire de l'oscillateur harmonique a révélé la difficulté de mise en oeuvre de la méthode. En effet, le pas de temps $t^{n+1} - t^n$ est calculé grâce aux zéros d'un polynôme de degré 4. On a présenté une extension du calcul des variations aux EDP lagrangiennes. On a alors étendu le Théorème de Noether (2.4.1) aux EDP à une variable fonction de l'espace et du temps. On a aussi introduit la notion de multisymplecticité. Une extension des intégrateurs variationnels aux EDP lagrangiennes est présentée. On a vu que la construction des intégrateurs variationnels multisymplectiques est sensible à l'ajout d'un terme

82 CHAPITRE 2. INTÉGRATEURS VARIATIONNELS

s'écrivant comme une divergence, alors que les équations variationnelles ne le sont pas. Une version hamiltonienne de la multisymplecticité des EDP, ainsi qu'un cas spécifique d'intégrateurs multisymplectique est donné en Annexe A. Cependant, de nombreuses équations de la Mécanique ne dérivent pas d'un Lagrangien. C'est notamment le cas des équations d'évolution. Il est cependant possible de composer un bilagrangien (Définition 2.63) à l'aide d'une variable duale, de sorte à ce que parmi les équations d'Euler-Lagrange se trouve l'équation d'évolution. Les lois de conservation obtenues dépendent néanmoins de la variable duale introduite (équ. 2.73). On peut alors appliquer une procédure de construction d'un intégrateur bi-variationnel, dont les propriétés généralisent celles des intégrateurs variationnels. Cependant là encore, le calcul discret des variations conduit à des équations qui ne sont pas les mêmes dès lors qu'elles découlent de discrétisations de bilagrangiens différents d'une divergence. De plus, la non unicité du bilagrangien et en particulier le choix arbitraire de l'équation adjointe constituent une faiblesse essentielle dans l'efficacité de la méthode.

Ainsi, la tentative d'étendre les propriétés variationnelles à des méthodes associées à des EDP d'évolution rencontre des obstacles importants ; la transposition sur le plan discret des lois de conservation est difficile à établir. Cependant, on a pu constater au travers du théorème de Noether l'importance des symétries pour engendrer ces lois de conservation. Une approche plus en amont pour transporter la physique décrite par une équation est donc de considérer directement le groupe de symétrie de l'équation. Cela fait l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 3

Méthodes invariantes

3.1 Introduction

On a vu dans les chapitres précédents l'importance des propriétés géométriques des équations, de leur structure mathématique et des lois de conservation qui en découlent. Cependant, les équations de la mécanique des fluides ne dérivent en général pas d'un Lagrangien. On ne peut donc pas transposer les mêmes techniques. Le recours à un bi-lagrangien afin de construire des intégrateurs bivariationnels permet de traduire les lois de conservation associées aux symétries bivariationnelles, c'est-à-dire aux symétries de l'action bi-lagrangienne. Or le groupe de symétrie des équations d'Euler-Lagrange est plus fort que celui de l'action associée : il existe des transformations préservant l'ensemble des solutions d'une EDP (bi-)lagrangienne mais qui ne laissent pas l'action (bi-)lagrangienne inchangée. Les propriétés géométriques qui en découlent ne peuvent donc pas être traduites par un calcul variationnel. Cela constitue une limite conceptuelle de l'approche variationnelle. Pour rendre compte de la structure d'une équation quelconque, il faut donc regarder directement son groupe de symétrie. De ces symétries, on peut obtenir des renseignements qualitatifs sur l'ensemble des solutions : (a) l'existence des solutions auto-similaires, c'est-à-dire des solutions qui sont elles-mêmes invariantes sous l'action d'un groupe ; dans certains cas, les solutions auto-similaires peuvent (b) correspondre au comportement asymptotique de solutions issues de conditions initiales arbitraires, ou (c) prédire l'apparition en temps fini de singularités.

Intérêt des symétries en mécanique des fluides. Dans le domaine de la mécanique des fluides, la dynamique tourbillonnaire peut être décrite à partir d'arguments portant sur les symétries. Andreï Kolmogorov (1903-1987) propose un modèle de tur-

bulence construit à partir notamment d'hypothèses d'autosimilarité des solutions [82]. G. Ünal a calculé à partir de symétries de Navier-Stokes des solutions auto-similaires qui vérifieraient la cascade de Kolmogorov [160]. M. Oberlack utilise les symétries des équations de Navier-Stokes pour trouver des nouvelles lois d'échelle [117] ainsi que les lois de parois [119]. Ces lois d'échelle ont été confirmées expérimentalement et par des simulations. Enfin, Grassi *et al.* ont calculé des solutions auto-similaires qui représentent les solutions vortex des équations de Navier-Stokes [53].

Modèle de turbulence LES respectant les symétries. Dans la modélisation de la turbulence, il existe un bon compromis reconnu entre les méthodes directes (*Direct Numerical Simulation*), très gourmandes en ressources informatiques, et les techniques de moyennage des équations (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) qui perdent un bon nombre d'informations physiques. Il s'agit des méthodes se basant sur des modèles de turbulence aux grandes échelles (LES *Large-Eddy Simulation*). Les modèles LES sont composés des équations filtrées et d'un modèle de sous-mailles rendant compte des effets à petites échelles de la turbulence. Mais les modèles de sous-maille ne présentent pas tous les mêmes propriétés. Par exemple, l'invariance galiléenne¹ ainsi que l'indifférence matérielle² sont des symétries importantes des équations de Navier-Stokes, que les modèles de sous-maille doivent respecter. Oberlack [118] a suggéré d'utiliser les symétries pour modéliser la turbulence, en remarquant que les modèles classiques brisent les symétries des équations de Navier-Stokes. D. Razafindralandy et A. Hamdouni ont calculé explicitement une famille de modèle LES respectant ces symétries [127]. Dans la thèse de D. Razafindralandy [126], le gain d'un tel modèle de LES est montré par rapport aux modèles classiques.

Méthodes numériques conservant les symétries. Il apparaît alors nécessaire de prendre en compte les symétries dans les méthodes numériques. L'idée sous-tendant cette approche est de transporter les propriétés géométriques des équations au niveau discret. En effet, on va montrer dans ce chapitre (plus particulièrement dans la section traitant de la consistance en symétrie) que les schémas classiques brisent certaines symétries, et les conséquences que cela induit. Les méthodes invariantes, ou préservant certaines propriétés découlant du groupe de symétrie, sont construites pour capturer les propriétés physiques des solutions contenues dans les symétries, et du même coup pour minimiser les dégradations purement numériques. Le développement des techniques de construction des méthodes géométriques pour les équations aux dérivées partielles est très récent. Les approches sont aussi diverses

¹invariance par translation spatiale rectiligne uniforme du repère d'observation

²invariance des propriétés intrinsèques par changement de repère

qu'elles sont au début de leur développement. Dans un article très récent [32], Dawes compare sur l'équation de la chaleur linéaire deux intégrateurs géométriques avec des méthodes classiques. La première approche géométrique est celle développée par Bakirova et Dorodnitsyn [8] [35]. Elle est basée sur la formulation du schéma en terme des invariants discrets (Annexe B). La seconde approche est celle que l'on a choisi de poursuivre, et qui est présentée dans la suite du présent chapitre. La conclusion de l'étude comparative de Dawes est la suivante : selon la nature de la solution (autosimilaire ou non), les méthodes invariantes ne sont pas systématiquement plus précises, ni même moins coûteuses en temps de calcul. À l'heure actuelle, on ne connaît pas d'intégrateur géométrique dont les performances surpassent celles des méthodes sophistiquées et qui soit suffisamment générique pour pouvoir s'appliquer à n'importe quelle EDP.

Motivation du choix des équations. Notre contribution principale, exposée dans le présent chapitre, traite essentiellement d'équations modèles. On présente un cas d'application originale de schéma invariant avec l'équation de convection-diffusion 1D. Il s'agit d'une équation linéaire instationnaire admettant de la diffusion et de la convection. On traite également de l'équation de Burgers, dans le cas 1D et 2D. Cette équation a été établie par Burgers [18] à l'origine comme un modèle simple de turbulence. Elle décrit deux aspects importants de la turbulence : (a) la distribution énergétique non linéaire sur le spectre d'énergie, (b) l'action de la viscosité sur les régions à petites échelles. L'équation de Burgers est connue pour être une approximation des équations de Navier-Stokes dans le cas où on ne prend pas en compte les effets de la pression ; la vitesse du fluide est découplée de sa densité : il apparaît alors des ondes de choc. On rappelle ici brièvement quelques aspects qualitatifs de la turbulence décrite par l'équation de Burgers, inspiré des remarques de Girimaji *et al.* [48] :

Pour une suite périodique de chocs la vitesse V de saut à travers le choc est fonction de la vitesse moyenne du champ u_m et de l'énergie cinétique K :

$$V = \sqrt{12K} = \sqrt{6}u_m$$

L'échelle caractéristique du choc d est de l'ordre de

$$d \equiv \frac{4\nu}{V}$$

La structure du choc peut être exprimée en fonction de V et de la longueur caractéristique de séparation de chocs L . Alors la dissipation apparaît au sein de ces chocs visqueux, dont l'échelle la plus petite correspond à celle de l'épaisseur du choc d . Le taux de dissipation de l'énergie cinétique est donné par la formule :

$$\epsilon = \frac{V^3}{24L}$$

et l'énergie spectrale s'exprime par :

$$E(k) = \frac{2\nu^2\pi}{L} \exp\left(-\frac{\pi\nu}{V}k\right)$$

Ainsi, tout comme la turbulence décrite par les équations de Navier-Stokes, le taux de dissipation de l'énergie cinétique ϵ , issue du modèle de turbulence de Burgers, est indépendant de la viscosité ν . Par contre, les petites structures dépendent de paramètres de grandes échelles V et L .

Ce chapitre se décompose comme suit :

Dans un premier temps, on rappelle quelques définitions fondamentales en posant le formalisme mathématique utile pour la suite de l'exposé. On introduit notamment l'espace des jets, qui est une généralisation de l'espace des phases des systèmes hamiltoniens. On peut alors définir un groupe de symétrie d'une équation, ses générateurs infinitésimaux, et invariants associés. On rappelle ensuite quelques méthodes d'investigation associées aux symétries. Ensuite on présente une méthode d'intégration géométrique, dite *d'invariantisation*. Elle a été introduite par Olver *et al.* [42], [43]. Il s'agit d'une méthode de construction de schémas invariants à partir d'une formulation moderne des *repères mobiles* de Cartan. Cette technique permet de rendre invariant n'importe quel schéma numérique donné tout en conservant la consistance [79]. De plus elle s'intègre dans un formalisme géométrique rigoureux. La pierre angulaire de la méthode réside dans la construction du repère mobile. On propose dans ce mémoire une méthode originale de construction des repères mobiles afin de conserver le même ordre de consistance que le schéma d'origine, et s'appuyant sur des arguments numériques. En effet, la construction proposée dans la littérature des repères mobiles [79], [80], [122] est basée sur la méthode de normalisation de Cartan, faisant intervenir des sections transverses aux orbites d'une solution. Cependant, le choix des sections transverses restent relativement arbitraire et peut amener à construire un schéma invariant n'ayant pas de bonnes propriétés numériques.

Enfin, au vu des résultats obtenus, des qualités des schémas classiques et des propriétés numériques des schémas invariants, grâce au formalisme géométrique, on propose d'établir la notion nouvelle de *consistance en symétrie* des méthodes numériques. Celle-ci permet de se rendre compte des erreurs numériques provenant de la capacité d'un schéma à traduire les invariants d'une équation. Un schéma invariant ne présente donc aucun défaut de symétrie.

3.2 Cadre mathématique

On présente le cadre naturel pour traduire les propriétés géométriques intrinsèques des systèmes d'équations aux dérivées partielles (EDP). On définit un groupe de symétrie pour une équation et on rappelle notamment ce que sont les invariants associés, ainsi que le principe de réduction qu'ils permettent de réaliser. De là apparaissent les solutions autosimilaires.

Soit M une variété différentiable de dimension $m = p + q$. Les coordonnées locales de M sont notées $\mathbf{x} = (x^1, \dots, x^p)$ pour les variables indépendantes, et $\mathbf{u} = (u^1, \dots, u^q)$ pour les variables dépendantes. En notant les dérivées partielles par la multi-indexation

$$u_\mu^\alpha = \frac{\partial u^\alpha}{\partial x^{k_1} \dots \partial x^{k_\mu}}$$

où $\alpha = 1, \dots, q$ et le multi-indice $|\mu| \leq n$, on note par $(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{u}}^{(n)}) = (\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{u}^{(1)}, \dots, \mathbf{u}^{(n)})$ les coordonnées locales du fibré des jets J^n d'ordre n . Alors les solutions d'un système régulier de s équations aux dérivées partielles $F_k(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}^{(n)}) = 0$, $k = 1, \dots, s$ est une sous-variété de cet espace des jets :

$$\mathcal{S}_F = \{F_k(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{u}}^{(n)}) = 0\} \subset J^n$$

Rappelons qu'un système d'EDP $\{F_k(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}^{(n)}) = 0\}$ est régulier si sa matrice Jacobienne par rapport aux variables indépendantes est de rang maximal s .

Définition 3.2.1 (Groupe de symétrie) Soit G un groupe de Lie connexe agissant sur une variété M telle que :

$$G : (\mathbf{x}, \mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}^{(n)}) \mapsto (\widehat{\mathbf{x}}, \widehat{\mathbf{u}}, \dots, \widehat{\mathbf{u}}^{(n)}) \quad (3.1)$$

Soit un système de s équations aux dérivées partielles :

$$F_k(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}^{(n)}) = 0, \quad k = 1, \dots, s \quad (3.2)$$

On dit que G est une symétrie pour (3.2) si $\forall k = 1, \dots, s$:

$$F_k(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}^{(n)}) = 0 \implies F_k(\widehat{\mathbf{x}}, \widehat{\mathbf{u}}, \dots, \widehat{\mathbf{u}}^{(n)}) = 0 \quad (3.3)$$

Cela signifie que G transforme toute solution du système d'équations aux dérivées partielles en une autre solution de ce système. On dit alors que le système d'EDP est invariant par le groupe G .

Un groupe de Lie G est entièrement déterminé par un champ de vecteurs \mathbf{v} correspondant aux générateurs infinitésimaux du groupe. Ces générateurs infinitésimaux appartiennent à l'algèbre de Lie \mathcal{G} de G et s'écrivent chacun sous la forme :

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^p \xi^i(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \frac{\partial}{\partial x^i} + \sum_{\alpha=1}^q \phi_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \frac{\partial}{\partial u^\alpha}$$

Chacun des champs de vecteurs génère un sous-groupe à un paramètre.

L'action de G se prolonge naturellement sur l'espace des jets J^n par prolongement de ses générateurs infinitésimaux :

$$\text{pr}^{(n)} \mathbf{v} = \mathbf{v} + \sum_{\alpha=1}^q \sum_{\mu} \phi_{\alpha}^{\mu}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}^{(n)}) \frac{\partial}{\partial u_{\mu}^{\alpha}}$$

où la seconde somme porte sur les multi-indices $\mu = (k_1, \dots, k_{\mu})$ avec $1 \leq k_{\mu} \leq p$ et $1 \leq \mu \leq n$. La condition pour que G soit une symétrie d'un système régulier d'équations aux dérivées partielles (3.2) devient $\forall k = 1, \dots, s$:

$$F_k = 0 \implies \text{pr}^{(n)} \mathbf{v} \cdot F_k = 0 \quad (3.4)$$

Exemple 3.2.1 (Symétries de l'équation de Burgers) Soit l'équation de Burgers :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3.5)$$

Les générateurs infinitésimaux associés aux symétries de l'équation de Burgers sont :

- Translation spatiale :

$$\mathbf{v}_1 = \frac{\partial}{\partial x}$$

- Translation temporelle :

$$\mathbf{v}_2 = \frac{\partial}{\partial t}$$

- Projection :

$$\mathbf{v}_3 = xt \frac{\partial}{\partial x} + t^2 \frac{\partial}{\partial t} + (x - tu) \frac{\partial}{\partial u}$$

- Transformation d'échelle :

$$\mathbf{v}_4 = x \frac{\partial}{\partial x} + 2t \frac{\partial}{\partial t} - u \frac{\partial}{\partial u}$$

- Transformation galiléenne :

$$\mathbf{v}_5 = t \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial u}$$

Invariants différentiels : Ce sont des fonctions $I : J^n \mapsto \mathbb{R}$ qui sont invariantes par l'action d'un sous groupe du groupe de symétrie G .

Définition 3.2.2 (Invariants différentiels) Soit G un groupe de Lie déterminé par le champ de vecteur infinitésimal \mathbf{v} . Soit $\text{pr}^{(n)} \mathbf{v}$ le prolongement de \mathbf{v} à l'espace des jets J^n . Alors une application $I : J^n \rightarrow \mathbb{R}$ est invariante pour G si

$$\text{pr}^{(n)} \mathbf{v}[I] = 0$$

Exemple 3.2.2 (Les invariants de l'équation de Burgers) *Les invariants différentiels associés à chacune des symétries continues de l'équation de Burgers sont :*

– pour la translation spatio-temporelle :

$$(x, t, u) \longmapsto (x + c\lambda, t + \lambda, u)$$

où λ est le paramètre de transformation et c représente la vitesse.

Les invariants sont :

$$y = x - ct, \quad v = u,$$

– pour la dilatation :

$$(x, t, u) \longmapsto (\lambda x, \lambda^2 t, \lambda u)$$

Les invariants peuvent s'écrire :

$$y = \frac{x}{\sqrt{t}}, \quad v = \frac{u}{x},$$

– pour la projection :

$$(x, t, u) \longmapsto \left(\frac{x}{1 - \lambda t}, \frac{t}{1 - \lambda t}, u(1 - \lambda t) + \lambda x \right)$$

Les invariants peuvent se mettre sous la forme :

$$y = \frac{x}{t}, \quad v = ut - x,$$

– enfin, pour la transformation galiléenne :

$$(x, t, u) \longmapsto (x + \lambda t, t, u + \lambda)$$

Les invariants sont :

$$y = t, \quad v = u - \frac{x}{t},$$

Réduction par symétrie : Les invariants associés à une symétrie permettent de réduire l'ordre d'une EDP. En particulier lorsqu'il s'agit d'une EDP à une variable dépendante u et à deux variables indépendantes (x, t) , la réduction par symétrie permet d'obtenir une équation différentielle ordinaire.

Exemple 3.2.3 (L'équation de Burgers) *Le processus de réduction transformant l'équation de Burgers en une équation différentielle associée à chacune des symétries est :*

- en écrivant les dérivées partielles de u par rapport à x et à t , sous forme des dérivées de v par rapport à y :

$$u_t = -cv_y, \quad u_x = v_y, \quad u_{xx} = v_{yy},$$

Par substitution dans (3.5), on obtient l'équation différentielle réduite pour la translation spatio-temporelle :

$$(v - c)v_y = \nu v_{yy}$$

- De la même manière, les dérivées partielles en fonction de v et y associées à la transformation d'échelle sont :

$$u_t \sqrt{t} = -\frac{y^2}{2} v_y, \quad u_x = v + yv_y, \quad u_{xx} \sqrt{t} = 2v_y + yv_{yy},$$

La substitution dans l'équation de Burgers donne l'ODE réduite :

$$\frac{y^2}{2} v v_y + yv^2 = \nu(2v_y + yv_{yy})$$

- Pour la projection, les dérivées partielles se transforment comme :

$$u_t t^2 = -(v + y + yv_y), \quad u_x t = 1 + \frac{v_y}{t}, \quad u_{xx} t^3 = v_{yy}$$

L'ODE réduite obtenue est semblable à celle obtenue pour la translation spatio-temporelle :

$$v v_y = \nu v_{yy}$$

- Pour la transformation galiléenne, les dérivées partielles en terme des nouvelles coordonnées s'écrivent :

$$u_t = -\frac{x}{y^2} + v_y, \quad u_x = \frac{1}{t}, \quad u_{xx} = 0,$$

L'ODE déduite pour la transformation galiléenne s'écrit :

$$y v_y + v = 0$$

Solutions auto-similaires Rappelons qu'une symétrie est une transformation qui agit sur l'ensemble des solutions d'une équation. Mais qu'une solution particulière n'est en générale pas inchangée lorsqu'elle subit une transformation issue du groupe de symétrie. Lorsque c'est le cas, la solution est dite autosimilaire pour la symétrie considérée. Les solutions auto-similaires sont particulièrement importantes. Elles traduisent notamment le comportement des solutions sur des temps longs. Par exemple, considérons une famille de solutions autosimilaires. Le rajout

des conditions aux limites peut faire que la symétrie soit brisée³ par un élément de la famille. Cependant l'évolution de la solution tend vers une solution auto-similaire lorsque le temps d'intégration est suffisamment long pour que les effets des conditions limites disparaissent. Une autre des importantes caractéristiques des solutions auto-similaires est qu'elles peuvent se calculer directement à partir de la réduction par symétrie d'une EDP.

Exemple 3.2.4 (L'équation de Burgers) *Les solutions autosimilaires pour chacune des symétries de l'équation de Burgers s'obtiennent en résolvant les équations différentielles réduites, puis en effectuant à nouveau la transformation de symétrie dans les coordonnées d'origine.*

– la solution générale pour l'ODE associée à la translation spatio-temporelle est :

$$v(y) = c + K_0\sqrt{2\nu} \tan\left(\frac{K_0(y + K_1)}{\sqrt{2\nu}}\right)$$

où K_0 et K_1 sont des constantes réelles arbitraires.

En appliquant la transformation de symétrie, on obtient les solutions autosimilaires sur le demi-plan $\{t > 0\}$:

$$u(x,t) = c + K_0\sqrt{2\nu} \tan\left(\frac{K_0(x - ct + K_1)}{\sqrt{2\nu}}\right)$$

– de la même manière pour la transformation d'échelle, les solutions de l'ODE réduite est :

$$v(y) = B_0 \exp\left(-2\left(\int f(\eta)d\eta + B_1\right)\right)$$

où f est une solution de l'équation différentielle :

$$\frac{df}{d\eta} = 2\eta f^3(\eta) - \frac{1}{2\nu}(6\nu + \eta)f^2(\eta)$$

– la solution générale pour l'ODE réduite associée à la projection et la même que pour la translation spatio-temporelle, mais à vitesse nulle :

$$v(y) = D_0\sqrt{2\nu} \tan\left(\frac{D_0(y + D_1)}{\sqrt{2\nu}}\right)$$

où D_0 et D_1 sont des constantes réelles arbitraires.

On obtient alors les solutions autosimilaires définies sur le demi plan supérieur :

$$u(x,t) = \frac{1}{t}\left(x + D_0\sqrt{2\nu} \tan\left(\frac{D_0\left(\frac{x}{t} + K_1\right)}{\sqrt{2\nu}}\right)\right)$$

³en effet, une symétrie conserve l'ensemble des solutions \mathcal{S} d'une équation. L'ensemble des solutions de cette équation vérifiant une condition initiale particulière est, par exemple, un sous-ensemble de \mathcal{S} qui n'est pas nécessairement invariant par symétrie

– De même pour l'ODE associée à la transformation galiléenne :

$$v = \frac{A}{y}$$

où A est une constante réelle.

Les solutions autosimilaires s'écrivent :

$$u(x,t) = \frac{x + A}{t} \quad t > 0$$

3.3 Schémas invariants utilisant les repères mobiles

Cette section est consacrée à la construction de méthodes numériques respectant les symétries de Lie et utilisant la méthode des repères mobiles. Ce procédé est appelé *invariantisation* d'un schéma numérique. Il est introduit et détaillé dans les travaux de Olver, Kim *et al.* ([122], [78], [79]). On illustre cette méthode par une application originale à l'équation de convection-diffusion 1D. Deux schémas numériques sont *invariantisés*, puis comparés numériquement avec leur schéma d'origine.

3.3.1 Principe de construction

On rappelle dans cette section les définitions et les résultats nécessaires à la méthode. Afin de donner une définition formelle d'un schéma numérique invariant, on introduit l'espace produit joint $M^{\circ n}$ de M :

$$M^{\circ n} = \{ \mathbf{z} = (z_1, \dots, z_n) \in M^n \mid z_i \neq z_j \quad \text{for } i \neq j \}$$

où $z_j = (x_1^j, \dots, x_m^j, u_1^j, \dots, u_l^j) \in M$.

Définition 3.3.1 (Schéma numérique) Soit $F(z) = 0$ une équation aux dérivées partielles définie sur une variété M . Soit (N, Φ) un couple d'applications sur $M^{\circ n} \times M^{\circ n}$ dans $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^p$. On appelle N une discrétisation de l'équation $F(z) = 0$ d'ordre $O(\Delta x_1^{q_1}, \dots, \Delta x_m^{q_m})$ associée au maillage Φ si

$$N(\mathbf{z}) = O(\Delta x_1^{q_1}, \dots, \Delta x_m^{q_m}), \quad \Phi(\mathbf{z}) = 0,$$

dès lors que $\mathbf{z} = ((x_1^1, u_1^1), \dots, (x_q^1, u_l^1), \dots, (x_1^n, u_1^n), \dots, (x_q^n, u_l^n))$ appartient au graphe d'une solution exacte de l'équation $F(z) = 0$.

Ainsi un schéma numérique est défini par le noyau de la discrétisation $N(\mathbf{z}) = 0$ et par celui du maillage $\Phi(\mathbf{z}) = 0$.

Dans la suite, on ne considère dans un premier temps que le cas des équations aux dérivées partielles à une dimension d'espace et de temps ($m = 2, l = 1$). On note alors : $z_j = (x^j, t^j, u^j) \in M, j = 1, \dots, n$.

Définition 3.3.2 (Schéma numérique invariant) Soit G un groupe de Lie continue agissant sur une variété M . Soit F une fonction numérique sur M . On dit que F est invariante par l'action de G , ou G -invariante, si :

$$F(z) = F(g \cdot z) \quad \forall g \in G$$

En particulier, en étendant l'action de G sur $M^{\circ n}$, on définit un schéma numérique (N, Φ) G -invariant par :

$$N(\mathbf{z}) = N(g \cdot \mathbf{z}), \quad \Phi(\mathbf{z}) = \Phi(g \cdot \mathbf{z}), \quad \forall g \in G$$

On introduit une notion plus faible d'invariance comme définie par Cicogna *et al.* ([30]) :

Définition 3.3.3 (Schéma numérique symétrique) Soit G un groupe de symétrie agissant sur une variété M . Soit F une fonction numérique sur M . On dit que F est symétrique sous l'action de G , ou G -symétrique, si :

$$F(z) = 0 \Rightarrow F(g \cdot z) = 0 \quad \forall g \in G$$

Comme précédemment, l'extension de l'action de G sur $M^{\circ n}$ permet de définir un schéma numérique (N, Φ) G -symétrique par

$$N(\mathbf{z}) = 0 \Rightarrow N(g \cdot \mathbf{z}) = 0, \quad \Phi(\mathbf{z}) = 0 \Rightarrow \Phi(g \cdot \mathbf{z}) = 0, \quad \forall g \in G$$

Ainsi, un schéma numérique G -invariant est nécessairement G -symétrique, mais la réciproque est bien entendue fautive comme on peut le constater dans l'exemple suivant :

Exemple 3.3.1 (Équation de la chaleur) Considérons l'équation (3.6) :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3.6)$$

La méthode d'Euler explicite sur un maillage régulier et orthogonal en temps et en espace s'écrit :

$$N(\mathbf{z}) = 0, \quad \Phi(\mathbf{z}) = 0$$

où la discrétisation de l'équation de la chaleur est :

$$\begin{aligned} N : M^{\circ n} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{z} &\longmapsto \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{t_j^{n+1} - t_j^n} - \nu \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(x_{j+1}^n - x_j^n)(x_j^n - x_{j-1}^n)} \end{aligned}$$

et le maillage régulier et orthogonal est donné par les zéros de :

$$\begin{aligned}\Phi : M^{\circ n} &\longrightarrow \mathbb{R}^4 \\ \mathbf{z} &\longmapsto (\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3, \Phi_4)\end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned}\Phi_1 &= t_j^{n+1} - 2t_j^n + t_j^{n-1} && \text{régularité temporelle,} \\ \Phi_2 &= t_{j+1}^n - t_j^n && \text{orthogonalité temporelle,} \\ \Phi_3 &= x_{j+1}^n - 2x_j^n + x_{j-1}^n && \text{régularité spatiale} \\ \Phi_4 &= x_j^{n+1} - x_j^n && \text{orthogonalité spatiale,}\end{aligned}$$

Ce schéma est clairement invariant par rapport aux translations spatiale et temporelle. Mais il n'est que symétrique (et non invariant) par rapport à la transformation d'échelle. La projection et la transformation galiléenne sont des symétries brisées par la méthode numérique.

Définition 3.3.4 (Repère mobile) Soit G un groupe de Lie agissant sur une variété M . Alors un repère mobile (à droite) est une application ρ , de M vers G , vérifiant la propriété d'équivariance suivante :

$$\rho(g \cdot z) = \rho(z)g^{-1} \quad \forall g \in G$$

Les repères mobiles n'existent que si l'action de G sur M est régulière et libre. La démonstration de l'existence est détaillée dans les travaux de Fels et Olver [43]. On rappelle qu'un groupe agit librement lorsque pour tout couple de points $(x, y) \in M^2$, il existe au plus un élément du groupe $g \in G$ tel que $g \cdot x = y$ (plus précisément, si x et y appartiennent à la même orbite, alors il existe un unique élément $g \in G$, sinon, il n'en existe aucun). La régularité de l'action signifie d'une part que pour tout point x et y de la variété, l'orbite de x est de même dimension que l'orbite de y , et d'autre part que l'intersection d'un voisinage arbitrairement petit d'un point quelconque avec une de ses orbites est connexe.

Remarque 6 Un exemple simple où il n'existe pas de repère mobile est le suivant : si on considère sur le tore $T = S^1 \times S^1$ la transformation $g_\alpha : x \mapsto x + \alpha$, où α est irrationnel. Alors l'orbite d'un point du tore T est dense dans T . De ce fait, il n'existe pas de voisinage autour d'un point dont l'intersection avec son orbite soit connexe. Du coup, il n'existe pas de repère mobile sur le tore T associé à la translation irrationnelle g_α .

On ne considère par la suite que des espaces et des groupes dont l'action est à la fois libre et régulière.

Le résultat fondamental de construction des schémas invariants est le théorème qui va suivre. Il affirme d'une part qu'il suffit de construire un repère mobile pour obtenir l'invariance du schéma, et d'autre part qu'un schéma invariant ainsi construit reste consistant avec l'équation continue.

Théorème 3.3.1 (Schémas invariants utilisant les repères mobiles [78].) *Soit (N, Φ) un couple d'applications sur $M^{\circ n} \times M^{\circ n}$ qui défini un schéma numérique d'ordre de précision $O(\Delta x_1^{q_1}, \dots, \Delta x_m^{q_m})$ pour l'équation aux dérivées partielles $F(z) = 0$, et G un groupe de symétrie pour cette équation, avec k paramètres réels $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k)$. Alors le couple d'applications $(\tilde{N}, \tilde{\Phi})$ sur $M^{\circ n} \times M^{\circ n}$ construit avec le repère mobile $\rho : M^{\circ n} \mapsto G$ selon*

$$\tilde{N}(\mathbf{z}) = N(\rho(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{z}), \quad \tilde{\Phi}(\mathbf{z}) = \Phi(\rho(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{z}) \quad \forall \mathbf{z} \in M^{\circ n}$$

défini un schéma numérique G -invariant d'ordre de précision $O(\Delta \tilde{x}_1^{q_1}, \dots, \Delta \tilde{x}_m^{q_m})$ pour la même équation aux dérivées partielles $F(z) = 0$.

La démonstration repose sur la propriété d'équivariance du repère mobile [122]. Pour toute transformée $\tilde{f}(\mathbf{z}) = f(\rho(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{z})$ d'une fonction $f(\mathbf{z})$, on a :

$$\begin{aligned} \tilde{f}(g \cdot \mathbf{z}) &= f(\rho(g \cdot \mathbf{z}) \cdot (g \cdot \mathbf{z})) \\ &= f(\rho(\mathbf{z})g^{-1}g \cdot \mathbf{z}) \\ &= f(\rho(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{z}) \\ &= \tilde{f}(\mathbf{z}) \end{aligned}$$

La méthode actuelle de construction des repères mobiles repose sur les relations implicites entre les paramètres du groupe et les sections transverses aux orbites. Ce procédé de construction correspond à la méthode de normalisation de Cartan [22]. Il s'établit en pratique de la manière suivante :

1. On écrit les transformées $(\tilde{z}_1, \dots, \tilde{z}_m)$ des variables (z_1, \dots, z_m) sous l'action du groupe de dimension r et de paramètres de transformation $(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r)$:

$$\begin{cases} \tilde{z}_1 &= \tilde{z}_1(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r, z_1, \dots, z_m) \\ &\vdots \\ \tilde{z}_m &= \tilde{z}_m(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r, z_1, \dots, z_m) \end{cases}$$

2. On choisit les r équations de normalisation qui définissent une section transverse aux orbites :

$$\begin{cases} K_1(z_1, \dots, z_m) &= 0 \\ &\vdots \\ K_r(z_1, \dots, z_m) &= 0 \end{cases}$$

3. On remplace dans ces équations les points (z_1, \dots, z_m) par leur transformée $(\tilde{z}_1, \dots, \tilde{z}_m)$. Cela établit r équations implicites sur les paramètres de transformation $(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r)$, dépendantes des points (z_1, \dots, z_m) :

$$\begin{cases} K_1(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r, z_1, \dots, z_m) = 0 \\ \vdots \\ K_r(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r, z_1, \dots, z_m) = 0 \end{cases}$$

La résolution de ces équations donne l'expression des repères mobiles $(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r)$. Afin d'illustrer les performances d'une telle approche, on considère l'équation de convection-diffusion.

3.3.2 L'équation de convection-diffusion 1D

Considérons le modèle de l'équation de convection-diffusion instationnaire monodimensionnel :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3.7)$$

où (x, t) représentent les variables d'espace et de temps, u le champ de vitesse, ν le coefficient de diffusion et v une vitesse donnée, supposée constante.

Le groupe de symétrie de l'équation (3.7) est décrit par les sous-groupes de transformations à un paramètre réel :

$\mathbf{G}_1 : (x, t, u) \mapsto (x + \varepsilon_1, t, u)$	Translation spatiale
$\mathbf{G}_2 : (x, t, u) \mapsto (x, t + \varepsilon_2, u)$	Translation temporelle
$\mathbf{G}_3 : (x, t, u) \mapsto (x, t, ue^{\varepsilon_3})$	Dilatation
$\mathbf{G}_4 : (x, t, u) \mapsto (x - 2t\nu\varepsilon_4, t, ue^{\varepsilon_4((x-vt)-t\nu\varepsilon_4)})$	Transformation galiléenne
$\mathbf{G}_5 : (x, t, u) \mapsto (xe^{2\nu\varepsilon_5}, te^{4\nu\varepsilon_5}, ue^{-\frac{v}{2\nu}(x(1-e^{2\nu\varepsilon_5})-\frac{vt}{2}(1-e^{4\nu\varepsilon_5}))})$	Dilatation
$\mathbf{G}_6 : (x, t, u) \mapsto \left(\frac{x}{1-4t\nu\varepsilon_6}, \frac{t}{1-4t\nu\varepsilon_6}, u\sqrt{1-4t\nu\varepsilon_6}e^{-\frac{\varepsilon_6(x-vt)^2}{1-4t\nu\varepsilon_6}} \right)$	Transformation projective

On ne considère cependant que l'action suivante :

$$\begin{aligned} (x, t, u) &\mapsto (\bar{x}, \bar{t}, \bar{u}) \\ &= \left(\frac{x + \varepsilon_1}{1 - 4(t + \varepsilon_2)\nu\varepsilon_6}, \frac{t + \varepsilon_2}{1 - 4(t + \varepsilon_2)\nu\varepsilon_6}, u\sqrt{1 - 4(t + \varepsilon_2)\nu\varepsilon_6}e^{-\frac{\varepsilon_6((x+\varepsilon_1)-v(t+\varepsilon_2))^2}{1-4(t+\varepsilon_2)\nu\varepsilon_6}} \right) \end{aligned}$$

Cette transformation correspond à l'action des sous-groupes $\mathbf{G}_6\mathbf{G}_2\mathbf{G}_1$.

3.3.2.1 Invariantisation du schéma FTCS

Pour illustrer l'approche, montrons la procédure de symétrisation pour un schéma centré explicite (FTCS) :

$$u_j^{n+1} = u_j^n - v \frac{t_j^{n+1} - t_j^n}{x_{j+1}^n - x_{j-1}^n} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \nu \frac{t_j^{n+1} - t_j^n}{(x_{j+1}^n - x_j^n)(x_j^n - x_{j-1}^n)} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \quad (3.8)$$

L'action des groupes de translations et de la transformation projective $\mathbf{G}_6 \mathbf{G}_1 \mathbf{G}_2$ sur les variables discrètes s'écrit :

$$\begin{aligned} x_j^n &\longmapsto \bar{x}_j^n = \frac{x_j^n + \varepsilon_1}{1 - 4(t_j^n + \varepsilon_2)\nu\varepsilon_6} \\ t_j^n &\longmapsto \bar{t}_j^n = \frac{t_j^n + \varepsilon_2}{1 - 4(t_j^n + \varepsilon_2)\nu\varepsilon_6} \\ u_j^n &\longmapsto \bar{u}_j^n = u_j^n \sqrt{1 - 4(t_j^n + \varepsilon_2)\nu\varepsilon_6} - \frac{\varepsilon_6((x_j^n + \varepsilon_1) - v(t_j^n + \varepsilon_2))^2}{1 - 4(t_j^n + \varepsilon_2)\nu\varepsilon_6} \end{aligned}$$

Comme expliqué précédemment, le choix des sections permet de déterminer les expressions des repères mobiles. Ces dernières définissent le schéma invariant. Des arguments d'ordre géométrique permettent de choisir les sections. Notamment pour les translations spatiale et temporelle, si l'on veut que la transformation de la variable dépendante discrète u_j^n ne dépende pas de la valeur des variables indépendantes discrètes t_j^n et x_j^n , mais uniquement du pas de temps $\Delta t_j^n = t_j^{n+1} - t_j^n$ et du pas d'espace $\Delta x_j^n = x_{j+1}^n - x_j^n$, il est raisonnable de choisir les sections :

$$\bar{x}_j^n = 0, \quad \bar{t}_j^n = 0,$$

En effet, en procédant ainsi, on assure l'invariance par translation spatiale et temporelle de la transformation sur u_j^n , et du coup, on garantit aussi cette invariance pour tout le schéma.

On continuera à évoquer cet argument pour déterminer les repères mobiles associés aux translations des variables indépendantes.

En partant d'un maillage régulier et orthogonal comme décrit dans l'exemple (3.3.1), et en considérant les repères mobiles :

$$\varepsilon_1 = -x_j^n, \quad \varepsilon_2 = -t_j^n,$$

on obtient alors la transformation du pas d'espace et du pas de temps :

$$\Delta \bar{x} = \Delta x, \quad \Delta \bar{t} = \frac{\Delta t}{1 - 4\nu\varepsilon_6 \Delta t},$$

où $\Delta x = \Delta x_j^n$ et $\Delta t = \Delta t_j^n$ pour tout j et n . Pour ce qui est de u_j^n , on désire minimiser les oscillations qui sont provoquées par des effets purement numérique.

Une oscillation au voisinage d'un point correspond localement à une zone à forte courbure. La courbure en un point étant définie par sa dérivée seconde, c'est celle-ci qui doit être minimisée. On choisit alors la section :

$$\bar{u}_{j+1}^n - 2\bar{u}_j^n + \bar{u}_{j-1}^n = 0$$

On obtient alors les expressions des repères mobiles en exprimant dans chacune des équations des sections les variables transformées en fonction de $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ et ε_6 :

$$\varepsilon_6 = \frac{1}{\Delta x^2} \ln\left(\frac{u_{j+1}^n + u_{j-1}^n}{2u_j^n}\right)$$

Le schéma FTCS devient alors après transformation :

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} = & \frac{e^{\frac{\varepsilon_6 \nu^2 \Delta t^2}{1-4\nu\Delta t\varepsilon_6}}}{\sqrt{1-4\nu\Delta t\varepsilon_6}} \left(u_j^n - \frac{v\Delta t}{2(1-4\nu\Delta t\varepsilon_6)\Delta x} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) e^{-\varepsilon_6 \Delta x^2} \right. \\ & \left. + \frac{\Delta t \nu}{(1-4\nu\Delta t\varepsilon_6)\Delta x^2} ((u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) e^{-\varepsilon_6 \Delta x^2} - 2u_j^n) \right) \end{aligned} \quad (3.9)$$

Le schéma symétrisé obtenu conserve le caractère explicite du schéma classique à partir duquel il a été construit.

3.3.2.2 Résultats numériques

On regarde le comportement de la solution de l'équation de convection-diffusion sur un domaine suffisamment grand, et ayant comme condition initiale :

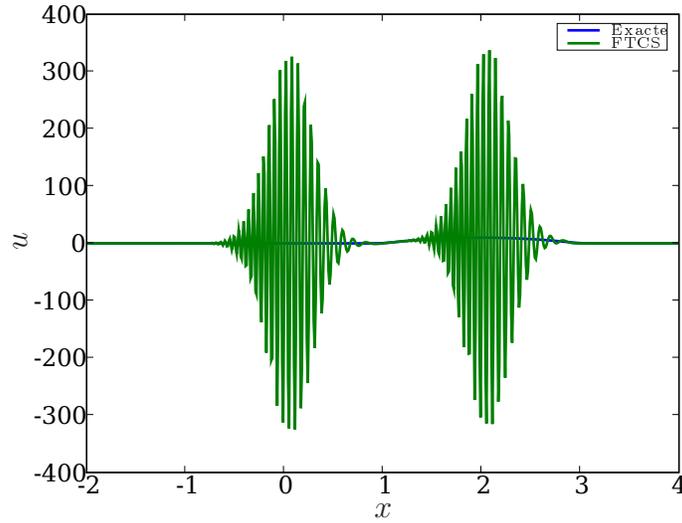
$$u_0(x) = \begin{cases} -10x^2 + 10 & \text{si } |x| \leq 1, \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.10)$$

Classiquement le schéma explicite centré est conditionnellement stable, à la condition $\text{CFL} \leq \frac{2}{\text{Re}_h}$, où $\text{CFL} = \frac{vk}{h}$ et $\text{Re}_h = \frac{vh}{\nu}$. La Fig 3.1 (a), rapporte le résultat de la solution numérique du schéma explicite centré pour $\text{CFL} = 0.4$ et $\text{Re}_h = 10$. On se trouve ainsi placé dans un cas où la condition de stabilité n'est pas vérifiée ; comme on pouvait s'y attendre, ce schéma est instable. Alors que dans les mêmes conditions, le schéma symétrisé (Fig 3.1 (b)) ne présente pas d'instabilités.

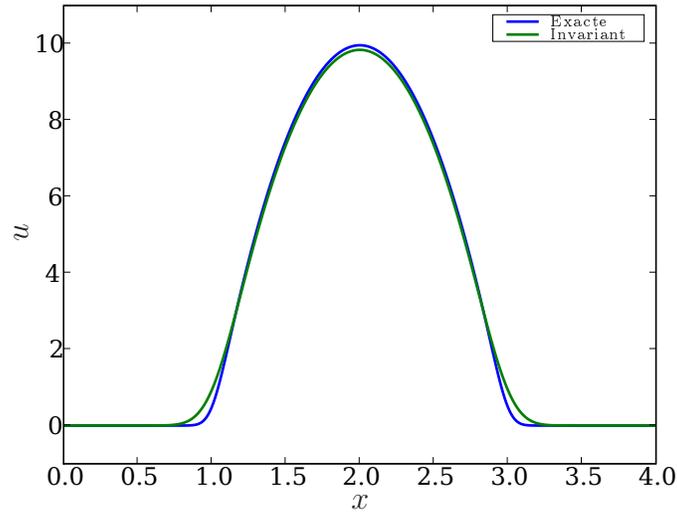
3.3.2.3 Invariantisation du schéma décentré *upwind*

Une technique classique pour rendre plus stable un schéma explicite centré est de décentrer le terme de convection. On obtient ainsi un schéma décentré (*upwind*) :

$$u_i^{n+1} = u_j^n - \frac{v\Delta t}{\Delta x} (u_j^n - u_{j-1}^n) + \frac{\nu\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$$



(a) Schéma FTCS



(b) Schéma FTCS invariant

FIG. 3.1 – Équation de convection-diffusion 1D. *Comportement des solutions numériques.* $T = 2 \text{ sec.}$ $\nu = 10^{-3}$, $v = 1$, $h = 10^{-2}$, $CFL = 0.4$.

Il est reconnu comme plus stable mais présente aussi de la diffusion numérique. De plus, il est d'ordre inférieur (ordre 1) par rapport au schéma FTCS (ordre 2). La procédure d'invariantisation transforme ce schéma :

$$\begin{aligned}
 u_j^{n+1} = & \frac{e^{\frac{\varepsilon_6 \nu^2 \Delta t^2}{1-4\nu\Delta t\varepsilon_6}}}{\sqrt{1-4\nu\Delta t\varepsilon_6}} \left(u_j^n - \frac{v\Delta t}{(1-4\nu\Delta t\varepsilon_6)\Delta x} (u_j^n - u_{j-1}^n e^{-\varepsilon_6 \Delta x^2}) \right) \\
 & + \frac{\Delta t \nu}{(1-4\nu\Delta t\varepsilon_6)\Delta x^2} ((u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) e^{-\varepsilon_6 \Delta x^2} - 2u_j^n) \quad (3.11)
 \end{aligned}$$

où l'on a pris de façon identique au schéma centré, les repères mobiles :

$$\varepsilon_1 = -x_j^n, \quad \varepsilon_2 = -t_j^n, \quad \varepsilon_6 = \frac{1}{\Delta x^2} \ln\left(\frac{u_{j+1}^n + u_{j-1}^n}{2u_j^n}\right),$$

3.3.2.4 Résultats numériques

La Fig. 3.2 illustre la comparaison entre le schéma upwind et sa version invariante pour différentes valeurs du Reynolds de maille Re_h . On constate que le schéma classique diffuse de plus en plus, à mesure que le Re_h croît. Alors que le schéma symétrisé reste toujours très proche de la solution exacte. Sa solution laisse néanmoins apparaître quelques légères oscillations lorsque Re_h augmente. La Fig. 3.3 montre, en fonction de la taille du maillage, l'erreur L^2 par rapport à la solution exacte du schéma upwind et du schéma upwind invariant : les courbes d'erreurs croient de façon identique, alors que le schéma invariant se montre naturellement plus précis. En d'autres termes, le schéma symétrisé est à la fois plus stable que le schéma centré et plus robuste que le schéma upwind (car pour une même précision, le schéma upwind peut nécessiter un maillage 5 fois plus fin). Un pont faible à cette manière de procéder est qu'elle ne garantit aucunement la conservation des propriétés numériques du schéma d'origine : si l'on s'attend à ce qu'il y ait un gain de performances grâce à la symétrisation, il est aussi possible que l'on détruise des propriétés numériques ! En particulier, le théorème de construction 3.3.1 ne précise pas l'ordre du schéma invariant obtenu. La méthode de normalisation de Cartan ne permet pas de contrôler ce paramètre. Ainsi, puisque la construction des schémas invariants n'est pour le moment établi qu'à travers des considérations géométriques, il apparaît naturel d'y ajouter des contraintes purement numériques. C'est l'objet de la section suivante.

3.4 Construction des schémas invariants

Dans la présente section, on expose notre contribution au développement de la méthode d'invariantisation. On rappelle qu'un des inconvénients de la méthode d'invariantisation réside dans le choix du repère mobile. Ce choix conditionne entièrement les qualités numériques du schéma. Il est effectué actuellement de façon ad hoc pour chaque problème. Une partie de mes travaux consiste à établir une procédure de construction des schémas invariants utilisant les repères mobiles, qui soit systématique. Cette méthode originale doit être générique ; c'est-à-dire qu'elle ne doit pas dépendre du problème considéré, tout en garantissant des performances numériques au moins similaires à celles des schémas classiques. Comme exemples d'application, on traite l'équation de Burgers 1D et 2D pour les raisons évoquées

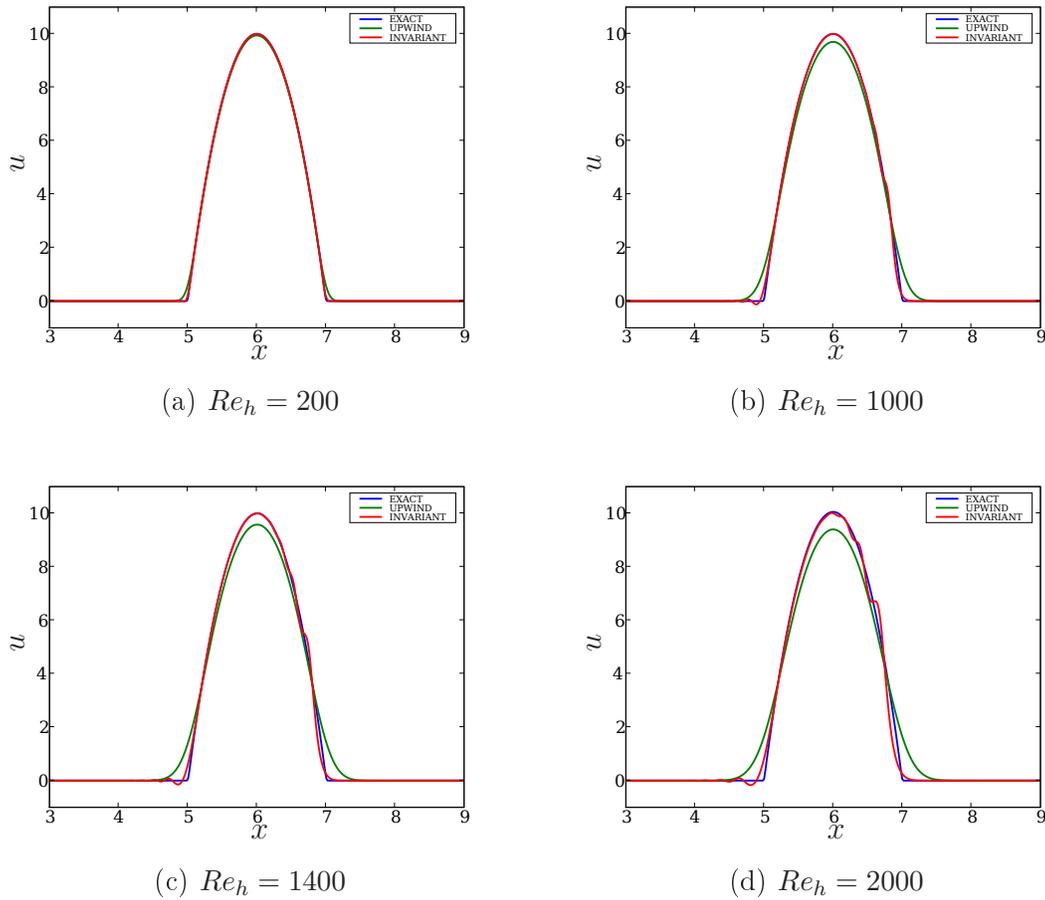


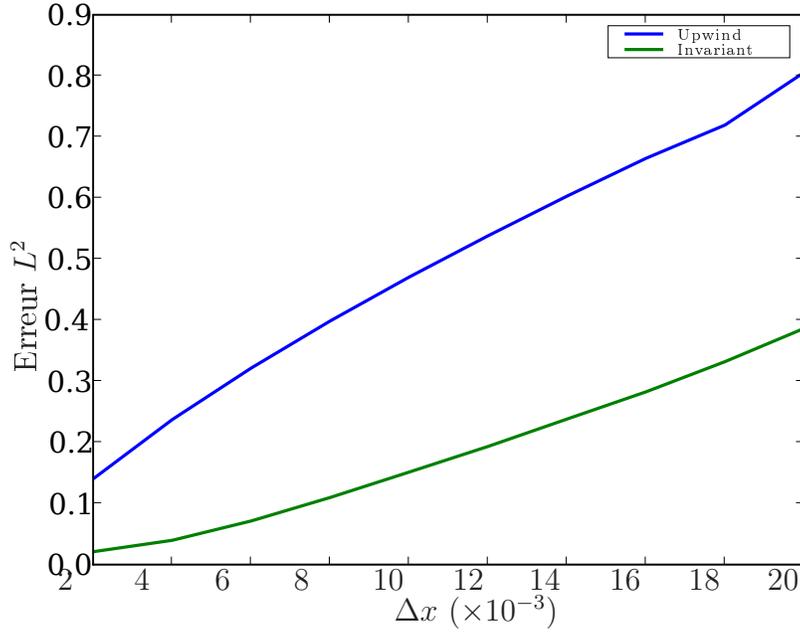
FIG. 3.2 – Équation de convection-diffusion 1D. Comparaison des schémas upwind et upwind invariant. $T=6$. $\nu = 1.10^{-5}$, $v = 1$, $CFL = 1/2$.

en introduction du chapitre. Une partie des résultats obtenus a été publiée dans un travail collaboratif mené par D. Razafindralandy et A. Hamdouni [131].

3.4.1 Principe de construction

Le développement que l'on propose à la méthode d'invariantisation est d'ajouter, lors de la détermination des repères mobiles, une contrainte numérique : à savoir l'ordre de précision du schéma. Le principe de construction peut se formaliser algorithmiquement de la manière suivante :

1. On suppose que l'on a un schéma numérique (N, Φ) dépendant de p variables indépendantes (x_1, \dots, x_p) et q variables dépendantes (u_1, \dots, u_q) ; on note l'ensemble de ces variables $(x_1, \dots, x_p, u_1, \dots, u_q) = (z_1, \dots, z_m)$, avec $p + q = m$. On écrit les transformées $(\tilde{z}_1, \dots, \tilde{z}_m)$ des ces variables sous l'action du groupe de



(a) Schémas upwind et upwind invariant

FIG. 3.3 – Équation de convection-diffusion 1D. Erreur L^2 des schémas upwind et upwind invariant. $T=6$. $\nu = 1.10^{-5}$, $v = 1$, $CFL=1/2$.

dimension r et de paramètres de transformation $(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r)$:

$$\begin{cases} \tilde{z}_1 = \tilde{z}_1(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r, z_1, \dots, z_m) \\ \vdots \\ \tilde{z}_m = \tilde{z}_m(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r, z_1, \dots, z_m) \end{cases}$$

- On détermine les paramètres de transformation de sorte à ce que les $(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r)$ vérifient la propriété d'équivariance, et qu'ils deviennent donc des repères mobiles. Pour cela, on leur suppose une forme algébrique dimensionnellement cohérente, et qui dépende des variables dépendantes :

$$\forall i = 1, \dots, r \quad \varepsilon_i = \sum_{s_i}^S a_{s_i} (x_{s_i})^{k_{s_i}} (u_{s_i})^{l_{s_i}}, \quad a_{s_i} \in \mathbb{R}, \quad k_{s_i}, l_{s_i} \in \mathbb{Z},$$

On obtient alors une famille de r repères mobiles dont les éléments dépendent chacun de S coefficients a_{s_i} . Le nombre S est égal au nombre de variables discrètes que l'on veut inclure dans la discrétisation de (N, Φ) . La propriété d'équivariance porte sur les coefficients a_{s_i} .

- On écrit ensuite le schéma transformé par le groupe à r paramètres :

$$\begin{aligned} N(\tilde{z}_1, \dots, \tilde{z}_m) &= 0 \\ \Phi(\tilde{z}_1, \dots, \tilde{z}_m) &= 0 \end{aligned}$$

Il s'écrit dans le repère d'origine en fonction des paramètres de transformation $(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r)$:

$$\begin{aligned}\tilde{N}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r, z_1, \dots, z_m) &= 0 \\ \tilde{\Phi}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r, z_1, \dots, z_m) &= 0\end{aligned}$$

Il est invariant lorsque l'on exprime les ε_i en fonction des coefficients a_{s_i} .

4. On détermine alors les a_{s_i} de sorte à ce que le schéma invariant soit d'un ordre de précision donnée, grâce à un développement de Taylor.

On détaille les étapes de cet algorithme sur un schéma explicite centré en espace associé à l'équation de Burgers 1D. On étend ensuite les calculs au cas bidimensionnel.

3.4.2 L'équation de Burgers 1D

Considérons l'équation de Burgers 1D :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3.12)$$

Les symétries de cette équation sont les transformations à 1-paramètre réel suivant :

- Translation spatiale :
 $\mathbf{G}_1 : (x, t, u) \mapsto (x + \varepsilon_1, t, u)$
- Translation temporelle :
 $\mathbf{G}_2 : (x, t, u) \mapsto (x, t + \varepsilon_2, u)$
- Projection :
 $\mathbf{G}_3 : (x, t, u) \mapsto \left(\frac{x}{1-\varepsilon_3 t}, \frac{t}{1-\varepsilon_3 t}, u(1 - \varepsilon_3 t) + \varepsilon_3 x\right)$
- Transformation d'échelle :
 $\mathbf{G}_4 : (x, t, u) \mapsto (xe^{\varepsilon_4}, te^{2\varepsilon_4}, ue^{-\varepsilon_4})$
- Transformation galiléenne :
 $\mathbf{G}_5 : (x, t, u) \mapsto (x + \varepsilon_5 t, t, u + \varepsilon_5)$

La plupart des méthodes d'intégration classiques préservent les translations spatiale et temporelle, ainsi que la transformation d'échelle. Ce sont généralement la projection et la transformation galiléenne qui sont brisées.

On s'inspire de la méthode de normalisation pour déterminer les sections transverses associées aux repères mobile temporel et spatial ε_1 et ε_2 . Le choix de la section transverse se justifie, comme pour l'exemple de l'équation de convection-diffusion, par le fait de n'avoir à manipuler que les pas d'espace et de temps ($h = \Delta x, k = \Delta t$), et non les valeurs des variables de temps et d'espace (x_j^n, t_j^n). Pour expliciter les expressions des repères mobiles associés à la projection et à la transformation galiléenne ε_3 et ε_5 , on considère une forme algébrique générale donnée par la propriété d'équivariance, puis on applique des contraintes numériques.

Considérons la transformation $\mathbf{G} = \mathbf{G}_3 \mathbf{G}_5 \mathbf{G}_2 \mathbf{G}_1$, dépendante des paramètres $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ et ε_5 , dont les transformées s'expriment par :

$$\bar{x} = \frac{(x + \varepsilon_1) + \varepsilon_5(t + \varepsilon_2)}{1 - \varepsilon_3(t + \varepsilon_2)} \quad (3.13)$$

$$\bar{t} = \frac{t + \varepsilon_2}{1 - \varepsilon_3(t + \varepsilon_2)} \quad (3.14)$$

et

$$\bar{u} = u(1 - \varepsilon_3(t + \varepsilon_2)) + (x + \varepsilon_1)\varepsilon_3 + \varepsilon_5 \quad (3.15)$$

Remarque 7 Cette transformation prend en compte toutes les symétries de l'équation de Burgers, exceptée la dilatation. On peut vérifier que ces transformations commutent.

Considérons les points d'un stencil :

$$\zeta = (\zeta_j^{n+1}, \zeta_j^n, \zeta_{j+1}^n, \zeta_{j-1}^n)$$

tels que :

$$\zeta_j^{n+1} = (x_j^{n+1}, t_j^{n+1}), \quad \zeta_j^n = (x_j^n, t_j^n), \quad \zeta_{j+1}^n = (x_{j+1}^n, t_{j+1}^n), \quad \zeta_{j-1}^n = (x_{j-1}^n, t_{j-1}^n),$$

La transformée de ζ sous l'action de $g \in \mathbf{G}$ est notée $g \cdot \zeta = \bar{\zeta}$.

Afin de n'avoir que des opérations sur les pas de temps et d'espace plutôt que sur les valeurs des coordonnées, on considère les sections transverses :

$$\bar{x}_j^n = 0, \quad \bar{t}_j^n = 0,$$

Les expressions des repères mobiles⁴ associés aux translations spatiale et temporelle sont :

$$\varepsilon_1 = -x_j^n, \quad \varepsilon_2 = -t_j^n,$$

de sorte que les variables discrètes transformées ($\bar{\zeta}_j^n$) sont exprimées en fonction du pas d'espace $h_j^n = x_{j+1}^n - x_{j-1}^n$ et du pas de temps $k_j^n = t_{j+1}^n - t_j^n$:

⁴suivant la procédure de normalisation de Cartan, le choix des sections transverses permet de calculer les repères mobiles

$$\bar{\zeta}_j^{n+1} = \left(\frac{(x_j^{n+1} - x_j^n) + \varepsilon_5(t_j^{n+1} - t_j^n)}{1 - \varepsilon_3(t_j^{n+1} - t_j^n)}, \frac{t_j^{n+1} - t_j^n}{1 - \varepsilon_3(t_j^{n+1} - t_j^n)} \right)$$

$$\bar{\zeta}_j^n = (0, 0)$$

$$\bar{\zeta}_{j+1}^n = \left(\frac{(x_{j+1}^n - x_j^n) + \varepsilon_5(t_{j+1}^n - t_j^n)}{1 - \varepsilon_3(t_{j+1}^n - t_j^n)}, \frac{t_{j+1}^n - t_j^n}{1 - \varepsilon_3(t_{j+1}^n - t_j^n)} \right)$$

$$\bar{\zeta}_{j-1}^n = \left(\frac{(x_{j-1}^n - x_j^n) + \varepsilon_5(t_{j-1}^n - t_j^n)}{1 - \varepsilon_3(t_{j-1}^n - t_j^n)}, \frac{t_{j-1}^n - t_j^n}{1 - \varepsilon_3(t_{j-1}^n - t_j^n)} \right)$$

3.4.2.1 Transformation du maillage.

Prenons comme maillage initial un maillage régulier et orthogonal :

$$\begin{aligned} x_j^{n+1} - x_j^n &= 0 \\ x_{j+1}^n - 2x_j^n + x_{j-1}^n &= 0 \\ t_{j+1}^n - t_j^n &= 0 \\ t_j^{n+1} - 2t_j^n + t_j^{n-1} &= 0 \end{aligned}$$

Les variables d'espace sont indépendantes du temps, et réciproquement, les variables de temps ne dépendent pas de l'espace. Notons le pas d'espace constant $h = x_{j+1} - x_j$, $\forall j$ et le pas de temps constant $k = t^{n+1} - t^n$, $\forall n$ associés au maillage d'origine. Le maillage transformé sous l'action de g dépend des paramètres de symétrisation ε_3 et ε_5 .

Il reste régulier en espace :

$$\bar{x}_{j+1}^n - 2\bar{x}_j^n + \bar{x}_{j-1}^n = 0$$

On note le pas d'espace transformé par $\bar{h}^n = \bar{x}_{j+1}^n - \bar{x}_j^n$. Pour tout n fixé, on a $\bar{h} = h$. Les couches temporelles restent plates comme pour le maillage original :

$$\bar{t}_{j+1}^n - \bar{t}_j^n = 0$$

Mais le pas de temps $\bar{\tau}_j^n = \bar{t}^{n+1} - \bar{t}^n$ est modifié :

$$\bar{\tau}_j^n = \frac{k}{1 - \varepsilon_3 k}$$

Cette transformation induit une translation $\bar{\sigma}_j^n = \bar{x}_j^{n+1} - \bar{x}_j^n$ de l'axe spatial à chaque incrément de temps :

$$\bar{\sigma}_j^n = \varepsilon_5 \frac{k}{1 - \varepsilon_3 k}$$

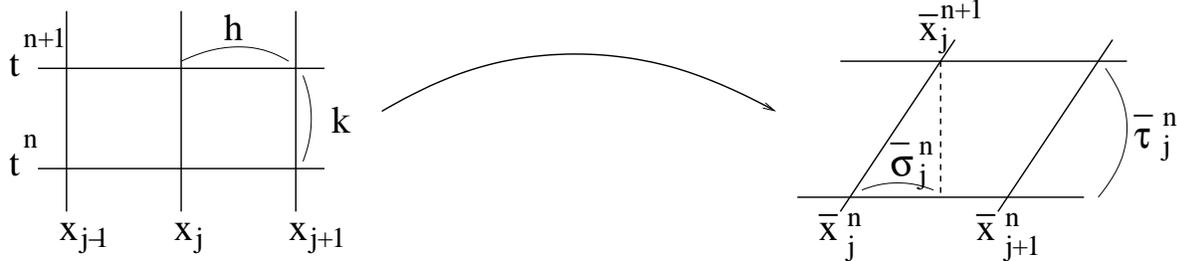


FIG. 3.4 – Équation de Burgers 1D. Translation spatiale du maillage.

Construction des repères mobiles : On note $z = (x_m^l, t_m^l, u_m^l) \in \{(z_j^n, z_{j+1}^n, z_{j-1}^n, \dots)\}$ un point de $M^{\circ n}$ et les applications $\rho_{\mu,\lambda} : M^{\circ n} \longrightarrow G$, où le paramètre μ est associé à la projection et le paramètre λ est associé à la transformation galiléenne :

$$\begin{aligned} \rho_{\mu,\lambda}(z) \cdot z &= \bar{z} \\ &= \left(\frac{(x_m^l + \varepsilon_1) + \lambda(t_m^l + \varepsilon_2)}{1 - \mu(t_m^l + \varepsilon_2)}, \frac{t_m^l + \varepsilon_2}{1 - \mu(t_m^l + \varepsilon_2)}, u_m^l(1 - \mu(t_m^l + \varepsilon_2)) + (x_m^l + \varepsilon_1)\mu + \lambda \right) \end{aligned}$$

avec $\varepsilon_1 = -x_j^n$ et $\varepsilon_2 = -t_j^n$.

La condition d'équivariance pour $\rho_{\mu,\lambda}$ est :

$$\rho_{\mu,\lambda}(z) \cdot z = \rho_{\mu,\lambda}(\bar{z}) \cdot \bar{z} \quad (3.16)$$

Appliqué à ε_3 et ε_5 , le membre de gauche de (3.16) s'écrit sur les points du stencil considéré :

$$\begin{aligned} \rho_{\varepsilon_3, \varepsilon_5}(z_j^n) \cdot z_j^n &= (0, 0, u_j^n + \varepsilon_5) \\ \rho_{\varepsilon_3, \varepsilon_5}(z_j^{n+1}) \cdot z_j^{n+1} &= \left(\frac{x_j^{n+1} - x_j^n + \varepsilon_5 k}{1 - \varepsilon_3 k}, \frac{k}{1 - \varepsilon_3 k}, u_j^{n+1}(1 - \varepsilon_3 k) + \varepsilon_3(x_j^{n+1} - x_j^n) + \varepsilon_5 \right) \\ \rho_{\varepsilon_3, \varepsilon_5}(z_{j\pm 1}^n) \cdot z_{j\pm 1}^n &= (h, 0, u_{j\pm 1}^n \pm \varepsilon_3 h + \varepsilon_5) \end{aligned}$$

et pour le membre de droite :

$$\begin{aligned} \rho_{\varepsilon_3, \varepsilon_5}(\bar{z}_j^n) \cdot \bar{z}_j^n &= (0, 0, u_j^n + (\lambda + \bar{\varepsilon}_5)) \\ \rho_{\varepsilon_3, \varepsilon_5}(\bar{z}_j^{n+1}) \cdot \bar{z}_j^{n+1} &= \left(\frac{x_j^{n+1} - x_j^n + (\lambda + \bar{\varepsilon}_5)k}{1 - (\mu + \bar{\varepsilon}_3)k}, \frac{k}{1 - (\mu + \bar{\varepsilon}_3)k}, \right. \\ &\quad \left. u_j^{n+1}(1 - (\mu + \bar{\varepsilon}_3)k) + (\mu + \bar{\varepsilon}_3)(x_j^{n+1} - x_j^n) + (\lambda + \bar{\varepsilon}_5) \right) \\ \rho_{\varepsilon_3, \varepsilon_5}(\bar{z}_{j\pm 1}^n) \cdot \bar{z}_{j\pm 1}^n &= (h, 0, u_{j\pm 1}^n \pm (\mu + \bar{\varepsilon}_3)h + (\lambda + \bar{\varepsilon}_5)) \end{aligned}$$

De sorte que la condition d'équivariance (3.16) est équivalente à :

$$\bar{\varepsilon}_3 = \varepsilon_3 - \mu, \quad \bar{\varepsilon}_5 = \varepsilon_5 - \lambda, \quad (3.17)$$

Afin de déterminer une famille de repères mobiles permettant de rendre invariant le schéma numérique, on suppose une forme générale pour l'expression de ε_3 .

Comme $[\varepsilon_3] = s^{-1}$, on doit choisir une combinaison des variables discrètes qui soit dimensionnellement cohérente. Si l'on veut garder le caractère explicite du schéma numérique, il ne doit pas y avoir de terme comportant u^{n+1} . D'autre part, pour garder le degré du terme convectif, le paramètre de symétrisation doit être au plus de degré un. Enfin, la construction du repère mobile ε_3 nécessite qu'il n'y ait pas de terme isolé en h ou en k seuls. Supposons la forme algébrique :

$$\varepsilon_3 = \frac{au_{j+1}^n + bu_j^n + cu_{j-1}^n}{h} \quad a, b, c \in \mathbb{R} \quad (3.18)$$

Des arguments similaires pour ε_5 (de dimension $m.s^{-1}$) permettent de supposer la forme générale suivante :

$$\varepsilon_5 = du_{j+1}^n + eu_j^n + fu_{j-1}^n \quad d, e, f \in \mathbb{R} \quad (3.19)$$

Les conditions sur a, b, c et d, e, f telles que (3.18) et (3.19) deviennent des repères mobiles, et vérifient alors (3.17) sont :

$$c - a = 1, \quad a + b + c = 0, \quad d - f = 0, \quad d + e + f = -1, \quad (3.20)$$

Remarque 8 *La détermination des expressions de la famille des repères mobiles associés à l'action d'un groupe donné est, évidemment, indépendante du schéma numérique considéré.*

3.4.2.2 Invariantisation du schéma FTCS.

On part du schéma explicite centré en espace (FTCS) :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{k} + u_j^n \left(\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} \right) = \nu \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2}$$

Construisons un schéma invariant pour la transformation :

$$\bar{u} = u(1 - \varepsilon_3(t + \varepsilon_2)) + (x + \varepsilon_1)\varepsilon_3 + \varepsilon_5 \quad (3.21)$$

Sur les variables discrètes, cela correspond à :

$$\bar{u}_j^{n+1} = u_j^{n+1}(1 - \varepsilon_3(t_j^{n+1} - t_j^n)) + \varepsilon_3(x_j^{n+1} - x_j^n) + \varepsilon_5$$

$$\bar{u}_j^n = u_j^n + \varepsilon_5$$

$$\bar{u}_{j+1}^n = u_{j+1}^n(1 - \varepsilon_3(t_{j+1}^n - t_j^n)) + \varepsilon_3(x_{j+1}^n - x_j^n) + \varepsilon_5$$

$$\bar{u}_{j-1}^n = u_{j-1}^n(1 - \varepsilon_3(t_{j-1}^n - t_j^n)) + \varepsilon_3(x_{j-1}^n - x_j^n) + \varepsilon_5$$

Dans les coordonnées du maillage transformé dont les points associés au stencil du schéma FTCS sont : $\bar{\zeta} = (\bar{\zeta}_j^{n+1}, \bar{\zeta}_j^n, \bar{\zeta}_{j+1}^n, \bar{\zeta}_{j-1}^n)$, le schéma transformé s'écrit :

$$\frac{\bar{u}_j^{n+1} - \bar{u}_j^n}{\bar{\tau}_j^n} + \bar{u}_j^n \left(\frac{\bar{u}_{j+1}^n - \bar{u}_{j-1}^n}{2h} \right) = \nu \frac{\bar{u}_{j+1}^n - 2\bar{u}_j^n + \bar{u}_{j-1}^n}{\bar{h}^2}$$

Ce qui donne dans le maillage d'origine :

$$\begin{aligned} \frac{u_j^{n+1}(1 - \varepsilon_3 k) + \varepsilon_3(x_j^{n+1} - x_j^n) - u_j^n(1 - \varepsilon_3 k)}{k} &+ (u_j^n + \varepsilon_5) \left(\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} + \varepsilon_3 \right) \\ &- \nu \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} = 0 \end{aligned} \quad (3.22)$$

avec $x_j^{n+1} - x_j^n = 0$ car le maillage est orthogonal. Le théorème fondamental 3.3.1 garantit que si ε_3 et ε_5 sont des applications équivariantes pour les actions (3.13), (3.14) et (3.15) alors le schéma transformé (3.22) est un schéma invariant. On explicite dans la suite les expressions de ε_3 et ε_5 afin de rendre le schéma invariant précis à l'ordre $O(k, h^2)$.

Ordre de précision. Un résultat fondamental de la méthode garantit que le processus d'invariantisation préserve la consistance [79]. Cependant l'ordre de consistance peut varier.

Considérons le terme temporel T_t , le terme convectif T_c et le terme diffusif T_d :

$$T_t = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{k}, \quad T_c = u_j^n \left(\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} \right), \quad T_d = \nu \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2},$$

la condition de consistance du schéma invariant est :

$$\bar{T}_t + \bar{T}_c - \bar{T}_d = \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(k^p, h^q) \quad p, q > 0$$

où \bar{T}_t , \bar{T}_c et \bar{T}_d sont les termes transformés invariants temporel, convectif et de diffusion :

$$\begin{aligned} \bar{T}_t &= \frac{1}{k} \left(u_j^{n+1} \left(1 - \frac{au_{j+1}^n + bu_j^n + cu_{j-1}^n}{h} k \right) + \frac{au_{j+1}^n + bu_j^n + cu_{j-1}^n}{h} (x_j^{n+1} - x_j^n) - u_j^n \right) \\ &\quad \left(1 - \frac{au_{j+1}^n + bu_j^n + cu_{j-1}^n}{h} k \right) \end{aligned}$$

$$\bar{T}_c = (u_j^n + du_{j+1}^n + eu_j^n + fu_{j-1}^n) \left(\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} + \frac{au_{j+1}^n + bu_j^n + cu_{j-1}^n}{h} \right)$$

$$\bar{T}_d = \nu \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2}$$

avec les coefficients a, b, c, d, e et f satisfaisant la condition d'équivariance (3.20).

Le développement de Taylor donne :

$$\bar{T}_t + \bar{T}_c - \bar{T}_d = \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - (a + c) \frac{h}{2} u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{dx}{dt} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \dots \right) + O(k, h^2)$$

Afin de conserver le même degré de précision, il est nécessaire d'avoir :

$$a + c = 0$$

Cependant, aucune contrainte n'apparaît sur les coefficients (d, e, f) de ε_5 ; en effet, ε_5 apparaît seulement dans le terme convectif. Or le développement de Taylor de \bar{T}_c indique que :

$$\bar{T}_c = O(h^2)$$

Ce qui signifie que le terme convectif symétrisé est identiquement nul, et ainsi que l'information est convectée par le terme temporel qui agit de façon analogue à une dérivée temporelle lagrangienne.

Le repère mobile associé à la projection est donc déterminé de façon unique :

$$\varepsilon_3 = -\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h}$$

L'expression ε_5 est arbitraire.

Remarque 9 *La section transverse associée à ε_3 est :*

$$\bar{u}_{j+1}^n - \bar{u}_{j-1}^n = 0$$

Le schéma invariant obtenu à partir du schéma classique FTCS s'écrit donc dans le maillage régulier et orthogonal d'origine :

$$0 = \frac{u_j^{n+1}(1 - \varepsilon_3 k) + \varepsilon_3(x_j^{n+1} - x_j^n) - u_j^n}{k}(1 - \varepsilon_3 k) \quad (3.23)$$

$$+ (u_j^n + \varepsilon_5) \left(\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} + \varepsilon_3 \right) - \nu \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2}$$

$$\varepsilon_3 = -\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} \quad (3.24)$$

$$\varepsilon_5 = du_{j+1}^n + eu_j^n + fu_{j-1}^n \quad d, e, f \text{ arbitraires} \quad (3.25)$$

Remarque 10 *Le paramètre de symétrisation associé à la transformation galiléenne ε_5 est arbitraire lorsque le schéma numérique est exprimé dans le maillage d'origine, régulier et orthogonal. Ce n'est plus le cas si le maillage d'origine n'est plus orthogonal, ni lorsque la solution numérique est exprimée dans le repère de référence obtenu après transformation.*

3.4.2.3 Résultats numériques

On illustre les performances de cette approche par des tests significatifs. On montre dans quelle mesure un schéma invariant respecte le principe fondamental

d'invariance galiléenne. On retrouvera ce test dans la dernière section du présent chapitre, lorsque l'on évoquera la consistance en symétrie des schémas. Puis on regarde comment un schéma invariant arrive à capturer les chocs dans le cas d'une très faible viscosité. Enfin, on compare l'approche de symétrisation utilisant les repères mobiles avec celle de semi-invariance introduite par Shokin.

Pseudo-choc. Une des particularités de l'équation de Burgers est qu'elle produit et/ou absorbe les chocs. Les méthodes classiques présentent des oscillations parasites non physiques autour de la zone de fort gradient. On considère alors le même problème que précédemment, dont les conditions de bord et la condition initiale est donnée par la solution exacte :

$$u_{\text{exact}}(x,t) = \frac{\sinh(\frac{x}{2\nu})}{\cosh(\frac{x}{2\nu}) + \exp(-\frac{t}{4\nu})}$$

Le domaine spatial correspond à l'intervalle $[-1; 1]$. L'intervalle de temps est $[1; 2]$. Le pas d'espace est égal au pas de temps $\Delta x = \Delta t = 5 \cdot 10^{-2}$; la viscosité est prise assez faible $\nu = 75 \cdot 10^{-5}$. Ainsi, le Reynolds de maille est porté à $\text{Re}_h = (\frac{1}{15})10^3$, et le CFL vaut 1.

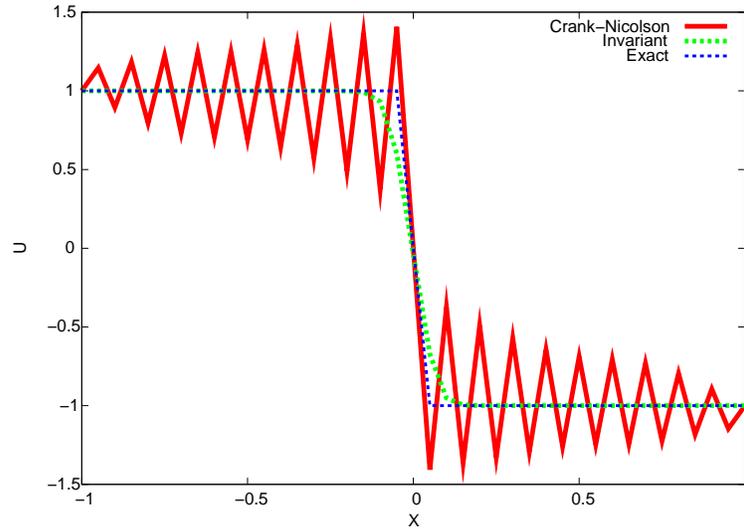
On présente le comportement d'un schéma invariant construit à partir du schéma FTCS . On le compare avec le schéma classique implicite de Crank-Nicolson. Dans la Fig. 3.5, on peut observer le bon comportement du schéma invariant. Même si une légère dissipation apparait au voisinage du choc, sa solution numérique reste proche de la solution exacte. Le gain du processus de symétrisation dans ce cas est d'améliorer la qualité d'un schéma en lui conférant les propriétés d'invariance, tout en conservant le caractère explicite de la méthode.

Invariance galiléenne. Le principe d'invariance galiléenne énonce que le comportement d'un système doit être le même quelque soit le repère à partir duquel il est observé⁵. On regarde dans quelle mesure les schémas invariants respectent ce principe.

On considère un problème dont la condition initiale et les conditions aux limites sont données par la solution exacte suivante :

$$u_{\text{exact}}(x,t) = \frac{\sinh(\frac{x}{2\nu})}{\cosh(\frac{x}{2\nu}) + \exp(-\frac{t}{4\nu})}, \quad \Omega = [0,1], \quad t \geq 0,$$

Pour effectuer la translation galiléenne, on ajoute à chaque instant au repère une vitesse constante λ . Dans le repère d'origine, le pas d'espace est $\Delta x = 2 \cdot 10^{-2}$. Le pas de temps est calculé de sorte à conserver un $CFL = 1/2$. La viscosité est prise à $\nu = 5 \cdot 10^{-3}$. Les Fig. 3.6 (a), 3.6 (b) et 3.6 (c) représentent les profils des solutions



(a) Comportement au voisinage d'un choc

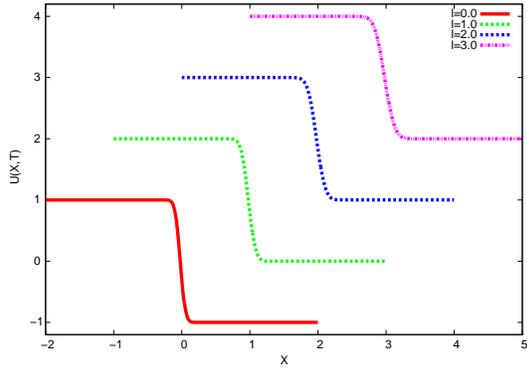
FIG. 3.5 – Équation de Burgers 1D. *Solution exacte, schéma classique implicite de Crank-Nicolson, et schéma explicite invariant. Sur le domaine spatial $[-1; 1]$ pour un intervalle de temps égal à $[1; 2]$. $\Delta x = \Delta t = 5 \cdot 10^{-2}$ et $\nu = 75 \cdot 10^{-5}$.*

numériques des schémas FTCS, Lax-Wendroff et Crank-Nicolson invariantisés. On constate que le profil du schéma FTCS symétrisé varie très faiblement : une dissipation numérique apparaît toutefois avec la vitesse d'entraînement ; elle a pour effet de lisser la courbe au voisinage du choc. La solution ne transporte cependant aucune oscillation parasite, même lorsque $\lambda = 3$. Rappelons que le schéma classique FTCS est complètement dégradé pour $\lambda = 1$. Le schéma symétrisé de Lax-Wendroff ne reproduit pas aussi fidèlement la solution exacte que le schéma classique, même lorsque la vitesse d'entraînement est nulle. Cependant, la solution reste identique pour toutes les valeurs de λ testées. Il en est de même pour le schéma de Crank-Nicolson symétrisé : la solution montre un comportement indépendant du facteur d'entraînement.

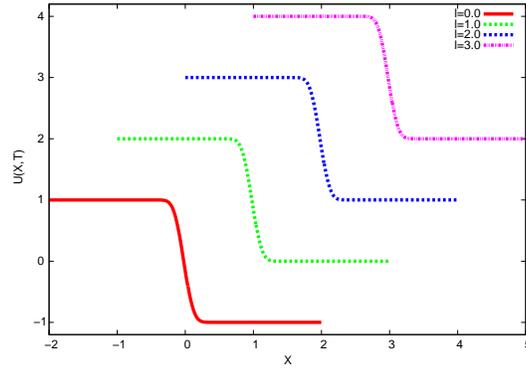
Comparaison avec un schéma semi-invariant. On compare la méthode d'invariantisation et la méthode de semi-invariantisation développée par Y. Shokin [142], et appliquée à l'équation de Burgers par E. Hoarau [58]. Un bref aperçu de la méthode est rappelé en Annexe (B).

Le schéma semi-invariant, comme il a été proposé par E. Hoarau [58], prend la forme

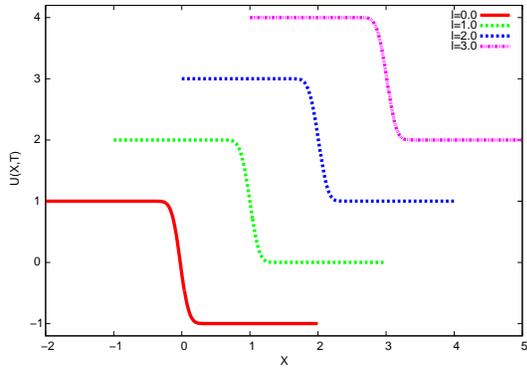
⁵pourvu que les différents repères ne diffèrent que d'une translation rectiligne uniforme



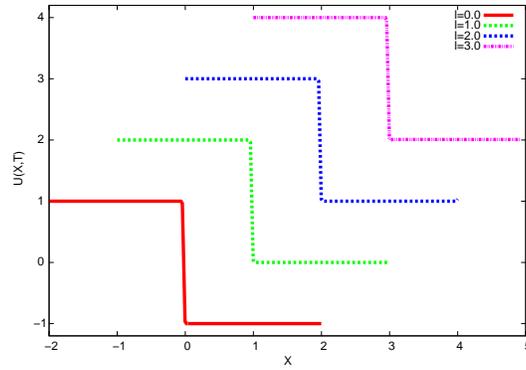
(a) Schéma FTCS invariant



(b) Schéma Lax-Wendroff invariant



(c) Schéma Crank-Nicolson invariant



(d) Solution exacte

FIG. 3.6 – Équation de Burgers 1D. Profils des solutions numériques et de la solution exacte pour différentes vitesses d'entraînement $\lambda = 0$, $\lambda = 1$, $\lambda = 2$ et $\lambda = 3$. $\Delta x = 2 \cdot 10^{-2}$. $\nu = 5 \cdot 10^{-3}$. $CFL=1/2$ référentiel d'origine.

suivante :

$$0 = \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x} A - \nu \frac{1}{\Delta x^2} B - C u_i^n + \frac{\nu \Delta t}{2 \Delta x^2} (D_1 - D_2) + \frac{\nu \Delta t}{2 \Delta x^3} E - \frac{\nu^2 \Delta t}{2 \Delta x^4} F$$

où on a posé :

$$A = -\frac{1}{12} \frac{u_{i+2}^n{}^2}{2} + \frac{2}{3} \frac{u_{i+1}^n{}^2}{2} - \frac{2}{3} \frac{u_{i-1}^n{}^2}{2} + \frac{1}{12} \frac{u_{i-2}^n{}^2}{2}$$

et :

$$\begin{aligned}
B &= -\frac{1}{12}u_{i+2}^n + \frac{4}{3}u_{i+1}^n - \frac{5}{2}u_i^n - \frac{4}{3}u_{i-1}^n - \frac{1}{12}u_{i-2}^n, & C &= \Omega_{i+\frac{1}{2}}^n(u_{i+1}^n - u_i^n) - \Omega_{i-\frac{1}{2}}^n(u_i^n - u_{i-1}^n), \\
D_1 &= \frac{1}{2}u_{i+\frac{1}{2}}^n(u_{i+2}^n - u_{i+1}^n - u_i^n + u_{i-1}^n), & D_2 &= \frac{1}{2}u_{i-\frac{1}{2}}^n(u_{i+1}^n - u_i^n - u_{i-1}^n + u_{i-2}^n), \\
E &= \frac{1}{2}(u_{i+2}^n - 2u_{i+1}^n + 2u_{i-1}^n - u_{i-2}^n), & F &= u_{i+2}^n - 4u_{i+1}^n + 6u_i^n - 4u_{i-1}^n + u_{i-2}^n,
\end{aligned}$$

et Ω_i^n est pris comme une discrétisation de :

$$\Omega = \frac{1}{\Delta x^2} \left(\frac{\Delta t}{2} u^2 - C \right)$$

et en prenant $C = -0.01t(tu - x)^2(u_x)^2$.

Le choix de la constante C , et par suite de Ω , confère au schéma ses qualités numériques. On obtient au final le schéma semi-invariant d'ordre 1 en temps et 2 en espace.

On considère les conditions limites données par la solution exacte suivante :

$$u_{\text{exact}}(x,t) = \frac{\frac{x-2t}{t+0.1}}{1 + \nu^2 \sqrt{t+0.1} \exp\left(\frac{(x-2t)^2}{4\nu(t+0.1)}\right)} + 2, \quad \Omega = [0 : 20], \quad t \in [0.1; 5.2],$$

Les résultats sont présentés sur la Fig. 3.7. Bien que les solutions montrent un comportement globalement comparable, on observe un léger gain de précision venant du schéma complètement invariant ; notamment, la courbe suit plus fidèlement celle de la solution exacte au voisinage des zones à fort gradient.

3.4.3 L'équation de Burgers 2D

Dans cette sous-section, on présente à nouveau en détails la construction d'un schéma invariant utilisant les repères mobiles dans le cas 2D.

On traite le système :

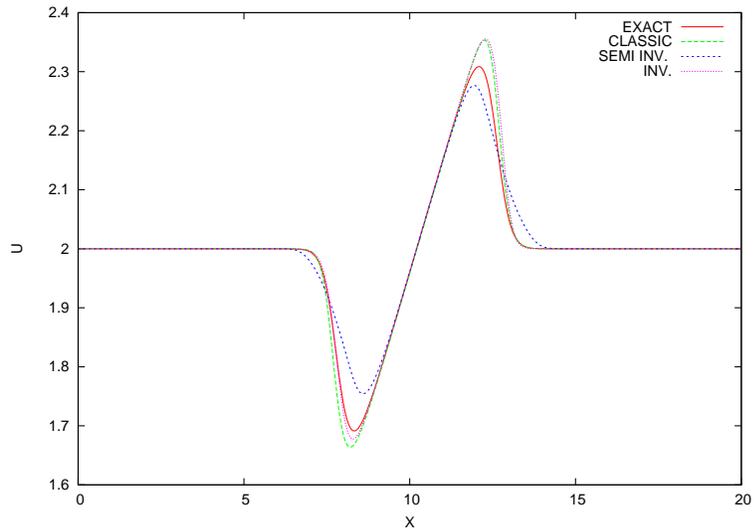
$$u_t + uu_x + vu_y = \nu(u_{xx} + u_{yy}) \quad (3.26)$$

$$v_t + uv_x + vv_y = \nu(v_{xx} + v_{yy}) \quad (3.27)$$

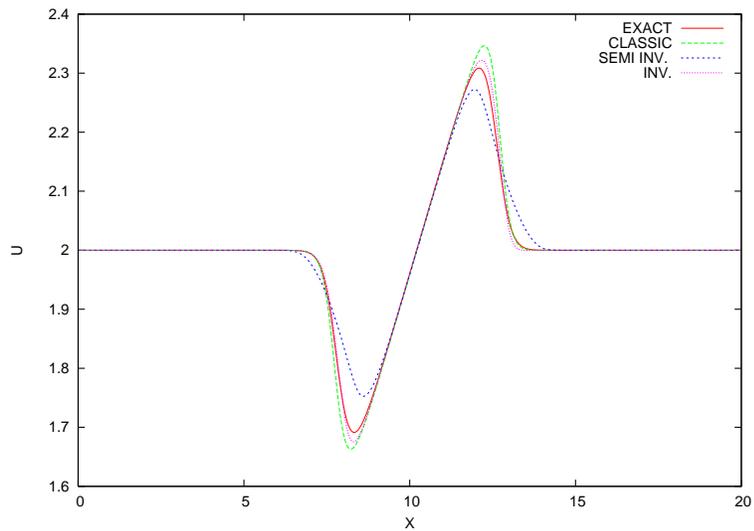
Les symétries sont :

– Translation temporelle

$$\mathbf{T}_\tau : (t,x,Y,u,v) \longmapsto (t + \tau, x, y, u, v)$$



(a) Schéma classique d'ordre 2



(b) Schéma classique d'ordre 4

FIG. 3.7 – Équation de Burgers 1D. Profils des solutions numériques et de la solution exacte pour une solution régulière de l'équation de Burgers. $\Delta x = 5 \cdot 10^{-2}$, $\Delta t = 4 \cdot 10^{-3}$ et $\nu = 5 \cdot 10^{-2}$. Le temps d'intégration est compris dans $[0.1; 5.2]$.

- Translations spatiale :
selon x :

$$\mathbf{S}_{\sigma_1} : (t, x, u) \mapsto (t, x + \sigma_1, u)$$

selon y :

$$\mathbf{S}_{\sigma_2} : (t, y, v) \mapsto (t, y + \sigma_2, v)$$

– Rotation

$$\mathbf{R}_\rho : (x, y, u, v) \mapsto (x \cos \rho - y \sin \rho, x \sin \rho + y \cos \rho, u \cos \rho - v \sin \rho, u \sin \rho + v \cos \rho)$$

– Dilatation

$$\mathbf{D}_\delta : (t, x, y, u, v) \mapsto (te^{2\delta}, xe^\delta, ye^\delta, ue^{-\delta}, ve^{-\delta})$$

– Transformations galiléenne :

selon x :

$$\mathbf{G}_{\gamma_1} : (t, x, u) \mapsto (t, x + \gamma_1 t, u + \gamma_1)$$

selon y :

$$\mathbf{G}_{\gamma_2} : (t, y, v) \mapsto (t, y + \gamma_2 t, v + \gamma_2)$$

– Transformation projective :

$$\mathbf{P}_\varepsilon : (t, x, y, u, v) \mapsto \left(\frac{t}{1 - t\varepsilon}, \frac{x}{1 - t\varepsilon}, \frac{y}{1 - t\varepsilon}, u(1 - \varepsilon t) + \varepsilon x, v(1 - \varepsilon t) + \varepsilon y \right)$$

On ne prend en compte que les translations, la projection et les transformations galiléennes. La dilatation et la rotation ne sont pas retenues pour la procédure d'*invariantisation*. Les variables indépendantes se transforment comme suit :

$$t \mapsto \bar{t} = \frac{t + \tau}{1 - \varepsilon(t + \tau)}, \quad x \mapsto \bar{x} = \frac{(x + \sigma_1) + \gamma_1(t + \tau)}{1 - \varepsilon(t + \tau)}, \quad y \mapsto \bar{y} = \frac{(y + \sigma_2) + \gamma_2(t + \tau)}{1 - \varepsilon(t + \tau)},$$

et les variables dépendantes par :

$$u \mapsto \bar{u} = u(1 - \varepsilon(t + \tau)) + \varepsilon(x + \sigma_1) + \gamma_1, \quad v \mapsto \bar{v} = v(1 - \varepsilon(t + \tau)) + \varepsilon(y + \sigma_2) + \gamma_2,$$

où $(\bar{t}, \bar{x}, \bar{y}, \bar{u}, \bar{v})$ sont les transformées par l'action de $\mathbf{P}_\varepsilon \mathbf{G}_{\gamma_1} \mathbf{G}_{\gamma_2} \mathbf{S}_{\sigma_1} \mathbf{S}_{\sigma_2} \mathbf{T}_\tau$.

3.4.3.1 Transformation du maillage

On considère un maillage régulier et orthogonal dans les deux directions d'espace et de temps :

$$\begin{aligned} t_{i+1,j}^n - t_{i,j}^n &= 0 \\ t_{i,j+1}^n - t_{i,j}^n &= 0 \\ x_i^{n+1} - x_i^n &= 0 \\ x_{i+1}^n - 2x_i^n + x_{i-1}^n &= 0 \\ y_j^{n+1} - y_j^n &= 0 \\ y_{j+1}^n - 2y_j^n + y_{j-1}^n &= 0 \end{aligned}$$

De façon à ne travailler qu'avec les pas d'espace Δx et Δy et le pas de temps Δt , on prend les repères mobiles :

$$\tau = -t_{i,j}^n, \quad \sigma_1 = -x_i^n, \quad \sigma_2 = -y_j^n, \quad (3.28)$$

De sorte que le maillage reste régulier dans les deux directions de l'espace, mais ne le soit pas dans la direction du temps. De plus, l'orthogonalité est brisée.

$$\Delta \bar{t} = \frac{\Delta t}{1 - \varepsilon \Delta t}, \quad \Delta \bar{x}^n = \Delta x^n, \quad \Delta \bar{y}^n = \Delta y^n, \quad (3.29)$$

Construction des repères mobiles On note $z = (t, x, y, u, v)$ et $z_{i,j}^n = (t^n, x_i^n, y_j^n, u_{i,j}^n, v_{i,j}^n)$, où $u_{i,j}^n = u(t^n, x_i^n, y_j^n)$ et $v_{i,j}^n = v(t^n, x_i^n, y_j^n)$. Alors pour une application $\rho : M^{\infty n} \rightarrow G$ telle que :

$$\rho(z_{i,j}^n) \cdot z = \left(\frac{t - t^n}{1 - \varepsilon(t - t^n)}, \frac{(x - x_i^n) + \gamma_1(t - t^n)}{1 - \varepsilon(t - t^n)}, \frac{(y - y_j^n) + \gamma_2(t - t^n)}{1 - \varepsilon(t - t^n)}, \right. \\ \left. u(1 - \varepsilon(t - t^n)) + \varepsilon(x - x_i^n) + \gamma_1, v(1 - \varepsilon(t - t^n)) + \varepsilon(y - y_j^n) + \gamma_2 \right)$$

la condition d'équivariance s'écrit :

$$\rho(z) \cdot z = \rho(\bar{z}) \cdot \bar{z}$$

Regardons à quoi elle correspond sur les points $z = (z_{i,j}^{n+1}, z_{i,j}^n, z_{i\pm 1,j}^n, z_{i,j\pm 1}^n)$ du stencil associé à la discrétisation du système :

on a d'une part :

$$\rho(z_{i,j}^n) \cdot z_{i,j}^n = (0, 0, 0, u_{i,j}^n + \gamma_1, v_{i,j}^n + \gamma_2)$$

$$\rho(z_{i,j}^n) \cdot z_{i,j}^{n+1} = \left(\frac{\Delta t}{1 - \varepsilon \Delta t}, \frac{x_i^{n+1} - x_i^n + \gamma_1 \Delta t}{1 - \varepsilon \Delta t}, \frac{y_j^{n+1} - y_j^n + \gamma_2 \Delta t}{1 - \varepsilon \Delta t}, \right. \\ \left. u_{i,j}^{n+1}(1 - \varepsilon \Delta t) + \varepsilon(x_i^{n+1} - x_i^n) + \gamma_1, v_{i,j}^{n+1}(1 - \varepsilon \Delta t) + \varepsilon(y_j^{n+1} - y_j^n) + \gamma_2 \right)$$

$$\rho(z_{i,j}^n) \cdot z_{i\pm 1,j}^n = (0, \pm \Delta x, 0, u_{i\pm 1,j}^n \pm \varepsilon \Delta x + \gamma_1, v_{i\pm 1,j}^n + \gamma_2)$$

et comme :

$$\bar{z}_{i,j}^n = (0, 0, 0, u_{i,j}^n + \lambda_1, v_{i,j}^n + \lambda_2)$$

$$\bar{z}_{i,j}^{n+1} = \left(\frac{\Delta t}{1 - \mu \Delta t}, \frac{x_i^{n+1} - x_i^n + \lambda_1 \Delta t}{1 - \mu \Delta t}, \frac{y_j^{n+1} - y_j^n + \lambda_2 \Delta t}{1 - \mu \Delta t}, \right. \\ \left. u_{i,j}^{n+1}(1 - \mu \Delta t) + \mu(x_i^{n+1} - x_i^n) + \lambda_1, v_{i,j}^{n+1}(1 - \mu \Delta t) + \mu(y_j^{n+1} - y_j^n) + \lambda_2 \right)$$

$$\bar{z}_{i\pm 1,j}^n = (0, \pm \Delta x, 0, u_{i\pm 1,j}^n \pm \mu \Delta x + \lambda_1, v_{i\pm 1,j}^n + \lambda_2)$$

$$\bar{z}_{i,j\pm 1}^n = (0, 0, \pm \Delta y, u_{i,j\pm 1}^n + \lambda_1, v_{i,j\pm 1}^n \pm \mu \Delta y + \lambda_2)$$

On a alors pour le membre de droite de la condition d'équivariance :

$$\begin{aligned}
\rho(\bar{z}_{i,j}^n) \cdot \bar{z}_{i,j}^n &= (0, 0, 0, \bar{u}_{i,j}^n + \bar{\gamma}_1, \bar{v}_{i,j}^n + \bar{\gamma}_2) \\
&= (0, 0, 0, u_{i,j}^n + \lambda_1 + \bar{\gamma}_1, v_{i,j}^n + \lambda_2 + \bar{\gamma}_2) \\
\rho(\bar{z}_{i,j}^n) \cdot \bar{z}_{i,j}^{n+1} &= \left(\frac{\Delta t}{1 - (\bar{\varepsilon} + \mu)\Delta t}, \frac{x_i^{n+1} - x_i^n + (\lambda_1 + \bar{\gamma}_1)\Delta t}{1 - (\bar{\varepsilon} + \mu)\Delta t}, \frac{y_j^{n+1} - y_j^n + (\bar{\gamma}_2 + \lambda_2)\Delta t}{1 - (\bar{\varepsilon} + \mu)\Delta t}, \right. \\
&\quad \left. u_{i,j}^{n+1}(1 - (\bar{\varepsilon} + \mu)\Delta t) + (\bar{\varepsilon} + \mu)(x_i^{n+1} - x_i^n) + (\lambda_1 + \bar{\gamma}_1), \right. \\
&\quad \left. v_{i,j}^{n+1}(1 - (\bar{\varepsilon} + \mu)\Delta t) + (\bar{\varepsilon} + \mu)(y_j^{n+1} - y_j^n) + (\bar{\gamma}_2 + \lambda_2) \right) \\
\rho(\bar{z}_{i,j}^n) \cdot \bar{z}_{i\pm 1,j}^n &= (0, \pm\Delta\bar{x}, 0, \bar{u}_{i\pm 1,j}^n \pm \bar{\varepsilon}\Delta\bar{x} + \bar{\gamma}_1, \bar{v}_{i\pm 1,j}^n + \bar{\gamma}_2) \\
&= (0, \pm\Delta x, 0, u_{i\pm 1,j}^n \pm (\bar{\varepsilon} + \mu)\Delta x + (\lambda_1 + \bar{\gamma}_1), v_{i\pm 1,j}^n + (\lambda_2 + \bar{\gamma}_2)) \\
\rho(\bar{z}_{i,j}^n) \cdot \bar{z}_{i,j\pm 1}^n &= (0, 0, \pm\Delta\bar{y}, \bar{u}_{i,j\pm 1}^n + \bar{\gamma}_1, \bar{v}_{i,j\pm 1}^n \pm \bar{\varepsilon}\Delta\bar{y} + \bar{\gamma}_2) \\
&= (0, 0, \pm\Delta y, u_{i,j\pm 1}^n + (\lambda_1 + \bar{\gamma}_1), v_{i,j\pm 1}^n \pm (\bar{\varepsilon} + \mu)\Delta y + (\lambda_2 + \bar{\gamma}_2))
\end{aligned}$$

La condition d'équivariance s'écrit donc :

$$\bar{\varepsilon} = \varepsilon - \mu, \quad \bar{\gamma}_1 = \gamma_1 - \lambda_1, \quad \bar{\gamma}_2 = \gamma_2 - \lambda_2, \quad (3.30)$$

En supposant une forme algébrique des paramètres de symétrisation :

$$\begin{aligned}
\varepsilon &= \frac{1}{\Delta x} (a_W u_{i-1,j}^n + a_C u_{i,j}^n + a_E u_{i+1,j}^n + b_W v_{i-1,j}^n + b_C v_{i,j}^n + b_E v_{i+1,j}^n) \\
&\quad + \frac{1}{\Delta y} (a_S u_{i,j-1}^n + a_C u_{i,j}^n + a_N u_{i,j+1}^n + b_S v_{i,j-1}^n + b_C v_{i,j}^n + b_N v_{i,j+1}^n) \\
\gamma_1 &= (c_W u_{i-1,j}^n + c_C u_{i,j}^n + c_E u_{i+1,j}^n + d_W v_{i-1,j}^n + d_C v_{i,j}^n + d_E v_{i+1,j}^n) \\
&\quad + (c_S u_{i,j-1}^n + c_C u_{i,j}^n + c_N u_{i,j+1}^n + d_S v_{i,j-1}^n + d_C v_{i,j}^n + d_N v_{i,j+1}^n) \\
\gamma_2 &= (e_W u_{i-1,j}^n + e_C u_{i,j}^n + e_E u_{i+1,j}^n + f_W v_{i-1,j}^n + f_C v_{i,j}^n + f_E v_{i+1,j}^n) \\
&\quad + (e_S u_{i,j-1}^n + e_C u_{i,j}^n + e_N u_{i,j+1}^n + f_S v_{i,j-1}^n + f_C v_{i,j}^n + f_N v_{i,j+1}^n)
\end{aligned}$$

et en écrivant leur transformé :

$$\begin{aligned}\bar{\varepsilon} &= \frac{1}{\Delta x} [a_W(u_{i-1,j}^n - \mu\Delta x + \lambda_1) + a_C(u_{i,j}^n + \lambda_1) + a_E(u_{i+1,j}^n + \mu\Delta x + \lambda_1) \\ &\quad + b_W(v_{i-1,j}^n + \lambda_2) + b_C v_{i,j}^n + \lambda_2) + (b_E(v_{i+1,j}^n + \lambda_2))] \\ &\quad + \frac{1}{\Delta y} [a_S(u_{i,j-1}^n + \lambda_1) + a_C(u_{i,j}^n + \lambda_1) + a_N(u_{i+1,j}^n + \lambda_1) \\ &\quad + b_S(v_{i,j-1}^n - \mu\Delta y + \lambda_2) + b_C(v_{i,j}^n + \lambda_2) + b_N(v_{i,j+1}^n + \mu\Delta y + \lambda_2)]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{\gamma}_1 &= [c_W(u_{i-1,j}^n - \mu\Delta x + \lambda_1) + c_C(u_{i,j}^n + \lambda_1) + c_E(u_{i+1,j}^n + \mu\Delta x + \lambda_1) \\ &\quad + d_W(v_{i-1,j}^n + \lambda_2) + d_C(v_{i,j}^n + \lambda_2) + d_E(v_{i+1,j}^n + \lambda_2)] \\ &\quad + [c_S(u_{i,j-1}^n + \lambda_1) + c_C(u_{i,j}^n + \lambda_1) + c_N(u_{i+1,j}^n + \lambda_1) \\ &\quad + d_S(v_{i,j-1}^n - \mu\Delta y + \lambda_2) + d_C(v_{i,j}^n + \lambda_2) + d_N(v_{i,j+1}^n + \mu\Delta y + \lambda_2)]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{\gamma}_2 &= [e_W(u_{i-1,j}^n - \mu\Delta x + \lambda_1) + e_C(u_{i,j}^n + \lambda_1) + e_E(u_{i+1,j}^n + \mu\Delta x + \lambda_1) \\ &\quad + f_W(v_{i-1,j}^n + \lambda_2) + f_C(v_{i,j}^n + \lambda_2) + f_E(v_{i+1,j}^n + \lambda_2)] \\ &\quad + [e_S(u_{i,j-1}^n + \lambda_1) + e_C(u_{i,j}^n + \lambda_1) + e_N(u_{i+1,j}^n + \lambda_1) \\ &\quad + f_S(v_{i,j-1}^n - \mu\Delta y + \lambda_2) + f_C(v_{i,j}^n + \lambda_2) + f_N(v_{i,j+1}^n + \mu\Delta y + \lambda_2)]\end{aligned}$$

On obtient les relations que doivent vérifier les coefficients de ε pour rendre cet élément équivariant :

$$a_E - a_W + b_N - b_S = -1 \quad (3.31)$$

$$a_E + a_C + a_W + a_N + a_C + a_S = 0 \quad (3.32)$$

$$b_E + b_C + b_W + b_N + b_C + b_S = 0 \quad (3.33)$$

De même, les coefficients de γ_1 doivent vérifier :

$$c_E - c_W = 0 \quad (3.34)$$

$$d_N - d_S = 0 \quad (3.35)$$

$$c_E + c_C + c_W + c_N + c_C + c_S = -1 \quad (3.36)$$

$$d_E + d_C + d_W + d_N + d_C + d_S = 0 \quad (3.37)$$

Les coefficients de γ_2 doivent vérifier :

$$e_E - e_W = 0 \quad (3.38)$$

$$f_N - f_S = 0 \quad (3.39)$$

$$e_E + e_C + e_W + e_N + e_C + e_S = 0 \quad (3.40)$$

$$f_E + f_C + f_W + f_N + f_C + f_S = -1 \quad (3.41)$$

3.4.3.2 Invariantisation du schéma FTCS

On considère une discrétisation Euler explicite :

$$\begin{aligned} & \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{k} + u_{i,j}^n \left(\frac{u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n}{2h_x} \right) + v_{i,j}^n \left(\frac{u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n}{2h_y} \right) \\ &= \nu \left(\frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{h_x^2} + \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{h_y^2} \right) \end{aligned} \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} & \frac{v_{i,j}^{n+1} - v_{i,j}^n}{k} + u_{i,j}^n \left(\frac{v_{i+1,j}^n - v_{i-1,j}^n}{2h_x} \right) + v_{i,j}^n \left(\frac{v_{i,j+1}^n - v_{i,j-1}^n}{2h_y} \right) \\ &= \nu \left(\frac{v_{i+1,j}^n - 2v_{i,j}^n + v_{i-1,j}^n}{h_x^2} + \frac{v_{i,j+1}^n - 2v_{i,j}^n + v_{i,j-1}^n}{h_y^2} \right) \end{aligned} \quad (3.43)$$

Les équations aux différences se transforment par l'action de g , et s'écrivent dans le repère d'origine :

$$\begin{aligned} & (u_{i,j}^{n+1}(1 - \varepsilon\Delta t) + \varepsilon(x^{n+1} - x^n) - u_{i,j}^n) \frac{1 - \varepsilon\Delta t}{\Delta t} \\ &+ (u_{i,j}^n + \gamma_1) \left(\frac{u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n}{2\Delta x} + \varepsilon \right) + (v_{i,j}^n + \gamma_2) \left(\frac{u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \right) \\ &= \nu \left(\frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right) \end{aligned} \quad (3.44)$$

$$\begin{aligned} & (v_{i,j}^{n+1}(1 - \varepsilon\Delta t) + \varepsilon(y^{n+1} - y^n) - v_{i,j}^n) \frac{1 - \varepsilon\Delta t}{\Delta t} \\ &+ (u_{i,j}^n + \gamma_1) \left(\frac{v_{i+1,j}^n - v_{i-1,j}^n}{2\Delta x} \right) + (v_{i,j}^n + \gamma_2) \left(\frac{v_{i,j+1}^n - v_{i,j-1}^n}{2\Delta y} + \varepsilon \right) \\ &= \nu \left(\frac{v_{i+1,j}^n - 2v_{i,j}^n + v_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{v_{i,j+1}^n - 2v_{i,j}^n + v_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right) \end{aligned} \quad (3.45)$$

Il suffit à présent de remplacer les repères mobiles par leur expression algébrique dans le schéma ; puis d'effectuer un calcul d'ordre de précision en fonction des coefficients pour obtenir l'expression particulière des repères mobiles qui garantit de bonnes performances numériques.

Ordre de précision On détermine les coefficients de chacun des repères mobiles ε , γ_1 et γ_2 de sorte à conserver un schéma du second ordre. De manière analogue au cas 1D, on regarde comment se transforment les termes instationnaires, convectifs et dissipatifs du système d'équations. On remarque que les termes dissipatifs

$$\begin{aligned} U_d &= \nu \left(\frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right) \\ V_d &= \nu \left(\frac{v_{i+1,j}^n - 2v_{i,j}^n + v_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{v_{i,j+1}^n - 2v_{i,j}^n + v_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right) \end{aligned}$$

sont invariants par la transformation considérée.

$$\begin{aligned} U_d &= \bar{U}_d \\ V_d &= \bar{V}_d \end{aligned}$$

Les termes convectifs transformés s'écrivent :

$$\begin{aligned} \bar{U}_c &= \bar{U}_{cx} + \bar{U}_{cy} \\ &= (u_{i,j}^n + \gamma_1) \left(\frac{u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n}{2\Delta x} + \varepsilon \right) + (v_{i,j}^n + \gamma_2) \left(\frac{u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \right) \\ \bar{V}_c &= \bar{V}_{cx} + \bar{V}_{cy} \\ &= (u_{i,j}^n + \gamma_1) \left(\frac{v_{i+1,j}^n - v_{i-1,j}^n}{2\Delta x} \right) + (v_{i,j}^n + \gamma_2) \left(\frac{v_{i,j+1}^n - v_{i,j-1}^n}{2\Delta y} + \varepsilon \right) \end{aligned}$$

Il faut au préalable déterminer la consistance des repères mobiles en fonction de leurs coefficients. D'une part, le choix du paramètre ε , en prenant en compte la condition d'équivariance, s'écrit :

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \frac{1}{\Delta x} \left[\sum_{p=0}^{\infty} \frac{\Delta x^{2p+1}}{(2p+1)!} \left((a_E - a_W) \frac{\partial^{2p+1} u}{\partial x^{2p+1}} + (b_E - b_W) \frac{\partial^{2p+1} v}{\partial x^{2p+1}} \right) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\Delta x^{2p}}{(2p)!} \left((a_E + a_W) \frac{\partial^{2p} u}{\partial x^{2p}} + (b_E + b_W) \frac{\partial^{2p} v}{\partial x^{2p}} \right) \right] \\ &\quad + \frac{1}{\Delta y} \left[\sum_{p=0}^{\infty} \frac{\Delta y^{2p+1}}{(2p+1)!} \left((a_N - a_S) \frac{\partial^{2p+1} u}{\partial y^{2p+1}} + (b_N - b_S) \frac{\partial^{2p+1} v}{\partial y^{2p+1}} \right) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\Delta y^{2p}}{(2p)!} \left((a_N + a_S) \frac{\partial^{2p} u}{\partial y^{2p}} + (b_N + b_S) \frac{\partial^{2p} v}{\partial y^{2p}} \right) \right] \end{aligned}$$

Afin de garder la consistance à l'ordre 2 avec les dérivées spatiales dans \bar{U}_{cx} et \bar{V}_{cy} , on choisit de rendre nulles les sommations paires de ε :

$$a_E + a_W = 0, \quad b_E + b_W = 0, \quad a_N + a_S = 0, \quad b_N + b_S = 0, \quad (3.46)$$

Les conditions (3.32) et (3.33) impliquent alors :

$$a_C = 0, \quad b_C = 0,$$

Or, ces coefficients sont respectivement ceux associés à $u_{i,j}^n$ et $v_{i,j}^n$. Il n'y a donc pas de terme en $u_{i,j}^n$ et $v_{i,j}^n$ dans l'expression de ε . Par ailleurs, comme $a_E = -a_W$ et $b_N = -b_S$, la condition d'équivariance (3.31) devient :

$$a_E + b_N = -\frac{1}{2}$$

D'autre part, les paramètres γ_1 et γ_2 s'écrivent aussi, en tenant compte de la condition d'équivariance sur leurs coefficients :

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= -u + \sum_{p=0}^{\infty} \left[(d_E - d_W) \frac{\Delta x^{2p+1}}{(2p+1)!} \frac{\partial^{2p+1} v}{\partial x^{2p+1}} + (c_N - c_S) \frac{\Delta y^{2p+1}}{(2p+1)!} \frac{\partial^{2p+1} u}{\partial y^{2p+1}} \right] \\ &+ \sum_{p=1}^{\infty} \left[\frac{\Delta x^{2p}}{(2p)!} \left((c_E + c_W) \frac{\partial^{2p} u}{\partial x^{2p}} + (d_E + d_W) \frac{\partial^{2p} v}{\partial x^{2p}} \right) \right. \\ &\left. + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\Delta y^{2p}}{(2p)!} \left((c_N + c_S) \frac{\partial^{2p} u}{\partial y^{2p}} + (d_N + d_S) \frac{\partial^{2p} v}{\partial y^{2p}} \right) \right]\end{aligned}$$

et de même :

$$\begin{aligned}\gamma_2 &= -v + \sum_{p=0}^{\infty} \left[(f_E - f_W) \frac{\Delta x^{2p+1}}{(2p+1)!} \frac{\partial^{2p+1} v}{\partial x^{2p+1}} + (e_N - e_S) \frac{\Delta y^{2p+1}}{(2p+1)!} \frac{\partial^{2p+1} u}{\partial y^{2p+1}} \right] \\ &+ \sum_{p=1}^{\infty} \left[\frac{\Delta x^{2p}}{(2p)!} \left((e_E + e_W) \frac{\partial^{2p} u}{\partial x^{2p}} + (f_E + f_W) \frac{\partial^{2p} v}{\partial x^{2p}} \right) \right. \\ &\left. + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\Delta y^{2p}}{(2p)!} \left((e_N + e_S) \frac{\partial^{2p} u}{\partial y^{2p}} + (f_N + f_S) \frac{\partial^{2p} v}{\partial y^{2p}} \right) \right]\end{aligned}$$

Ce qui induit que, tout comme dans le cas 1D, les termes convectifs s'annulent à $O(\Delta x, \Delta y)$ près. Pour rendre cette précision à $O(\Delta x^2, \Delta y^2)$, il faut éliminer les sommations impaires, c'est-à-dire :

$$c_N - c_S = 0, \quad d_E - d_W = 0, \quad e_N - e_S = 0, \quad f_E - f_W = 0,$$

Ainsi, les conditions d'équivariance (3.36) et (3.37) pour γ_1 s'écrivent :

$$2(c_E + c_N + c_C) = -1, \quad d_E + d_N + d_C = 0,$$

et de même, les équations (3.40) et (3.41) pour γ_2 s'écrivent :

$$e_E + e_N + e_C = 0, \quad 2(f_E + f_N + f_C) = -1,$$

On s'attend maintenant à ce que les termes instationnaires transformés fassent apparaître un terme de convection. Sur un maillage orthogonal en espace et en temps, les termes instationnaires s'écrivent :

$$\begin{aligned}\bar{U}_t &= (u_{i,j}^{n+1}(1 - \varepsilon \Delta t) - u_{i,j}^n) \frac{1 - \varepsilon \Delta t}{\Delta t} \\ &= \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} - \varepsilon(2u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n) + \varepsilon^2 \Delta t^2 u_{i,j}^{n+1} \\ \bar{V}_t &= (v_{i,j}^{n+1}(1 - \varepsilon \Delta t) - v_{i,j}^n) \frac{1 - \varepsilon \Delta t}{\Delta t} \\ &= \frac{v_{i,j}^{n+1} - v_{i,j}^n}{\Delta t} - \varepsilon(2v_{i,j}^{n+1} - v_{i,j}^n) + \varepsilon^2 \Delta t^2 v_{i,j}^{n+1}\end{aligned}$$

L'ordre de précision est conditionné par le terme en ε . Or, d'après (3.46), celui-ci est consistant à l'ordre 2 à une dérivée spatiale :

$$\varepsilon = (a_E - a_W) \frac{\partial u}{\partial x} + (b_N - b_S) \frac{\partial v}{\partial y} + O(\Delta x^2, \Delta y^2) \quad (3.47)$$

Le schéma invariant est finalement précis à l'ordre $(\Delta t, \Delta x^2, \Delta y^2)$. À ce stade, les coefficients du repère mobile ε associé à la transformation projective doivent vérifier :

$$a_E + b_N = -\frac{1}{2}, \quad a_C + a_C = 0, \quad b_C + b_C = 0, \quad (3.48)$$

$$a_E + a_W = 0, \quad a_N + a_S = 0, \quad b_E + b_W = 0, \quad b_N + b_S = 0, \quad (3.49)$$

Les coefficients de γ_1 doivent vérifier quant à eux :

$$c_E - c_W = 0, \quad c_N - c_S = 0, \quad 2(c_E + c_N + c_C) = -1, \quad (3.50)$$

$$d_E - d_W = 0, \quad d_N - d_S = 0, \quad d_E + d_N + d_C = 0, \quad (3.51)$$

Les coefficients de γ_2 doivent vérifier :

$$e_E - e_W = 0, \quad e_N - e_S = 0, \quad e_E + e_N + e_C = 0, \quad (3.52)$$

$$f_E - f_W = 0, \quad f_N - f_S = 0, \quad 2(f_E + f_N + f_C) = -1, \quad (3.53)$$

On obtient une famille de repères mobiles pour chaque transformation. La procédure conduit ainsi à un ensemble de schémas invariants.

3.4.3.3 Résultats numériques

Les tests que l'on présente dans cette sous-section n'ont pour objectif que de montrer que la procédure d'invariantisation apporte un gain en robustesse. Cela confirme un résultat déjà observé lors des tests associés à l'équation de convection-diffusion 1D et l'équation de Burgers 1D. On considère le schéma explicite centré en espace (FTCS). On se place dans des conditions où le schéma classique n'est pas stable. Il ne permet donc pas de décrire correctement la solution. On effectue l'invariantisation du schéma FTCS selon les calculs précédents. On montre numériquement que le schéma invariant traduit qualitativement la solution analytique.

Dans les simulations qui suivent, on choisit le jeu de coefficients suivant :

$$a_E = -a_W = -\frac{1}{4} \quad (3.54)$$

$$a_N = a_S = a_C = 0 \quad (3.55)$$

$$b_N = -b_S = -\frac{1}{4} \quad (3.56)$$

$$b_E = b_W = b_C = 0 \quad (3.57)$$

$$c_E = c_W = c_N = c_S = 0 \quad (3.58)$$

$$c_C = -\frac{1}{2} \quad (3.59)$$

$$d_C = d_E = d_W = d_N = d_S = 0 \quad (3.60)$$

$$e_C = e_E = e_W = e_N = e_S = 0 \quad (3.61)$$

$$f_E = f_W = f_N = f_S = 0 \quad (3.62)$$

$$f_C = -\frac{1}{2} \quad (3.63)$$

De sorte que le schéma invariant s'écrive :

$$\begin{aligned} & (u_{i,j}^{n+1}(1 - \varepsilon\Delta t) + \varepsilon(x^{n+1} - x^n) - u_{i,j}^n) \frac{1 - \varepsilon\Delta t}{\Delta t} \\ & + (u_{i,j}^n + \gamma_1) \left(\frac{u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n}{2\Delta x} + \varepsilon \right) + (v_{i,j}^n + \gamma_2) \left(\frac{u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \right) \\ & = \nu \left(\frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right) \end{aligned} \quad (3.64)$$

$$\begin{aligned} & (v_{i,j}^{n+1}(1 - \varepsilon\Delta t) + \varepsilon(y^{n+1} - y^n) - v_{i,j}^n) \frac{1 - \varepsilon\Delta t}{\Delta t} \\ & + (u_{i,j}^n + \gamma_1) \left(\frac{v_{i+1,j}^n - v_{i-1,j}^n}{2\Delta x} \right) + (v_{i,j}^n + \gamma_2) \left(\frac{v_{i,j+1}^n - v_{i,j-1}^n}{2\Delta y} + \varepsilon \right) \\ & = \nu \left(\frac{v_{i+1,j}^n - 2v_{i,j}^n + v_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{v_{i,j+1}^n - 2v_{i,j}^n + v_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right) \end{aligned} \quad (3.65)$$

avec

$$\varepsilon = -\frac{1}{2} \left(\frac{u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n}{2\Delta x} + \frac{v_{i,j+1}^n - v_{i,j-1}^n}{2\Delta y} \right) \quad (3.66)$$

$$\gamma_1 = -u_{i,j}^n \quad (3.67)$$

$$\gamma_2 = -v_{i,j}^n \quad (3.68)$$

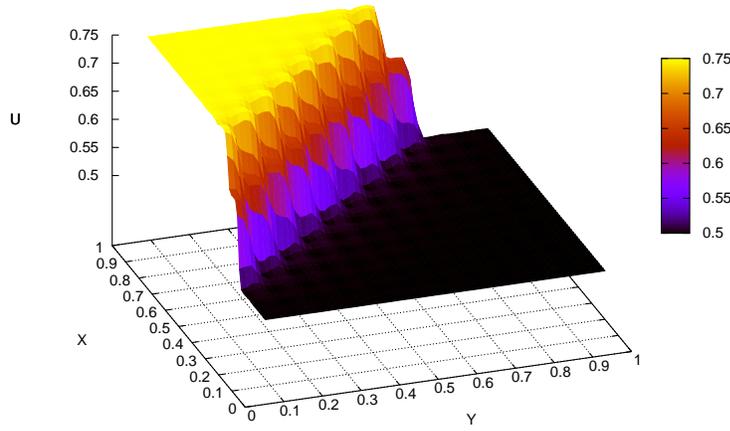
On considère l'équation de Burgers sur un domaine spatial plan $\Omega = [0; 1] \times [0; 1]$ et un intervalle de temps $[0; 1]$. Les conditions de bord et la condition initiale est donnée par la solution exacte :

$$u_{\text{exact}}(x,y,t) = \frac{3}{4} - \left[4 \left(1 + \exp\left(-\frac{4x - 4y + t}{32\nu}\right) \right) \right]^{-1}$$

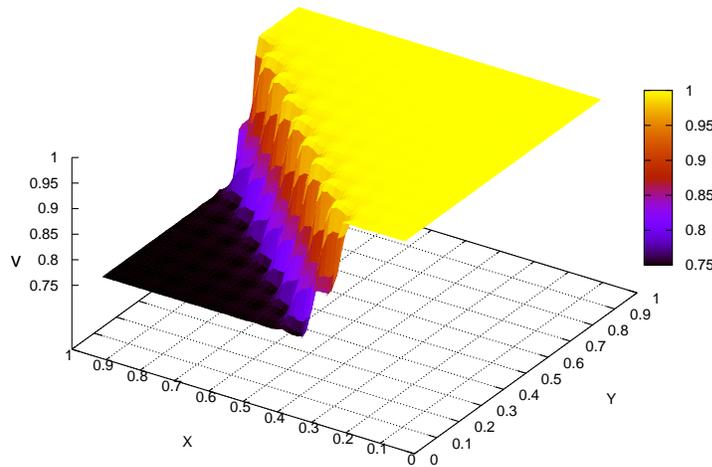
$$v_{\text{exact}}(x,y,t) = \frac{3}{4} + \left[4 \left(1 + \exp\left(-\frac{4x - 4y + t}{32\nu}\right) \right) \right]^{-1}$$

La viscosité est fixée à $\nu = 8.10^{-4}$.

On compare la solution du schéma invariant avec la solution exacte. Le pas de temps est fixé à $\Delta t = 5.10^{-2}$, et les pas d'espace dans les deux directions à $\Delta x = \Delta y = 5.10^{-2}$. Le temps d'intégration est $T = 1$. La Fig. 3.8 représente l'allure de la solution exacte, la composante $u_{\text{exact}}(x,y)$, en (a), et la composante $v_{\text{exact}}(x,y)$, en (b). Pour



(a) $u_{\text{exact}}(x,y)$



(b) $v_{\text{exact}}(x,y)$

FIG. 3.8 – Équation de Burgers 2D. Profils de la solution exacte pour une solution régulière de l'équation de Burgers : (a) la composante $u_{\text{exact}}(x,y)$, (b) $v_{\text{exact}}(x,y)$, au temps $T = 1$. La viscosité vaut $\nu = 8.10^{-4}$.

le même temps d'intégration $T = 1$ et la même viscosité $\nu = 8.10^{-4}$, le schéma classique FTCS est représenté sur la Fig. 3.9. On remarque que la zone de choc est largement dégradée : la viscosité est trop faible, le schéma FTCS n'arrive pas à

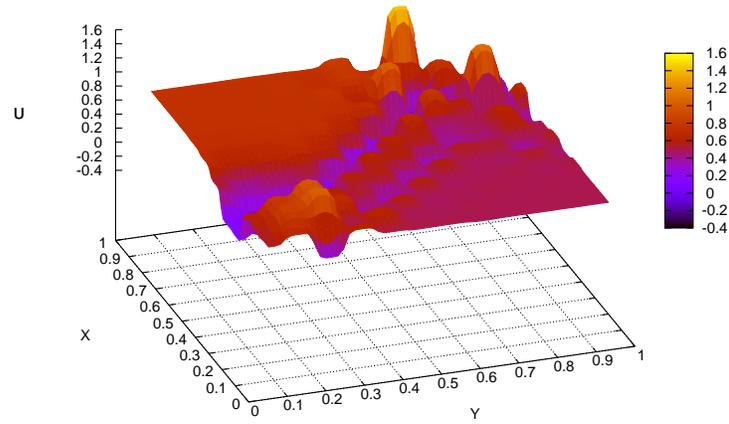
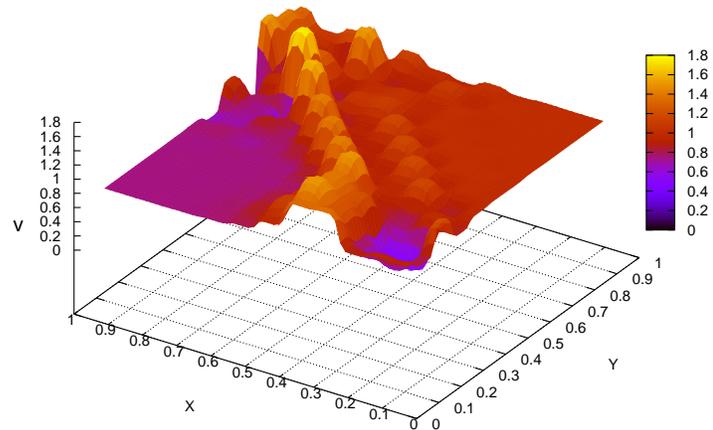
(a) $u_{\text{FTCS}}(x,y)$ (b) $v_{\text{FTCS}}(x,y)$

FIG. 3.9 – Équation de Burgers 2D. Profils de la solution issue du schéma classique FTCS : (a) la composante $u_{\text{exact}}(x,y)$, (b) $v_{\text{exact}}(x,y)$, au temps $T = 1$. La viscosité vaut $\nu = 8.10^{-4}$. Le pas de temps est de $\Delta t = 5.10^{-2}$. Les pas d'espace sont de $\Delta x = \Delta y = 8.10^{-2}$.

reproduire correctement la solution.

Le comportement de la solution associée au schéma invariant est illustré sur la Fig. 3.10. Le schéma invariant, même dans ces conditions, réussit à capturer la solution physique de façon globalement correcte. La solution numérique présente cependant une diffusion au voisinage du choc.

On regarde à présent l'erreur moyenne sur chacune des composantes au temps $T = 1$

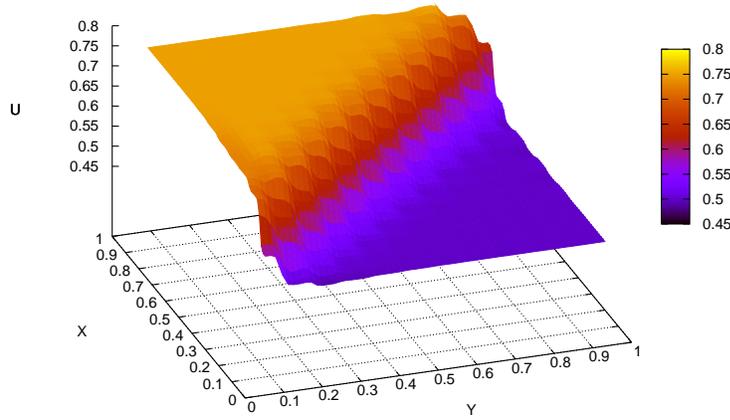
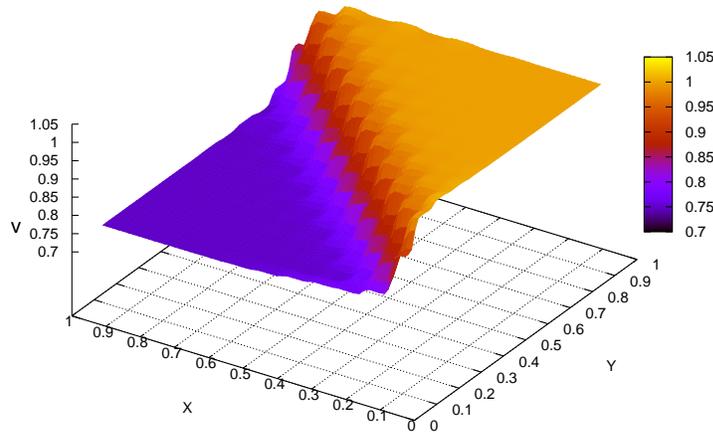
(a) $u_{\text{invariant}}(x,y)$ (b) $v_{\text{invariant}}(x,y)$

FIG. 3.10 – Équation de Burgers 2D. Profils de la solution issue du schéma invariant : (a) la composante $u_{\text{invariant}}(x,y)$, (b) $v_{\text{invariant}}(x,y)$, au temps $T = 1$. La viscosité vaut $\nu = 8 \cdot 10^{-4}$. Le pas de temps est de $\Delta t = 5 \cdot 10^{-2}$. Les pas d'espace sont de $\Delta x = \Delta y = 8 \cdot 10^{-2}$.

définie par :

$$Err_u(x,y) = \left| \frac{u_{\text{exact}}(x,y) - u_{\text{num}}(x,y)}{u_{\text{exact}}(x,y)} \right|$$

et

$$Err_v(x,y) = \left| \frac{v_{\text{exact}}(x,y) - v_{\text{num}}(x,y)}{v_{\text{exact}}(x,y)} \right|$$

On s'attend à ce que la partie la plus importante de l'erreur se trouve au voisinage du choc pour chacune des composantes, comme il est montré sur les Fig. 3.11 et 3.12. On illustre l'erreur relative sur la diagonale en fonction de la viscosité. On

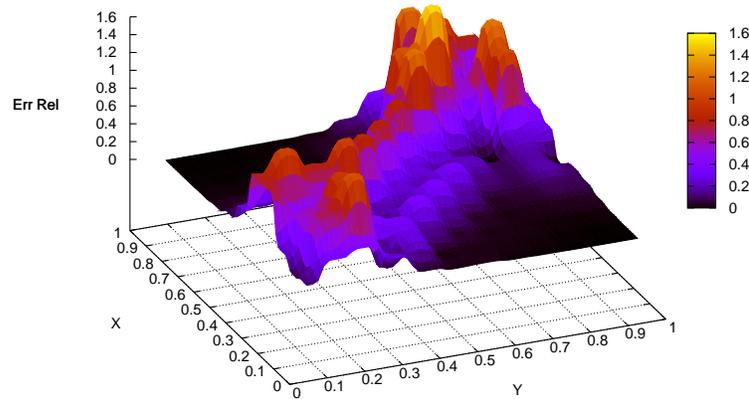
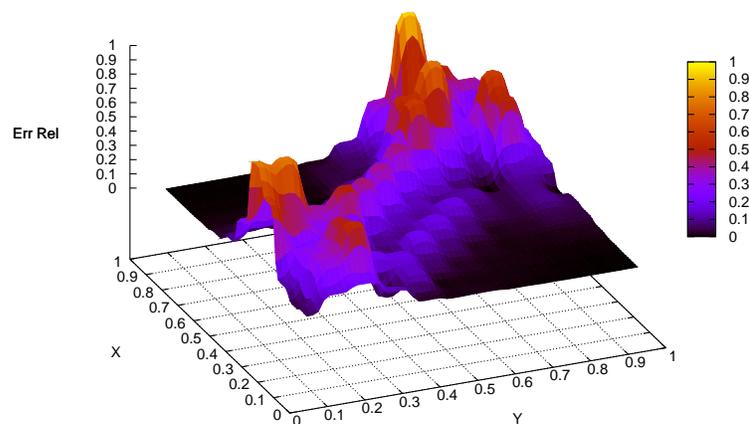
(a) $u_{\text{FTCS}}(x,y)$ (b) $v_{\text{FTCS}}(x,y)$

FIG. 3.11 – Équation de Burgers 2D. *Erreur relative de la solution issue du schéma classique sur tout le domaine : (a) la composante $u_{\text{FTCS}}(x,y)$, (b) $v_{\text{FTCS}}(x,y)$, au temps $T = 1$. La viscosité vaut $\nu = 8.10^{-4}$. Le pas de temps est de $\Delta t = 5.10^{-2}$. Les pas d'espace sont de $\Delta x = \Delta y = 8.10^{-2}$.*

reste toujours dans les mêmes conditions : sur le domaine $\Omega = [0; 1]^2$, pour un temps d'intégration de $T = 1$, le pas de temps est de $\Delta t = 5.10^{-2}$, et les pas d'espace sont dans chaque direction égaux à $\Delta x = \Delta y = 8.10^{-2}$. La viscosité varie de $\nu = 8.10^{-4}$, 10^{-3} , 2.10^{-3} à 5.10^{-3} . Sur les Fig. 3.13(a) et Fig. 3.13(b), on représente l'erreur relative sur la première composante en fonction de la viscosité ν . Sur les Fig. 3.14(a) et Fig. 3.14(b), on représente l'erreur relative sur la seconde composante en fonction de la viscosité ν . On remarque que l'erreur relative croît pour le schéma classique sur chacune des composantes, à mesure que la viscosité diminue. L'erreur devient rapidement très importante dès lors que $\nu \leq 10^{-3}$. De plus, elle est irrégulièrement distribuée sur la diagonale.

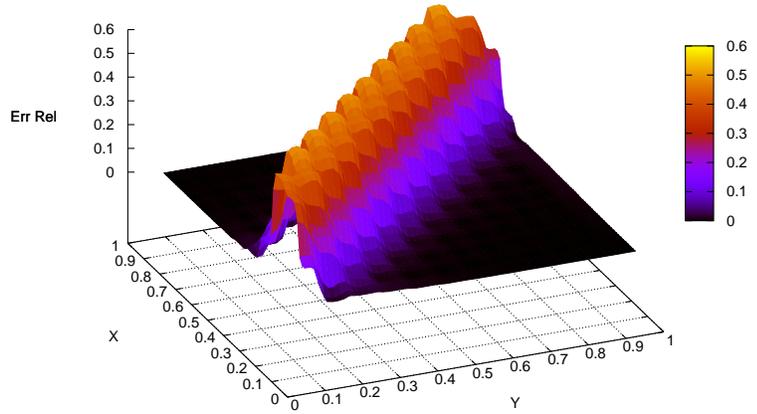
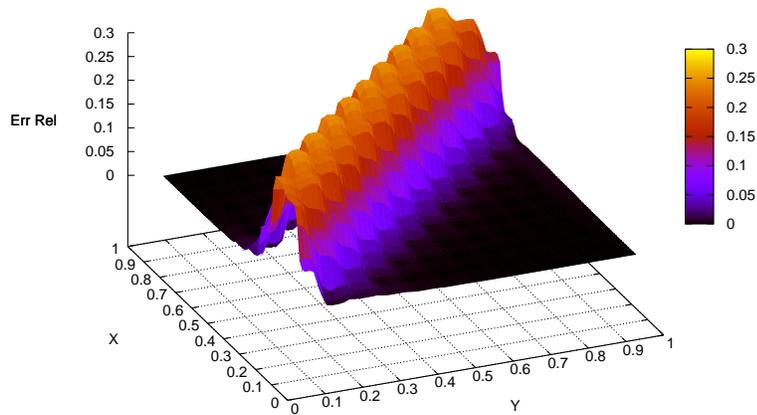
(a) $u_{\text{invariant}}(x,y)$ (b) $v_{\text{invariant}}(x,y)$

FIG. 3.12 – Équation de Burgers 2D. *Erreur relative de la solution issue du schéma classique sur tout le domaine : (a) la composante $u_{\text{invariant}}(x,y)$, (b) $v_{\text{invariant}}(x,y)$, au temps $T = 1$. La viscosité vaut $\nu = 8 \cdot 10^{-4}$. Le pas de temps est de $\Delta t = 5 \cdot 10^{-2}$. Les pas d'espace sont de $\Delta x = \Delta y = 8 \cdot 10^{-2}$.*

L'erreur relative associée au schéma invariant est quant à elle bien différente : elle paraît insensible à la diminution de la viscosité, excepté aux extrémités de l'intervalle. De plus, elle est uniformément répartie. On note cependant que l'erreur atteint environ 25% pour la première composante du champ de vitesse, et qu'elle est d'environ 13% pour la seconde composante de la vitesse, quelle que soit ν . Le schéma classique, pour une viscosité suffisamment grande ($\nu \geq 8 \cdot 10^{-3}$), possède une erreur relative plus faible. Cela suggère qu'il existe un intervalle des paramètres numériques pour lequel les schémas invariants sont meilleurs et, en dehors duquel les schémas classiques restent plus efficaces. Au travers de ce test numérique, on a confirmé un des bénéfices de la procédure d'invariantisation. Le schéma est devenu plus stable,

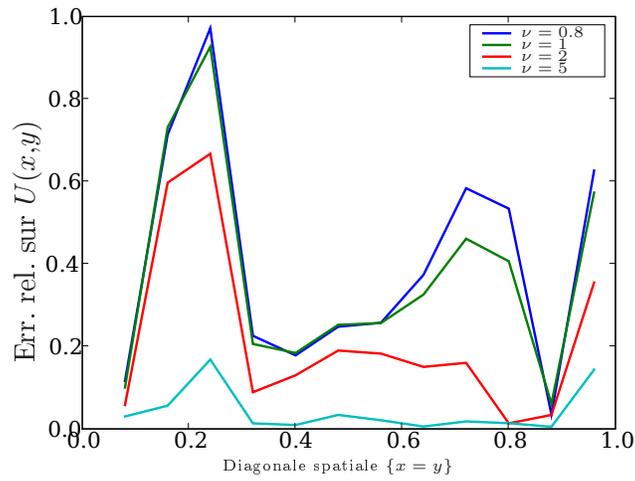
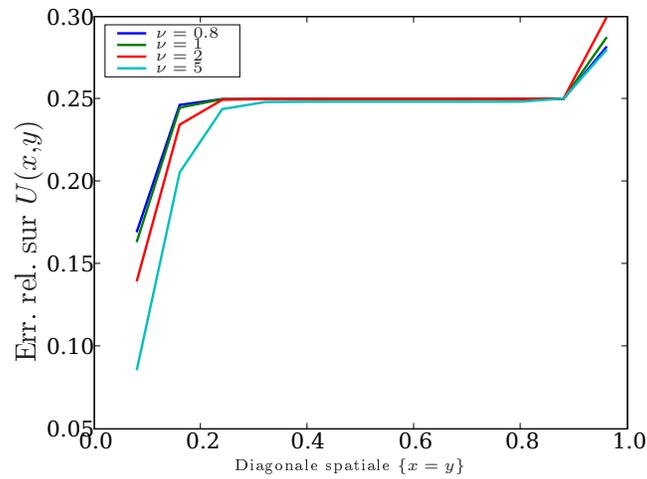
(a) Erreur relative de u_{FTCS} en fonction de ν ($\times 10^{-3}$)(b) Erreur relative de $u_{\text{invariant}}$ en fonction de ν ($\times 10^{-3}$)

FIG. 3.13 – Équation de Burgers 2D. Erreur relative sur chacune des composantes le long de la diagonale du domaine $\{x = y \mid (x, y) \in \Omega\}$ en fonction de la viscosité : (a) la composante $u_{\text{FTCS}}(x, y)$, (b) $u_{\text{invariant}}(x, y)$. La viscosité ν varie de $8 \cdot 10^{-4}$ à $5 \cdot 10^{-3}$. Le temps d'intégration est $T = 1$. Le pas de temps est de $\Delta t = 5 \cdot 10^{-2}$. Les pas d'espace sont de $\Delta x = \Delta y = 8 \cdot 10^{-2}$.

et permet de donner une solution numérique de meilleure qualité. Le fait d'avoir conservé certaines des transformations de symétrie du schéma permet de capturer plus naturellement les solutions physiques.

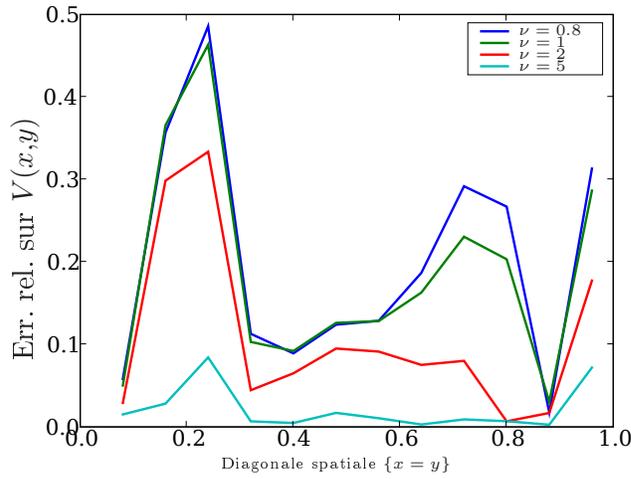
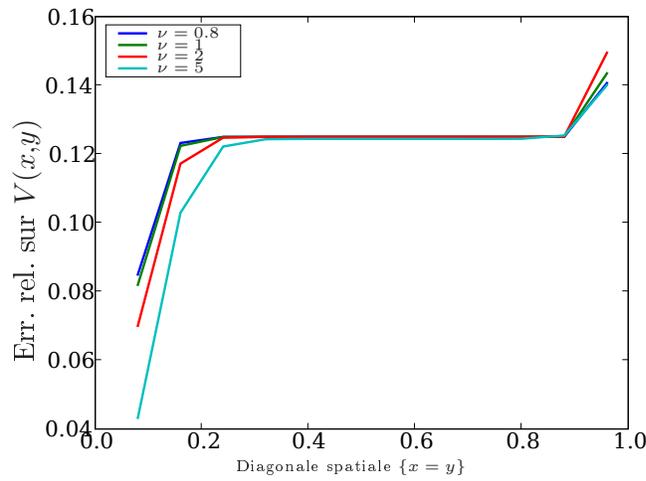
(a) Erreur relative de v_{FTCS} en fonction de ν ($\times 10^{-3}$)(b) Erreur relative de $v_{\text{invariant}}$ en fonction de ν ($\times 10^{-3}$)

FIG. 3.14 – Équation de Burgers 2D. *Erreur relative sur chacune des composantes le long de la diagonale du domaine $\{x = y \mid (x,y) \in \Omega\}$ en fonction de la viscosité : (a) la composante $v_{\text{FTCS}}(x,y)$, (b) $v_{\text{invariant}}(x,y)$. La viscosité ν varie de $8 \cdot 10^{-4}$ à $5 \cdot 10^{-3}$. Le temps d'intégration est $T = 1$. Le pas de temps est de $\Delta t = 5 \cdot 10^{-2}$. Les pas d'espace sont de $\Delta x = \Delta y = 8 \cdot 10^{-2}$.*

3.5 Consistance en symétrie des schémas

Dans cette section, on expose une propriété numérique nouvelle qui émerge de l'ensemble du panorama des méthodes d'intégration étudiées dans le présent mémoire : leur consistance en symétrie. Grâce au cadre mathématique établi, il est

possible de formaliser cette notion nouvelle des schémas numériques.

3.5.1 Définition de la consistance en symétrie

Les lois de la Physique ne dépendent pas du référentiel dans lequel elles sont observées. Il est raisonnable d'exiger d'une méthode numérique de pouvoir reproduire ce principe. La translation galiléenne correspond à un mouvement rectiligne uniforme. Elle illustre la dépendance entre la solution numérique et le repère dans lequel elle évolue. Cette dépendance par rapport au système de coordonnées viole un principe fondamental. Elle résulte de la non invariance des méthodes numériques par transformation galiléenne. Ceci a pour conséquence d'introduire des effets parasites qui dégradent la solution. Aussi, l'invariance par symétrie d'une méthode numérique permet d'éviter des effets numériques indésirables. Ce qui suppose l'existence d'erreurs numériques dues au non respect des symétries de l'équation. On propose ainsi, grâce au formalisme introduit précédemment, de définir la notion originale de *consistance en symétrie* d'un schéma numérique. Soit un schéma numérique (N, Φ) pour une EDP $\Delta(z) = 0$. On note la transformée de ce schéma par $\tilde{N}(\mathbf{z}) = N(g \cdot \mathbf{z})$, où $g \in G$ est une transformation du groupe de symétrie de $\Delta(z) = 0$. En général, $(\tilde{N}, \tilde{\Phi})$ correspond à la discrétisation d'une autre équation $\tilde{\Delta} = 0$, excepté dans le cas où le schéma est invariant par symétrie. On peut alors évaluer la capacité d'une méthode numérique à respecter les symétries d'une équation. Introduisons pour cela l'application $P : M \longrightarrow M^{\circ n}$ consistant à projeter la solution de $\Delta(z) = 0$ sur l'espace discret permettant de définir le maillage :

$$P : \quad M \longrightarrow \quad M^{\circ n}$$

$$z = (x, u) \longmapsto \mathbf{z} = (\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_n)$$

où

$$\begin{aligned} \forall i = 1, \dots, n & \quad \mathbf{z}_i = (x_1^i, \dots, x_m^i, u_1^i, \dots, u_d^i), \\ \forall j = 1, \dots, d & \quad u_j^i = u_j(x_1^i, \dots, x_m^i), \end{aligned}$$

On définit la consistance en symétrie par :

Définition 3.5.1 (Consistance en symétrie) *Soit G une symétrie pour une équation aux dérivées partielles $\Delta(z) = 0$. Soit $N(\mathbf{z}) = 0$ une discrétisation de $\Delta(z) = 0$ pour $\mathbf{z} \in U$:*

$$U = \{\mathbf{z} = P(z) \in M^{\circ n} \mid \Phi(\mathbf{z}) = 0, \Delta(z) = 0\} \quad (3.69)$$

où P est la projection définie par le couple d'applications $(\tilde{N}, \tilde{\Phi})$ où $\tilde{N}(\mathbf{z}) = N(g \cdot \mathbf{z})$ et $\tilde{\Phi}(\mathbf{z}) = \Phi(g \cdot \mathbf{z})$ pour $g \in G$ pour tout $\mathbf{z} \in M^{\circ n}$. Alors $\tilde{N}(\mathbf{z}) = 0$ est une discrétisation

pour une autre équation $\tilde{\Delta}(z) = 0$ pour $\mathbf{z} \in \tilde{U}$:

$$\tilde{U} = \{\mathbf{z} = P(z) \in M^{\circ n} \mid \tilde{\Phi}(\mathbf{z}) = 0, \tilde{\Delta}(z) = 0\} \quad (3.70)$$

On évalue l'erreur de consistance en symétrie du schéma numérique (N, Φ) , associée à la symétrie G par la différence :

$$\text{Err}_{\text{sym}} = N(\mathbf{z})\big|_U - \tilde{N}(\mathbf{z})\big|_{\tilde{U}}$$

En d'autres termes, le défaut de consistance en symétrie est défini par la différence entre l'erreur de troncature du schéma numérique avec l'EDP d'origine, et l'erreur du schéma transformé avec son EDP associée. Deux propriétés caractérisent l'erreur de consistance en symétrie d'une méthode :

1. Si la symétrie est une transformation à un paramètre, alors l'erreur de consistance en symétrie varie en fonction de ce paramètre. En particulier, un schéma invariant s'exprime indépendamment du paramètre de transformation : son défaut de symétrie est nul.
2. L'erreur de consistance en symétrie varie selon la finesse du maillage. La dégradation de la solution produite par le défaut de symétrie peut ainsi être réduite en raffinant le maillage. Ainsi, le gain de précision obtenu par une procédure d'invariance d'un schéma n'est appréciable qu'à partir d'une taille seuil du maillage.

On peut représenter la consistance en symétrie par le graphique suivant :

$$\begin{array}{ccc}
 \{\Delta(\mathbf{z}) = 0\} & \xrightarrow{g \in G} & \{\Delta(g \cdot \mathbf{z}) = 0\} & & \{\tilde{\Delta}(\mathbf{z}) = 0\} \\
 \text{discretisation} \downarrow \text{dotted} & & & & \text{discretisation} \downarrow \text{dotted} \\
 N(\mathbf{z})\big|_U + O(|h|^p) = \Delta(\mathbf{z}) & \xrightarrow{g \in G} & \tilde{N}(\mathbf{z})\big|_{\tilde{U}} + O(|\tilde{h}|^q) = \tilde{\Delta}(\mathbf{z}) & &
 \end{array}$$

3.5.2 Consistance en symétrie pour des schémas classiques

On illustre par une expérience numérique le défaut de consistance en symétrie des schémas classiques FTCS, Lax-Wendroff et Crank-Nicolson, lorsqu'ils sont appliqués à l'équation de Burgers. Cette expérience est liée à celle effectuée dans la section 3.4.2.3 traitant de l'invariance galiléenne pour les schémas invariants.

On considère les schémas non invariants suivants pour les symétries de l'équation de Burgers :

- **Schéma explicite centré en espace -FTCS.** Considérons le schéma FTCS :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{k} + \frac{u_{j+1}^{n2} - u_{j-1}^{n2}}{4h} = \nu \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} \quad (3.71)$$

L'ordre de précision pour ce schéma est $O(k, h^2)$:

$$|L(u) - L_{FTCS}(u)| = k \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \dots + h^2 \left(\frac{1}{6} \frac{\partial^3 u^2}{\partial x^3} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right) + \dots$$

La condition de stabilité est :

$$CFL \leq 1 \quad \text{et} \quad CFL/Re_h \leq \frac{1}{2}$$

- **Schéma de Lax-Wendroff.** Considérons le schéma suivant :

$$\begin{aligned} \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{k} + \frac{u_{j+1}^{n2} - u_{j-1}^{n2}}{4h} - \frac{k}{2} \left((u_{j+1}^n + u_j^n) \frac{u_{j+1}^{n2} - u_j^{n2}}{4h^2} \right. \\ \left. - (u_j^n + u_{j-1}^n) \frac{u_j^{n2} - u_{j-1}^{n2}}{4h^2} \right) - \nu \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} = 0 \end{aligned} \quad (3.72)$$

L'ordre de précision de ce schéma est $O(k^2, h^2)$; il est stable aux conditions :

$$CFL \leq 1 \quad \text{et} \quad CFL/Re_h + (CFL)^2 \leq \frac{1}{2}$$

- **Schéma de type Crank-Nicolson.** On considère cette fois-ci le schéma implicite :

$$\begin{aligned} \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{k} + \frac{u_{j+1}^{n+1} u_{j+1}^n - u_{j-1}^{n+1} u_{j-1}^n}{4h} = \nu \left(\frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{2h^2} \right. \\ \left. + \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{2h^2} \right) \end{aligned} \quad (3.73)$$

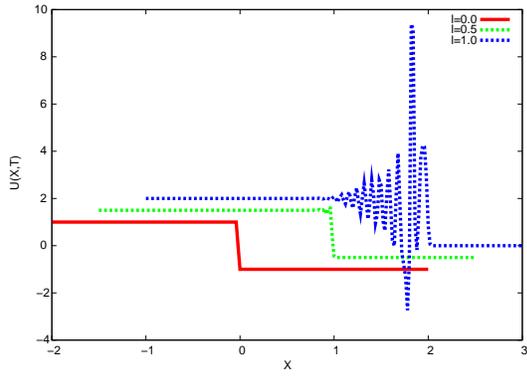
La précision du schéma est d'ordre $O(k^2, h^2)$; il est de plus inconditionnellement stable.

Expérience numérique Les tests numériques correspondent au problème suivant dans le repère d'origine :

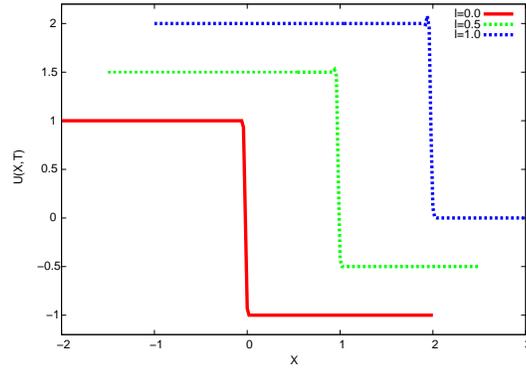
Pour $x \in [-2; 2]$ et $t \in [0; 1]$, on résout l'équation de Burgers (3.5) avec les conditions aux limites données par la solution exacte :

$$u(x, t) = \frac{-\sinh(\frac{x}{2\nu})}{\cosh(\frac{x}{2\nu}) + \exp(-\frac{t}{4\nu})}$$

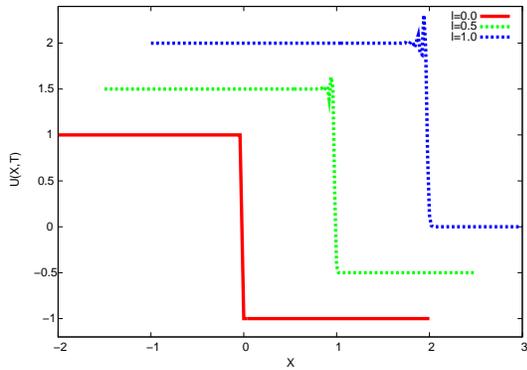
La valeur de la viscosité est $\nu = 10^{-2}$. On constate que le profil de la solution numérique associée au schéma classique (FTCS Fig. 3.15 (a)) est d'autant plus dégradé que la vitesse du référentiel d'observation est grande. Le profil de la solution associée au schéma de Lax-Wendroff (Fig. 3.15 (b)) paraît moins affecté par la transformation. On note toutefois l'apparition de petites oscillations en aval du choc lorsque la vitesse galiléenne approche de $\lambda = 1$. Le schéma implicite de Crank-Nicolson (Fig. 3.15 (c)) est lui aussi sensible à la vitesse galiléenne.



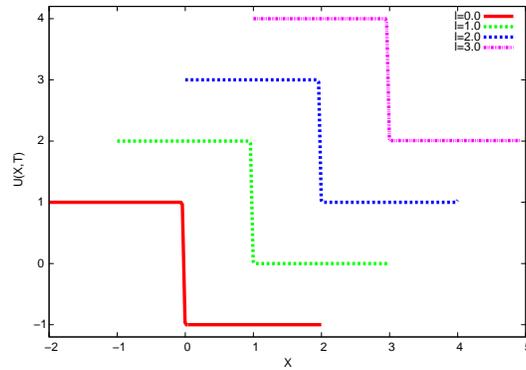
(a) Schéma FTCS



(b) Schéma Lax-Wendroff



(c) Schéma Crank-Nicolson



(d) Solution exacte

FIG. 3.15 – Équation de Burgers 1D. Profils des solutions numériques et de la solution exacte pour différentes vitesses d'entraînement $\lambda = 0, \lambda = 0.5$ et $\lambda = 1$. Le pas d'espace vaut $h = 2.10^{-2}$, et la viscosité est de $\nu = 5.10^{-3}$. Le CFL est égal à $1/2$ référentiel d'origine.

3.6 Commentaires

Dans ce chapitre, on a détaillé une méthode d'invariantisation de schémas numériques. La méthode est basée sur le concept de repères mobiles (Déf. 3.3.4). Une première application au schéma FTCS et au schéma upwind, associés à l'équation de convection-diffusion 1D a été réalisée et comparée avec les schémas d'origines. On a montré le gain en stabilité et en précision que peut avoir cette procédure d'invariantisation (Fig. 3.1, 3.2 et 3.3). Cependant, la construction des repères mobiles

s'effectue sur des considérations purement géométriques, dépendantes de la nature de l'équation (voire même de ses solutions). Il n'existe alors pas de garantie sur les propriétés numériques du schéma invariant obtenu. On a alors proposé d'ajouter à la méthode de construction de repères mobiles une contrainte sur l'ordre de précision du schéma. On a ensuite testé ce développement de la procédure sur l'équation de Burgers 1D et 2D. On a là encore obtenu un gain en stabilité (Fig. 3.5) et la précision a été améliorée (Fig. 3.7). Sur le plan physique, un des avantages de la préservation des symétries est de respecter l'invariance galiléenne (Fig. 3.6). On a montré qu'il n'en était pas de même pour la plupart des schémas classiques (Fig. 3.15).

Cette méthode possède les avantages de pouvoir s'appliquer à toute équation, pourvu que l'on connaisse son groupe de symétrie. Elle permet de rendre invariant un schéma numérique quelconque. Par ailleurs, elle s'exprime au travers d'un cadre mathématique rigoureux. Il a été possible de définir la notion nouvelle de *consistance en symétrie* des schémas numériques (Déf. 3.5.1).

Conclusion générale et Perspectives

L'objectif de ce mémoire est d'évaluer de façon prospective dans quelle mesure les méthodes d'intégration géométrique peuvent s'appliquer aux équations de la mécanique des fluides. De récents travaux ont montré que l'utilisation des groupes de symétrie, en turbulence notamment, permet d'obtenir des informations sur la structure de l'ensemble des solutions d'un système. Les développements théoriques, comme les modèles de sous-maille respectant le groupe de symétrie des équations de Navier-Stokes, ont confirmé la pertinence de l'approche [127] [129]. Sur le plan numérique, les intégrateurs géométriques commencent à démontrer leur efficacité dans la simulation des équations aux dérivées partielles. Cependant, à l'heure actuelle, on ne connaît pas d'intégrateur géométrique qui soit suffisamment générique pour pouvoir être appliqué à n'importe quelle équation de la physique, et dont les performances égalent celles des techniques numériques sophistiquées actuelles. Enfin, s'il apparaît nécessaire de prendre en compte les propriétés géométriques des équations, il semble aussi que cela ne suffise pas à reproduire fidèlement leurs solutions [32].

Au cours de ce mémoire, on a dans un premier temps présenté les intégrateurs symplectiques. Ce sont des méthodes d'intégration construites pour conserver la structure symplectique des systèmes hamiltoniens. Au travers d'exemples pédagogiques, on a montré la nécessité de conserver cette structure pour reproduire correctement les solutions, notamment sur de longs temps d'intégration. En conclusion de ce chapitre, on a présenté une application d'un intégrateur symplectique sur un problème issu de l'hydrodynamique. Ensuite, on a rappelé le principe de construction des intégrateurs variationnels, ainsi que leurs propriétés. Ce sont des méthodes qui permettent de traduire les propriétés variationnelles des systèmes lagrangiens, comme les lois de conservation données par le théorème de Noether. Cependant, la plupart des équations de la mécanique des fluides ne dérive pas d'un Lagrangien. C'est le cas notamment des équations d'évolution. On a alors proposé une méthode pour construire des intégrateurs bivariationnels adaptés aux EDP d'évolution. Elle est basée sur l'ajout d'une équation adjointe. Cependant, cette approche souffre de limitations dues à l'arbitraire du choix de la variable duale. De plus, les lois de conservation déduites du théorème de Noether sont issues des symétries variationnelles. Celles-ci ne forment qu'un sous-groupe du groupe de symétrie des équations

150 Conclusion

d'Euler-Lagrange. Pour rendre compte de toute la structure d'une équation, il faut donc considérer directement son groupe de symétrie. Ainsi, il est alors aussi possible de traiter n'importe quelle équation aux dérivées partielles. Dans le dernier chapitre, constituant la partie principale de la thèse, on a exposé une méthode rendant invariant un schéma numérique associé à une EDP quelconque. La méthode est basée sur le concept de repères mobiles. Elle a été développée par M. Fels et P.J. Olver [42] [43], et mise en application par P. Kim [79] [80]. Après une application à l'équation de convection-diffusion 1D permettant d'apprécier les performances d'une telle approche, on a proposé un développement de la méthode. Cette contribution consiste à construire les repères mobiles selon des contraintes numériques, afin de garantir l'ordre de consistance du schéma invariant qui résulte de la procédure d'*invariantisation*. L'équation de Burgers 1D et 2D a servi d'équation modèle pour tester cette approche. Une plus grande robustesse, la non dégradation par des oscillations numériques et le respect du principe fondamental d'invariance galiléenne sont les gains que l'on a montré. Pour conclure, on a formulé mathématiquement une notion nouvelle qui sous-tend l'ensemble des résultats obtenus. Il s'agit de la *consistance en symétrie* des schémas numériques. Elle est définie comme la capacité d'un schéma à respecter le groupe de symétrie de l'équation continue. Elle postule aussi l'existence pour la taille du maillage d'un seuil à partir duquel les schémas invariants sont plus performants que les schémas classiques.

Les perspectives qui s'ouvrent à l'issue de ce travail sont multiples :

1. Sur le plan des applications, il serait intéressant d'utiliser un intégrateur symplectique pour étudier les équations d'Euler-fluide sous leur forme hamiltonienne. Comme il est possible de passer d'une formulation hamiltonienne à une formulation lagrangienne grâce à la transformée de Legendre, il serait aussi envisageable d'établir un intégrateur variationnel pour les équations d'Euler-fluide. L'application d'un intégrateur invariant construit par la méthode des repères mobiles aux équations de Navier-Stokes est aussi une application qui se place dans la continuité de ce travail. Il faudrait de plus tester les méthodes sur des systèmes réels, et non pas sur des équations modèles.
2. Sur le plan du développement de la méthode de construction des schémas invariants utilisant les repères mobiles, on envisage de prendre en compte d'autres conditions numériques pour construire les repères mobiles, comme la stabilité et la dispersion numérique. Pour les EDP lagrangiennes, on pourrait concevoir un intégrateur variationnel construit à partir d'une action lagrangienne discrète dépendant de paramètres. Ces paramètres seraient les repères mobiles associés au groupe de symétrie des équations d'Euler-Lagrange (qui contient le groupe des symétries variationnelles). Pour les EDP en général, il serait intéressant d'établir un critère de détermination de la variable duale pour construire des intégrateurs bi-variationnels consistants.

3. Enfin, sur le plan purement théorique, il faut caractériser la consistance en symétrie : par exemple, en calculant pour différents schémas la taille seuil du maillage à partir de laquelle le défaut de symétrie produit des dégradations numériques importantes. Cela correspondrait à la taille du maillage à partir de laquelle les schémas invariants seraient plus performants.

Annexe A

Intégrateurs “multisymplectiques”

A.1 Introduction

Une extension naturelle de la structure symplectique à une certaine famille d'équations aux dérivées partielles (EDP) consiste à considérer la structure symplectique sur la dimension spatiale. Cela permet ensuite d'appliquer les méthodes d'intégration symplectique pour préserver la forme symplectique spatiale au cours du temps :

Exemple A.1.1 (équation des ondes semi-linéaire) *Soit l'équation sur un domaine unidimensionnel $[0, L]$:*

$$u_{tt} = u_{xx} - V'(u)$$

avec des conditions de bords périodiques : $u(0, t) = u(L, t)$ pour $t \geq 0$.

En considérant l'espace C_L^∞ des fonctions $C^\infty[0, L]$ qui sont L -périodiques, cette équation peut se mettre sous la forme d'un système portant sur les fonctions $(u, v) = (u(\cdot, t), v(\cdot, t)) \in C_L^\infty \times C_L^\infty$:

$$\frac{du}{dt} = v, \quad \frac{dv}{dt} = u_{xx} - V'(u),$$

Ce système correspond à un système hamiltonien¹, où le Hamiltonien est une fonc-

¹la dérivée est une dérivée variationnelle définie pour toute fonctionnelle \mathcal{F} sur $(C_L^\infty)^m$ par :

$$\int_0^L \frac{\delta \mathcal{F}[\mathbf{z}]}{\delta \mathbf{z}} \delta \mathbf{z} dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} (\mathcal{F}[\mathbf{z} + \varepsilon \delta \mathbf{z}] - \mathcal{F}[\mathbf{z}])$$

tionnelle \mathcal{H} sur $C_L^\infty \times C_L^\infty$:

$$\frac{du}{dt} = \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta v}, \quad \frac{dv}{dt} = -\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta u}, \quad \mathcal{H}[u,v] = \int_0^L \frac{v^2}{2} + \frac{u_x^2}{2} + V(u)dx,$$

En ayant exhibé une formulation symplectique associée à la dimension spatiale de l'équation des ondes non linéaire, il est possible d'y appliquer une méthode d'intégration symplectique.

Dans un premier temps, il faut discrétiser spatialement le système différentiel :

$$\frac{du_i}{dt} = v_i, \quad \frac{dv_i}{dt} = -\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} - V'(u_i),$$

où le Hamiltonien discret est :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{v_i^2}{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} \right)^2 + V(u_i)$$

Il est ensuite possible d'appliquer un intégrateur symplectique, par exemple la méthode d'Euler symplectique :

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = v_i^{n+1}, \quad \frac{v_i^{n+1} - v_i^n}{\Delta t} = \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} - V'(u_i^n),$$

Ce qui correspond au schéma leapfrog classique centré en espace :

$$\frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{\Delta t^2} = \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} - V'(u_i^n)$$

Cependant, ce schéma n'est que symplectique (et non multisymplectique) dans la mesure où seule la forme symplectique spatiale est conservée au cours du temps.

Il est en effet possible, dans certain cas, d'exhiber une forme symplectique associée à la dimension temporelle. Un intégrateur multisymplectique sera alors un intégrateur préservant les formes symplectiques dans chacune des directions, au sens présenté ci-dessous. Par ailleurs, la pierre angulaire de cette construction d'intégrateurs symplectiques pour les EDP hamiltoniennes réside dans la possibilité de discrétiser la fonctionnelle hamiltonienne de sorte que :

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta x} \nabla_{\mathbf{z}} H = \delta_{\mathbf{z}} \mathcal{H}(\mathbf{z})$$

D'une part, cette approximation n'est envisageable que pour certains éléments de la famille des *EDP hamiltoniennes* [84]. D'autre part, elle n'est en général pas possible ; c'est notamment le cas des équations d'Euler pour un fluide parfait incompressible².

Cependant, une alternative évitant de passer par cette troncature spatiale est proposée par [14]. Elle consiste à reproduire formellement la structure symplectique

²sauf dans le cas particulier bidimensionnel avec des conditions de bords periodiques

dans les directions spatiale d'une part, et temporelle d'autre part. Il en découle des lois structurelles de conservation locale, analogues aux cas des systèmes hamiltoniens, telles que la *multisymplecticité*, la conservation d'un flux d'énergie locale et celle d'une quantité de mouvement locale. Ce sont d'ailleurs ces lois de conservation qui définissent alors l'intégrateur multisymplectique (IMS). Sur le plan des méthodes numériques, la reproduction formelle de la structure symplectique permet d'étendre les méthodes numériques ayant un pendant symplectique (type Euler, Runge-Kutta, méthodes pseudo-spectrales, méthodes basées sur l'analyse rétrograde...). À l'instar des méthodes symplectiques, la performance des IMS se trouve dans leur comportement sur des temps longs et leur stabilité.

Cette partie s'organise comme suit : on établit dans un premier temps le formalisme multisymplectique introduit par Bridges [14]. On applique ce formalisme sur les trois exemples essentiels de la littérature à ce sujet : l'équation des ondes non linéaire, l'équation KdV et celle de Schrödinger non linéaire. Ensuite on présente les intégrateurs multisymplectiques dérivés de cette approche, ainsi que leur adaptation aux méthodes classiques (Euler, Runge-Kutta). Enfin, on illustre les performances de ces intégrateurs sur une application inspirée de la littérature [88] [155].

A.2 Structure multisymplectique

A.2.1 Définitions

Définition A.2.1 (Structure multisymplectique) *Soit \mathbf{M} et \mathbf{K} des matrices antisymétriques sur \mathbb{R}^n , $n \geq 3$, et soit $S : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ une fonction suffisamment lisse. Alors pour $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$, un système hamiltonien, d'Hamiltonien S , possède une structure multisymplectique s'il peut s'écrire sous la forme :*

$$\mathbf{M}\mathbf{z}_t + \mathbf{K}\mathbf{z}_x = \nabla_{\mathbf{z}}S(\mathbf{z}) \tag{A.1}$$

La loi de conservation de la symplecticité s'exprime via deux 2-formes pré-symplectiques ω et κ^3 ; ces deux 2-formes s'écrivant à l'aide des matrices de structure antisymé-

³elles induisent des structures symplectiques sur deux sous-espaces de dimension paire de \mathbb{R}^n , associés aux variables temporelle et d'espace. Le rang de \mathbf{M} et \mathbf{K} n'est pas nécessairement maximal sur tout \mathbb{R}^n . Les 2-formes ω et κ sont dites pré-symplectiques : si le rang de \mathbf{M} (respect. \mathbf{K}) est $m \leq n$ (respect. $k \leq n$), alors ω (respect. κ) induit une structure symplectique sur \mathbb{R}^m (respectivement sur \mathbb{R}^k). En effet, la bilinéarité et la non-dégénérescence de ω et de κ proviennent de la bilinéarité et de la non-dégénérescence

triques \mathbf{M} et \mathbf{K} . On pose :

$$\omega(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) = \langle \mathbf{M}\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2 \rangle, \quad \kappa(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) = \langle \mathbf{K}\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2 \rangle, \quad \forall \mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2 \in \mathbb{R}^n$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est le produit scalaire euclidien sur \mathbb{R}^n .

Avec le formalisme des formes différentielles, particulièrement adapté pour décrire la géométrie symplectique, les deux 2-formes présymplectiques s'écrivent :

$$\omega = \frac{1}{2}(d\mathbf{z} \wedge \mathbf{M}d\mathbf{z}), \quad \kappa = \frac{1}{2}(d\mathbf{z} \wedge \mathbf{K}d\mathbf{z}),$$

Conservation de la multisymplecticité Le système multisymplectique (A.1) possède la loi de conservation de symplecticité :

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial \kappa}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.2})$$

En effet, pour toute solution de l'équation variationnelle associée :

$$\mathbf{M}d\mathbf{z}_t + \mathbf{K}d\mathbf{z}_x = D_{zz}S(\mathbf{z})d\mathbf{z}$$

on a :

$$\begin{aligned} 2\partial_t \omega &= d\mathbf{z}_t \wedge \mathbf{M}d\mathbf{z} + d\mathbf{z} \wedge \mathbf{M}d\mathbf{z}_t \\ &= -(\mathbf{M}d\mathbf{z}_t) \wedge d\mathbf{z} + d\mathbf{z} \wedge \mathbf{M}d\mathbf{z}_t \\ &= -(D_{zz}S(\mathbf{z})d\mathbf{z} - \mathbf{K}d\mathbf{z}_x) \wedge d\mathbf{z} + d\mathbf{z} \wedge (D_{zz}S(\mathbf{z})d\mathbf{z} - \mathbf{K}d\mathbf{z}_x) \\ &= -(d\mathbf{z}_x \wedge \mathbf{K}d\mathbf{z} + d\mathbf{z} \wedge \mathbf{K}d\mathbf{z}_x) \\ &= -(d\mathbf{z} \wedge \mathbf{K}d\mathbf{z})_x \\ &= -2\partial_x \kappa \end{aligned}$$

car \mathbf{M} et \mathbf{K} sont antisymétriques, et $D_{zz}S(z)$ est symétrique.

Conservation de l'énergie Si les matrices \mathbf{M} et \mathbf{K} , et si S ne dépendent pas explicitement de t , alors il y a conservation de l'énergie :

$$E(\mathbf{z})_t + F(\mathbf{z})_x = 0$$

avec

$$E(\mathbf{z}) = S(\mathbf{z}) - \frac{1}{2}\langle \mathbf{K}\mathbf{z}_x, \mathbf{z} \rangle, \quad F(\mathbf{z}) = \frac{1}{2}\langle \mathbf{K}\mathbf{z}_t, \mathbf{z} \rangle,$$

du produit scalaire euclidien. Leur caractère antisymétrique est obtenue grâce au fait que $\mathbf{M} = -\mathbf{M}^T$ et $\mathbf{K} = -\mathbf{K}^T$. On associe alors les espaces symplectiques (\mathbb{R}^m, ω) et (\mathbb{R}^k, κ) aux variables de temps et d'espace.

Conservation de la quantité de mouvement De la même manière, si les matrices \mathbf{M} et \mathbf{K} , et si S ne dépendent pas explicitement de x , alors il y a conservation de la quantité de mouvement :

$$I(\mathbf{z})_t + G(\mathbf{z})_x = 0$$

avec

$$I(\mathbf{z}) = \frac{1}{2} \langle \mathbf{M} \mathbf{z}_x, \mathbf{z} \rangle, \quad G(\mathbf{z}) = S(\mathbf{z}) - \frac{1}{2} \langle \mathbf{M} \mathbf{z}_t, \mathbf{z} \rangle,$$

A.2.2 Exemples

Ainsi, plusieurs EDP peuvent se mettre sous la forme multisymplectique. Parmi les exemples les plus courants de la littérature, on trouve les équations des ondes semi-linéaire (conservative), l'équation de Schrödinger non-linéaire et l'équation KdV (dispersives).

On rappelle pour chacune de ces équations leur formulation multisymplectique.

Exemple A.2.1 (équation des ondes) On reprend sur l'équation des ondes :

$$u_{tt} = u_{xx} - V'(u)$$

L'équation des ondes est équivalente au système :

$$-v_t + w_x = V'(u), \quad u_t = v, \quad u_x = -w,$$

En prenant comme variable $\mathbf{z} = (u, v, w)$, le système se met sous la forme multisymplectique

$$\mathbf{M} \mathbf{z}_t + \mathbf{K} \mathbf{z}_x = \nabla_{\mathbf{z}} S(\mathbf{z})$$

avec :

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{K} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

et $S(\mathbf{z}) = \frac{1}{2}(v^2 - w^2) + V(u)$.

Les deux 2-formes définissant la structure multisymplectique s'écrivent :

$$\omega = dv \wedge du, \quad \kappa = du \wedge dw,$$

L'équation de conservation locale de l'énergie est $E_t + F_x = 0$ où

$$E = \frac{1}{2}(v^2 + w^2) + V(u), \quad F = -vw,$$

Celle de la conservation locale de la quantité de mouvement est $I_t + G_x = 0$ avec

$$I = -vw, \quad G = \frac{1}{2}(w^2 + v^2) + V(u),$$

Exemple A.2.2 (L'équation KdV) Soit l'équation de Korteweg-de Vries :

$$u_t + uu_x + u_{xxx} = 0$$

Il s'agit d'une équation hyperbolique modélisant les vagues de faible profondeur. Parmi les solutions de cette EDP, on trouve les ondes se propageant sans déformation (non dissipative) dans un milieu non-linéaire et dispersif (la vitesse de phase y est différente de la vitesse de groupe) (solitons).

En considérant le point $\mathbf{z} = (\phi, u, v, w)^T$ défini par le changement de variables :

$$u = \phi_x, \quad v = u_x, \quad w = \frac{1}{2}\phi_t + v_x + V'(u), \quad \frac{1}{2}u_t + w_x = 0$$

où $V(u) = \frac{u^3}{6}$, l'équation KdV s'écrit sous la forme (A.1) :

$$\mathbf{M}\mathbf{z}_t + \mathbf{K}\mathbf{z}_x = \nabla_{\mathbf{z}}S(\mathbf{z})$$

avec :

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ -1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{K} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

et d'Hamiltonien $S = \frac{1}{2}v^2 - uw + V(u)$. Les deux 2-formes définissant la structure multisymplectique s'écrivent :

$$\omega = \frac{1}{2}d\phi \wedge du, \quad \kappa = d\phi \wedge dw + dv \wedge du,$$

L'équation de conservation locale de l'énergie est $E_t + F_x = 0$ où

$$E = -\frac{1}{2}(uw + \phi w_x - v_x u) + V(u), \quad F = \frac{1}{2}(\phi w_t - v_t u - w_t \phi_t + v u_t),$$

Celle de la conservation locale de la quantité de mouvement est $I_t + G_x = 0$ avec

$$I = \frac{1}{4}(v\phi u - u^2), \quad G = \frac{1}{2}v^2 - \frac{1}{4}(u_t \phi - \phi_t u) - uw + V(u),$$

Exemple A.2.3 (Schrödinger non-linéaire) L'équation non-linéaire de Schrödinger s'écrit :

$$i\Psi_t + \Psi_{xx} + |\Psi|^2\Psi = 0$$

Elle se met sous la forme multisymplectique en posant comme variable $\mathbf{z} = (p, q, v, w)$, avec $\Psi = p + iq$:

$$\mathbf{M}\mathbf{z}_t + \mathbf{K}\mathbf{z}_x = \nabla_{\mathbf{z}}S(\mathbf{z})$$

avec :

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{K} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

et $S(\mathbf{z}) = \frac{1}{2}(p^2 + q^2)^2 + \frac{1}{2}(v^2 + w^2)$.

Ce qui revient au système d'équations du première ordre :

$$-q_t + v_x = -2(q^2 + p^2)p, \quad p_t + w_x = -2(q^2 + p^2)q, \quad p_x = v, \quad q_x = w,$$

L'équation de conservation locale de l'énergie s'écrit $E_t + F_x = 0$ où

$$E = \frac{1}{2}((p^2 + q^2)^2 - v^2 - w^2), \quad F = vp_t + wq_t,$$

Celle de la conservation locale de la quantité de mouvement est $I_t + G_x = 0$ avec

$$I = \frac{1}{2}(p^2 + q^2)^2, \quad G = qv - pw,$$

A.3 Schémas multisymplectiques.

De la même manière que pour les ODE où certaines familles d'intégrateurs ont leur versant symplectique (méthode de partitionnement, de composition, méthode de type Runge-Kutta), il existe des intégrateurs multisymplectiques pour les EDP se construisant à partir de méthodes symplectiques standards. Cependant, il n'existe pas toujours une formulation algorithmique générale quelque soit l'EDP considérée.

Définition A.3.1 (Schéma multisymplectique) *Un schéma pour l'équation (A.1) est dit multisymplectique s'il vérifie une forme discrète de la loi de conservation (A.2).*

Cette définition littérale implique que la loi de conservation mutlisymplectique diffère d'un intégrateur à un autre, puisqu'il suffit de préserver exactement une approximation.

De plus, on peut faire de l'analyse rétrograde (BEA) sur ces méthodes multisymplectiques [112] [74]. Et pour le cas des schémas multisymplectiques linéaires ($\nabla_z S(\mathbf{z}) = A\mathbf{z}$), on peut y faire de l'analyse sur la relation de dispersion [111].

A.3.1 Schémas multisymplectiques en boîte

Ce sont des schémas dont la discrétisation s'effectue sur les points d'un même *stencil* ; le maillage associé à chacune des variables discrètes est le même. Parmi les plus connus, il y a la méthode d'Euler multisymplectique, la méthode du point milieu et celle de la boîte de Preissmann.

A.3.1.1 Euler multisymplectique

On sépare les matrices antisymétriques :

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_+ + \mathbf{M}_-, \quad \mathbf{K} = \mathbf{K}_+ + \mathbf{K}_-,$$

où $\mathbf{M}_+^T = -\mathbf{M}_-$ et $\mathbf{K}_+^T = -\mathbf{K}_-$. En posant les opérateurs de différences finies :

$$D_t^\pm \mathbf{z}_i^n = \pm \frac{\mathbf{z}_i^{n\pm 1} - \mathbf{z}_i^n}{\Delta t}, \quad D_x^\pm \mathbf{z}_i^n = \pm \frac{\mathbf{z}_{i\pm 1}^n - \mathbf{z}_i^n}{\Delta x},$$

En utilisant une approximation d'Euler symplectique sur chacune des variables, on obtient le schéma d'Euler multisymplectique :

$$\mathbf{M}_+ D_t^+ \mathbf{z}_i^n + \mathbf{M}_- D_t^- \mathbf{z}_i^n + \mathbf{K}_+ D_x^+ \mathbf{z}_i^n + \mathbf{K}_- D_x^- \mathbf{z}_i^n = \nabla_z S(\mathbf{z}_i^n)$$

L'ordre de ce schéma est $O(\Delta t + \Delta x^2)$.

Conservation locale de la multisymplecticité La méthode d'Euler multisymplectique vérifie une version discrète de la loi de conservation multisymplectique (A.2) :

$$D_t^+ \omega_i^n + D_x^+ \kappa_i^n = 0$$

où

$$\omega_i^n = d\mathbf{z}_i^{n-1} \wedge \mathbf{M}_+ d\mathbf{z}_i^n, \quad \kappa_i^n = d\mathbf{z}_{i-1}^n \wedge \mathbf{K}_+ d\mathbf{z}_i^n,$$

pour toute solution vérifiant l'équation variationnel associée au schéma :

$$\mathbf{M}_+ D_t^+ d\mathbf{z}_i^n + \mathbf{M}_- D_t^- d\mathbf{z}_i^n + \mathbf{K}_+ D_x^+ d\mathbf{z}_i^n + \mathbf{K}_- D_x^- d\mathbf{z}_i^n = \nabla_z S(\mathbf{z}_i^n) d\mathbf{z}_i^n$$

En effet, en prenant le produit extérieur de cette équation avec $d\mathbf{z}_i^n$, on a d'une part :

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_+ D_t^+ d\mathbf{z}_i^n \wedge d\mathbf{z}_i^n + \mathbf{M}_- D_t^- d\mathbf{z}_i^n \wedge d\mathbf{z}_i^n &= \mathbf{M}_+ \left(\frac{\mathbf{z}_i^{n+1} - \mathbf{z}_i^n}{\Delta t} \right) \wedge d\mathbf{z}_i^n - \mathbf{M}_- \left(\frac{\mathbf{z}_i^{n-1} - \mathbf{z}_i^n}{\Delta t} \right) \wedge d\mathbf{z}_i^n \\ &= \mathbf{M}_+ \left(\frac{\mathbf{z}_i^{n+1} - \mathbf{z}_i^n}{\Delta t} \right) \wedge d\mathbf{z}_i^n + \left(\frac{\mathbf{z}_i^{n-1} - \mathbf{z}_i^n}{\Delta t} \right) \wedge \mathbf{M}_+ d\mathbf{z}_i^n \\ &= -\frac{1}{\Delta t} (d\mathbf{z}_i^n \wedge \mathbf{M}_+ d\mathbf{z}_i^{n+1} + d\mathbf{z}_i^{n-1} \wedge \mathbf{M}_+ d\mathbf{z}_i^n) \\ &= -D_t^+ \omega_i^n \end{aligned}$$

et d'autre part, un calcul analogue donne :

$$\mathbf{K}_+ D_x^+ dz_i^n \wedge dz_i^n + \mathbf{K}_- D_x^- dz_i^n \wedge dz_i^n = -D_x^+ \kappa_i^n$$

Enfin, comme $D_{zz}S$ est symétrique, son produit extérieur avec dz_i^n est nul. Ce qui montre que le schéma est multisymplectique au sens de la définition (A.3.1).

Conservation locale de l'énergie discrète La loi de conservation de l'énergie s'écrit sous forme semi-discrète :

$$\partial_t E_i + D_x^+ F_i = 0$$

avec

$$E_i = S(\mathbf{z}_i) + \langle D_x^- \mathbf{z}_i, \mathbf{K}_+ \mathbf{z}_i \rangle, \quad F_i = - \langle \partial_t \mathbf{z}_{i-1}, \mathbf{K}_+ \mathbf{z}_i \rangle,$$

Conservation locale de la quantité de mouvement discrète La loi de conservation de la quantité de mouvement s'écrit sous forme semi-discrète :

$$D_t^+ I^n + \partial_x G^n = 0$$

avec

$$I^n = - \langle \partial_x \mathbf{z}^{n-1}, \mathbf{M}_+ \mathbf{z}^n \rangle, \quad G^n = S(\mathbf{z}^n) + \langle D_t^- \mathbf{z}^n, \mathbf{M}_+ \mathbf{z}^n \rangle,$$

A.3.1.2 Schéma de la boîte de Preissman.

On illustre cette méthode multisymplectique à partir de la méthode implicite du point milieu. On utilise la notation :

$$\mathbf{z}_{i+\frac{1}{2}}^n = \frac{\mathbf{z}_{i+1}^n + \mathbf{z}_i^n}{2}, \quad \mathbf{z}_i^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\mathbf{z}_i^{n+1} + \mathbf{z}_i^n}{2}, \quad \mathbf{z}_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{4}(\mathbf{z}_{i+1}^{n+1} + \mathbf{z}_{i+1}^n + \mathbf{z}_i^{n+1} + \mathbf{z}_i^n),$$

Soit un système hamiltonien possédant une structure multisymplectique (A.1). Alors le schéma suivant :

$$\mathbf{M} D_t^+ \mathbf{z}_{i+\frac{1}{2}}^n + \mathbf{K} D_x^+ \mathbf{z}_i^{n+\frac{1}{2}} = \nabla_z S(\mathbf{z}_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})$$

est multisymplectique. L'ordre de ce schéma est $O(\Delta t^2 + \Delta x^2)$.

Conservation locale de la multisymplecticité La méthode (A.3.1) vérifie une version discrète de la loi de conservation multisymplectique (A.2) :

$$D_t^+ \omega_{i+\frac{1}{2}}^n + D_x^+ \kappa_i^{n+\frac{1}{2}} = 0$$

où

$$\omega_i^n = \frac{1}{2}(dz_i^n \wedge \mathbf{M}dz_i^n), \quad \kappa_i^n = \frac{1}{2}(dz_i^n \wedge \mathbf{K}dz_i^n),$$

En effet, en prenant le produit extérieur de

$$\mathbf{M}D_t^+ dz_{i+\frac{1}{2}}^n + \mathbf{K}D_x^+ dz_i^{n+\frac{1}{2}} = D_{zz}S(dz_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})dz_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}$$

avec $dz_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}$, on a d'une part :

$$\begin{aligned} dz_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \wedge \mathbf{M}D_t^+ dz_{i+\frac{1}{2}}^n &= \frac{1}{2\Delta t} \left((dz_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} + dz_{i+\frac{1}{2}}^n) \wedge \mathbf{M}(dz_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - dz_{i+\frac{1}{2}}^n) \right) \\ &= \frac{1}{2\Delta t} \left(dz_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} \wedge \mathbf{M}dz_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} + dz_{i+\frac{1}{2}}^n \wedge \mathbf{M}dz_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right. \\ &\quad \left. - dz_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} \wedge \mathbf{M}dz_{i+\frac{1}{2}}^n - dz_{i+\frac{1}{2}}^n \wedge \mathbf{M}dz_{i+\frac{1}{2}}^n \right) \\ &= \frac{1}{\Delta t} (\omega_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \omega_{i+\frac{1}{2}}^n) \\ &= D_t^+ \omega_{i+\frac{1}{2}}^n \end{aligned}$$

et d'autre part un calcul analogue donne :

$$dz_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \wedge \mathbf{K}D_x^+ dz_i^{n+\frac{1}{2}} = D_x^+ \kappa_i^{n+\frac{1}{2}}$$

Enfin, comme $D_{zz}S$ est symétrique, son produit extérieur avec $dz_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}$ est nul. Ce qui montre que le schéma est multisymplectique au sens de la définition (A.3.1).

Remarque 11 La discrétisation centrée de $\mathbf{z}_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}$ est nécessaire à la multisymplecticité de la méthode.

Conservation locale de l'énergie discrète Une autre des propriétés de la forme multisymplectique des EDP hamiltoniennes, discrétisée par la méthode de la boîte centrée est la conservation de l'énergie discrète :

$$D_t^+ E_{i+\frac{1}{2}}^n + D_x^+ F_i^{n+\frac{1}{2}} = 0$$

où

$$E_i^n = S(\mathbf{z}_i^n) - \frac{1}{2\Delta x} \langle \mathbf{K}(\mathbf{z}_{i+1}^n - \mathbf{z}_i^n), \mathbf{z}_i^n \rangle, \quad F_i^n = \frac{1}{2\Delta t} \langle \mathbf{K}(\mathbf{z}_i^{n+1} - \mathbf{z}_i^n), \mathbf{z}_i^n \rangle,$$

La conservation de l'énergie est exacte lorsque le Hamiltonien est linéaire.

Conservation locale de la quantité de mouvement discrète Une autre des propriétés de la forme multisymplectique des EDPs hamiltoniennes, discrétisée par la méthode de la boîte centrée est la conservation de l'énergie discrète :

$$D_t^+ I_{i+\frac{1}{2}}^n + D_x^+ G_i^{n+\frac{1}{2}} = 0$$

où

$$I_i^n = \frac{1}{2\Delta x} \langle \mathbf{M}(\mathbf{z}_{i+1}^n - \mathbf{z}_i^n), \mathbf{z}_i^n \rangle, \quad G_i^n = S(\mathbf{z}_i^n) - \frac{1}{2\Delta t} \langle \mathbf{M}(\mathbf{z}_i^{n+1} - \mathbf{z}_i^n), \mathbf{z}_i^n \rangle,$$

La conservation de la quantité de mouvement est exacte lorsque le Hamiltonien est linéaire.

A.3.1.3 Méthode du point milieu explicite

Il s'agit du versant explicite de la méthode précédente.

On introduit les opérateurs de différences finies :

$$D_t^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(D_t^+ + D_t^-), \quad D_x^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(D_x^+ + D_x^-),$$

Le schéma multisymplectique du point milieu s'écrit alors :

$$\mathbf{M}D_t^{\frac{1}{2}}\mathbf{z}_i^n + \mathbf{K}D_x^{\frac{1}{2}}\mathbf{z}_i^n = \nabla_z S(\mathbf{z}_i^n)$$

Conservation locale de la multisymplecticité Cette méthode multisymplectique vérifie une version discrète de la loi de conservation multisymplectique (A.2) :

$$D_t^+ \omega_i^n + D_x^+ \kappa_i^n = 0$$

où

$$\omega_i^n = d\mathbf{z}_i^n \wedge \mathbf{M}d\mathbf{z}_i^{n-1}, \quad \kappa_i^n = d\mathbf{z}_i^n \wedge \mathbf{K}d\mathbf{z}_{i-1}^n,$$

Conservation locale de l'énergie discrète La loi de conservation de l'énergie s'écrit sous forme semi-discrète :

$$\partial_t E_i + D_x^+ F_{i-\frac{1}{2}} = 0$$

avec

$$E_i = S(\mathbf{z}_i) - \langle \mathbf{z}_i, \mathbf{K}D_x^{\frac{1}{2}}\mathbf{z}_i \rangle, \quad F_i = \frac{1}{4}(\langle \mathbf{z}_i, \mathbf{K}\partial_t \mathbf{z}_{i-1} \rangle + \langle \mathbf{z}_{i-1}, \mathbf{K}\partial_t \mathbf{z}_i \rangle),$$

Conservation locale de la quantité de mouvement discrète La loi de conservation de la quantité de mouvement s'écrit sous forme semi-discrète :

$$D_t^+ I^{n-\frac{1}{2}} + \partial_x G^n = 0$$

avec

$$I^{n-\frac{1}{2}} = \frac{1}{4}(\langle \mathbf{z}^n, \mathbf{M} \partial_x \mathbf{z}^{n-1} \rangle + \langle \mathbf{z}^{n-1}, \mathbf{M} \partial_x \mathbf{z}^n \rangle), \quad G^n = S(\mathbf{z}^n) - \langle \mathbf{z}^n, \mathbf{M} D_t^{\frac{1}{2}} \mathbf{z}^n \rangle,$$

Remarque 12 *Il existe une formulation des méthodes multisymplectique en boite en plusieurs dimensions d'espace [61].*

A.3.2 Runge-Kutta multisymplectique.

Parmi les méthodes standards, on trouve les méthodes d'intégrations de type Runge-Kutta (RK). Leur version symplectique consiste à trouver des coefficients garantissant les propriétés symplectiques. Cette méthode est largement reconnue pour son efficacité sur des temps longs. Cependant l'extension multisymplectique n'a pas encore été établie dans le cas générique. Elle a été réalisée dans [138] pour le cas des méthodes partitionnées (PRK). Elle permet d'obtenir des méthodes multisymplectiques explicites. Des conditions suffisantes de multisymplecticité pour les méthodes PRK ont été établies dans [59]. Un autre cas particulier des méthodes de type RK est la méthode implicite de Gauss-Legendre (GL). Lorsque le nombre d'étapes intermédiaires est réduit à un, cette méthode coïncide avec la méthode du point milieu multisymplectique. La méthode basée sur Runge-Kutta-Nyström (RKN) a été réalisée dans [95]. La littérature à ce sujet est récente. La méthode de Gauss-Legendre multisymplectique appliquée sur l'équation des ondes est réalisée dans [136].

Exemple A.3.1 (ondes semi-linéaire - GLMS) *On considère à nouveau l'équation des ondes non linéaire sous sa forme multisymplectique discrète notée :*

$$D_t U_i^n = V_i^n, \quad D_x U_i^n = W_i^n, \quad D_t V_i^n - D_x W_i^n = -V'(U_i^n)$$

La méthode de GL multisymplectique consiste à établir un intégrateur de type RK à $(r + s)$ étapes de variables $(u_i, v_i)_{i=1, \dots, r}$ et $(u_i, w_i)_{i=1, \dots, s}$. On a alors la méthode :

$$\begin{aligned} U_i^n &= u_i^n + \Delta x \sum_{j=1}^s a_{ij} D_x U_j^n, & W_i^n &= w_i^n + \Delta x \sum_{j=1}^s a_{ij} D_x W_j^n, \\ u_{i+1}^n &= u_i^n + \Delta x \sum_{i=1}^s b_i D_x U_i^n, & w_{i+1}^n &= w_i^n + \Delta x \sum_{i=1}^s b_i D_x W_i^n, \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} U_i^n &= u_i^n + \Delta t \sum_{k=1}^r \tilde{a}_{nk} D_t U_i^k, & V_i^n &= v_i^n + \Delta t \sum_{k=1}^r \tilde{a}_{nk} D_t W_i^k, \\ u_i^{n+1} &= u_i^n + \Delta t \sum_{m=1}^r \tilde{b}_m D_t U_j^m, & v_i^{n+1} &= v_i^n + \Delta t \sum_{m=1}^r \tilde{b}_m D_t W_j^m, \end{aligned}$$

La condition de multisymplecticité sur les coefficients de la méthode est analogue au cas symplectique :

$$b_j a_{ji} + b_i a_{ij} - b_i b_j = 0, \quad \tilde{b}_j \tilde{a}_{ji} + \tilde{b}_i \tilde{a}_{ij} - \tilde{b}_i \tilde{b}_j = 0,$$

La loi de conservation multisymplectique s'écrit dans ce cas :

$$\sum_{i=1}^s b_i [du_i^{n+1} \wedge dv_i^{n+1} - du_i^n \wedge dv_i^n] \Delta x - \sum_{n=1}^r \tilde{b}_n [du_{i+1}^n \wedge dv_{i+1}^n - du_i^n \wedge dv_i^n] \Delta t = 0$$

A.4 Exemples numériques

On présente les différentes performances de quelques méthodes multisymplectiques, au travers d'une application issue de la littérature [95] [107] [147] [153].

A.4.1 L'équation de Sine-Gordon

On s'est inspiré des travaux de Leimkuhler [88], et de ceux de Wang [155]. Il s'agit de l'équation des ondes semi linéaire avec un potentiel $V(u) = 1 - \cos(u)$:

$$u_{tt} = u_{xx} - \sin(u)$$

avec des conditions de bords périodiques : $u(0,t) = u(L,t)$ pour $t \geq 0$, et la condition initiale donnée par la solution exacte :

$$u_{exact}(x,t) = 4 \arctan\left(e^{\frac{x-x_0+ct}{\sqrt{1-c^2}}}\right) + 4 \arctan\left(e^{\frac{-x-x_0+ct}{\sqrt{1-c^2}}}\right)$$

Cette solution correspond à deux ondes solitaires (solitons) se déplaçant chacune à vitesse constante $\pm c$ et démarrant aux points $\pm x_0$.

A.4.1.1 Les méthodes numériques

Schéma semi-multisymplectique leapfrog (LF) Il s'agit d'un schéma classique, explicite, transportant au cours du temps la forme symplectique associée à la

dimension spatiale. Son principe de construction est celui rappelé en introduction de cette partie. Il s'écrit :

$$\frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{\Delta t^2} - \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} + \sin(u_i^n) = 0$$

Schéma conservant l'énergie (CE) Le schéma CE s'écrit [40] :

$$\frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{\Delta t^2} - \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} + \frac{V(u_i^{n+1}) - V(u_i^{n-1})}{u_i^{n+1} - u_i^{n-1}} = 0$$

où $V(u_i^n) = \sin(u_i^n)$. Il est du second ordre. Il est construit de sorte à conserver une énergie discrète au cours du temps [144] :

$$E_{\Delta x}^n = \frac{h}{2} \sum_i^{m-1} \left(\left(\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} \right)^2 + \left(\frac{u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}}{\Delta x} \right) \left(\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} \right) + V'(u_i^{n+1}) + V'(u_i^n) \right)$$

Mais il n'est pas multisymplectique.

Schéma multisymplectique à neuf points (MS) Il est construit à partir d'une méthode de type Runge-Kutta, mais est simplifié par substitution des variables auxiliaires. Son principe de construction est décrit dans les travaux de Wang [154] [155].

$$D_t^2(u_{i+1}^n + 2u_i^n + u_{i-1}^n) - D_x^2(u_i^{n+1} + 2u_i^n + u_i^{n-1}) = V'(u_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) + V'(u_{i+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}}) + V'(u_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}) + V'(u_{i-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}})$$

où les opérateurs D_t^2 et D_x^2 correspondent à :

$$D_t^2 z_i^n = \frac{z_i^{n+1} - 2z_i^n + z_i^{n-1}}{\Delta t^2}, \quad D_x^2 z_i^n = \frac{z_{i+1}^n - 2z_i^n + z_{i-1}^n}{\Delta x^2},$$

et $V(u_i^n) = \sin(u_i^n)$.

A.4.1.2 Tests numériques

Comportement sur des temps longs Comme attendu, le schéma multisymplectique possède un très bon comportement sur des temps longs. Il est comparé avec le schéma préservant l'énergie.

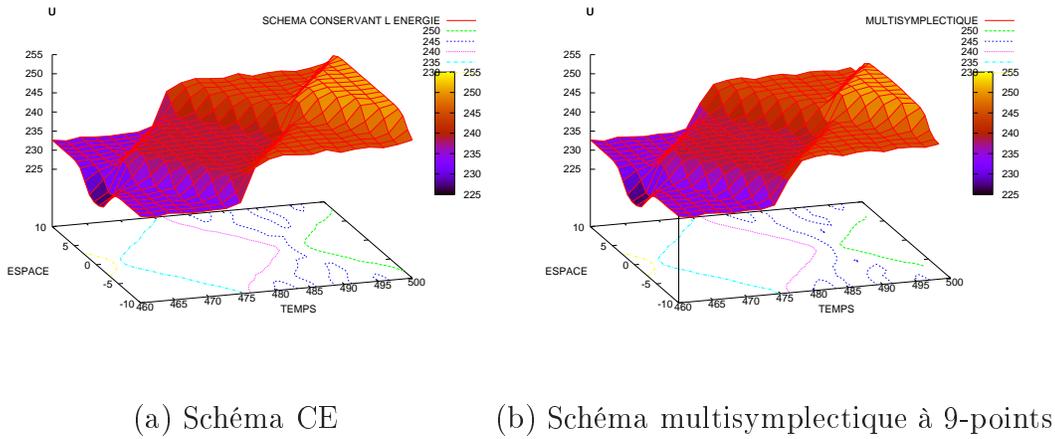


FIG. A.1 – Sine Gordon. *Solution numérique des solitons dans un domaine periodique $[-10; 10]$ pour un temps $T = 500$. $\Delta x = 5 \cdot 10^{-2}$ et $\Delta t = 5 \cdot 10^{-2}$.*

Stabilité Lorsque le pas de temps est raisonnable et que le pas d'espace est suffisamment petit, les trois schémas testés produisent des solutions numériques comparables, quelque soit le temps d'intégration. Lorsque le pas de temps augmente, la stabilité du schéma symplectique leapfrog est perturbé. Ceci est dû au caractère explicite de la méthode. Le schéma multisymplectique reste stable, conformément à sa nature implicite.

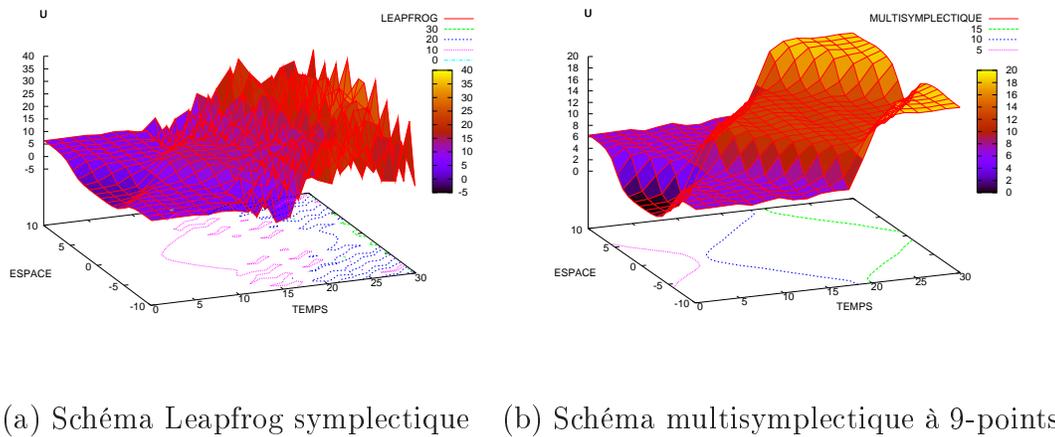
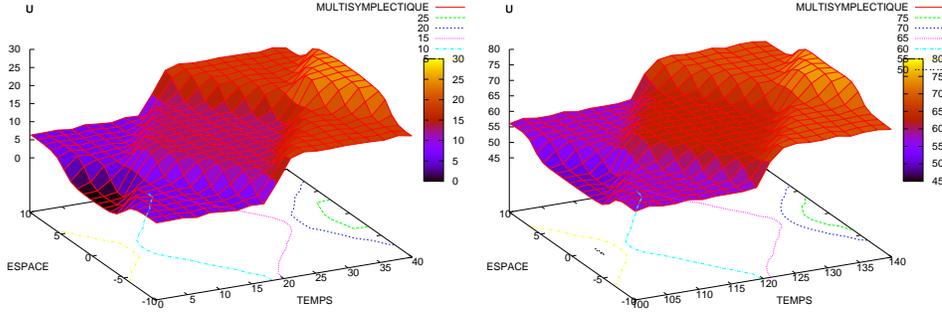


FIG. A.2 – Sine Gordon. *Solution numérique des solitons dans un domaine periodique $[-10; 10]$ pour un temps $T = 30$. $\Delta x = 5 \cdot 10^{-2}$ et $\Delta t = 5 \cdot 10^{-2}$.*

Bien que le schéma construit pour conserver l'énergie soit implicite par son terme non linéaire, sa solution explose dès les premières itérations lorsque $\Delta k > \Delta x$. Ce qui n'est pas le cas du schéma multisymplectique : il montre un comportement relativement bon sur un temps d'intégration moyen, malgré un pas de temps grossier

$\Delta k = 10^{-1}$ supérieur au pas d'espace Δx .



(a) Comportement de la solution pour sur $[T_1; T_2] = [0; 40]$ (b) Comportement de la solution pour sur $[T'_1; T'_2] = [100; 140]$

FIG. A.3 – Sine Gordon. Schéma multisymplectique à 9-points. Dans un domaine periodique $[-10; 10]$. $\Delta x = 5.10^{-2}$ et $\Delta t = 1.10^{-1}$.

Conservation du Hamiltonien Les lois de conservation traduites par le schéma multisymplectique sont locales. C'est notamment le cas du transport d'énergie. On définit à partir de l'expression du Hamiltonien une densité locale d'énergie :

$$\mathcal{E}(x) = \frac{E(x)}{\int_0^L E(x) dx}, \quad E(x) = \frac{1}{2}(u_t^2(x) + u_x^2(x)) + (1 - \cos(u(x))),$$

Au travers d'une comparaison entre le schéma construit pour conserver l'énergie (CE) et le schéma multisymplectique (MS), on montre deux caractéristiques :

- les variations relatives de \mathcal{E} dépendent de sa discrétisation.
- le schéma CE conserve mieux \mathcal{E} , cependant le schéma multisymplectique traduit mieux la correspondance entre les variations d'énergie et les instants de collisions entre solitons et avec les bords.

On considère la densité d'énergie discrétisée en chaque noeud par :

$$E_{1i}^n = \frac{1}{2} \left(\left(\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} \right)^2 + \left(\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta t} \right)^2 + \left(1 - \cos\left(\frac{u_{i+1}^n + u_i^n}{2} \right) \right) \right), \quad i = 1, \dots, m-1, \quad n \geq 1 \quad (\text{A.3})$$

Le schéma CE présente des irrégularités lorsque l'on regarde l'évolution de \mathcal{E} . Le schéma multisymplectique possède une erreur relative plus importante. Toutefois, il présente un profil plus régulier, constant, correspondant aux zones de propagation des solitons à l'intérieur du domaine ; aux instants correspondant aux collisions entre

les solitons ou avec les bords, le profil d'énergie montre un pic (Fig. A.4 (a)). On considère la discrétisation de la densité d'énergie est :

$$E_{2\Delta x}^n = \frac{h}{2} \sum_i^{m-1} \left(\left(\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} \right)^2 + \left(\frac{u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}}{\Delta x} \right) \left(\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} \right) + V'(u_i^{n+1}) + V'(u_i^n) \right), \quad n \geq 1 \quad (\text{A.4})$$

Cette discrétisation correspond à celle qui est conservée par construction par le schéma CE. Le constat est analogue pour le schéma multisymplectique : les variations de \mathcal{E} montrent des pics lors des collisions (Fig. A.4 (b)).

Les Fig. A.4 (c) et (d) montrent la répartition de la densité d'énergie sur le domaine au cours du temps. Les instants de collisions correspondent avec les instants de pics dans le profil de variation de \mathcal{E} .

Le transport d'énergie représenté par le schéma multisymplectique permet de traduire qualitativement le comportement locale des solitons alors que le schéma CE préserve avec une meilleure précision une énergie globale indépendante du comportement de la solution. Ainsi, la structure multisymplectique contient de l'information physique permettant une analyse locale. Elle peut être plus importante à préserver qu'une grandeur globale (comme l'énergie) ne traduisant que partiellement la physique d'un système.

Les méthodes multisymplectiques sont construites pour rendre compte de la nature multisymplectique des équations. Le fait de les préserver au cours du temps permet d'obtenir des comportements sur des temps longs naturellement satisfaisant. Cela permet aussi d'avoir structurellement de bonnes propriétés de conservation des quantités invariantes.

Cependant, le petit nombre d'équations modèles montre une des faiblesses majeures de cette approche. En effet, la méthode reposant sur la mise en forme multisymplectique, il n'existe pas de construction systématique pour n'importe quelle EDP.

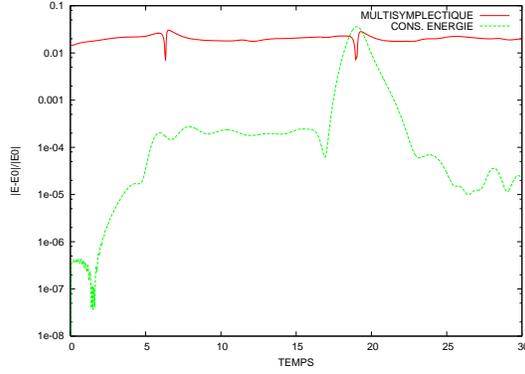
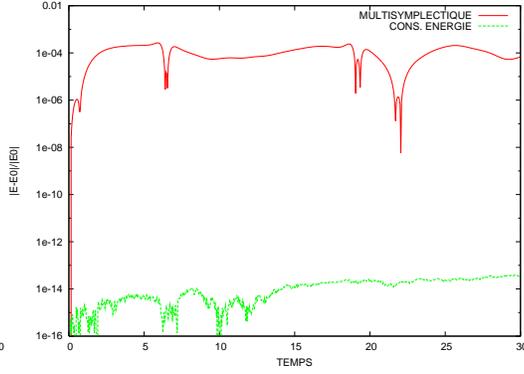
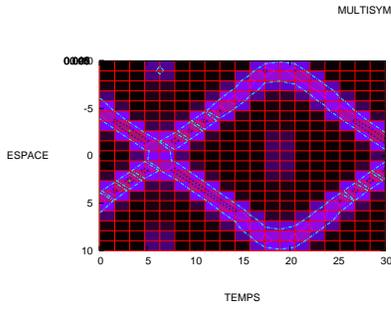
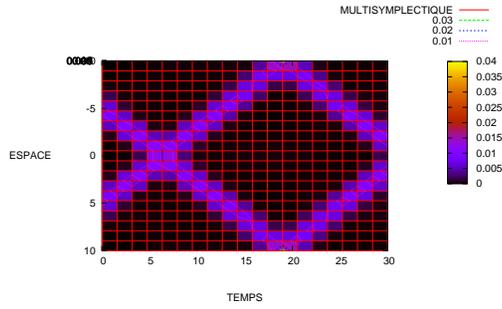
(a) Variation de l'énergie E_1 (b) Variation de l'énergie E_2 (c) Densité d'énergie E_1 (d) Densité d'énergie E_2

FIG. A.4 – Sine Gordon. En (a) : Variation de $\mathcal{E}(x)$ pour le schéma multisymplectique (MS) et le schéma conservant l'énergie (CE) pour la discrétisation (A.3) de l'énergie E_1 . En (b) : il en est de même pour une discrétisation (A.4) de l'énergie E_2 correspondant à celle préservée par le schéma CE. En (c) et (d) : répartition de $\mathcal{E}(x)$ au cours du temps sur le domaine pour le schéma multisymplectique (MS). Domaine spatial $[-10; 10]$ pour un temps $T = 30$. $\Delta x = 5 \cdot 10^{-2}$ et $\Delta t = 4 \cdot 10^{-2}$.

Annexe B

Méthodes utilisant l'invariance par symétrie

B.1 Introduction

On présente quelques méthodes d'intégration géométrique. Toutes sont basées sur l'une des propriétés géométriques issues des symétries des équations :

- une approche semi-invariante, introduite par Shokin [142], se basant sur l'addition d'un terme numérique agissant comme un terme de viscosité, pour un schéma donné . Ce terme est calculé de sorte à ce que *l'approximation différentielle* du schéma respecte les symétries de l'équation d'origine.
- les méthodes de maillage adaptatif sont des méthodes reconnues et utilisées dans de nombreux cas, comme par exemple pour les systèmes d'interaction fluide-structure. En s'inspirant d'une technique reposant sur le *principe d'équidistribution*, Budd propose de déterminer les équations d'évolution du maillage de sorte à respecter l'invariance d'échelle [15], [17]. Cette approche est particulièrement bien adaptée pour retrouver les solutions auto-similaires et traduire les singularités comme les phénomènes de *blow up*.
- d'autres méthodes sont construites directement pour préserver l'ensemble des symétries de l'équation : c'est ce que proposent Dorodnitsyn *et al.* [35], [36]. Leurs travaux à ce sujet portent sur la construction de schémas et de maillages s'exprimant avec les *invariants en différences finies* ; ceux-ci sont calculés grâce aux opérateurs discrets de dérivation. Cette méthode autorise les maillages évolutifs, et permet d'établir des lois de conservations discrètes pour les systèmes lagrangiens.

B.2 Schémas semi-invariants par approximation différentielle

La méthode a été introduite par Shokin [142]. Le principe d'invariance jusqu'à un ordre fini, ou de semi-invariance, consiste à adjoindre à l'EDP une approximation différentielle. Celle-ci est obtenue à partir d'un schéma numérique donné, par le développement de Taylor des termes de différences finies. Cette approximation différentielle est la somme de l'équation exacte et d'un terme résiduel, correspondant à une erreur de troncature associée au schéma. On calcule la forme générale des générateurs infinitésimaux du groupe de symétrie de cette équation. La condition d'invariance induit un système d'équations différentielles sur les coefficients des générateurs infinitésimaux et sur les termes du facteur résiduel. La construction d'un schéma semi-invariant consiste à choisir ce terme résiduel, de sorte à préserver les symétries de l'équation d'origine.

On présente brièvement cette méthode sur l'exemple d'une EDP :

$$F(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{u}^{(1)}, \dots, \mathbf{u}^{(n)}) = 0$$

où l'on a noté $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_p)$ les variables indépendantes, et $\mathbf{u}^{(n)} = (u_1^{(n)}, \dots, u_q^{(n)})$ les variables dépendantes ainsi que leurs dérivées partielles : $u_j^{(\mu)} = u_j^{l_1 \dots l_\mu} = \frac{\partial^\mu u_j}{\partial x_{k_1} \dots \partial x_{k_\mu}}$. Une équation aux différences finies associée s'écrit :

$$N(\mathbf{x}, \mathbf{u}^n, \mathbf{h}, \mathbf{T}\mathbf{u}) = 0,$$

où $\mathbf{h} = (h_1, \dots, h_p)$ correspond aux pas du maillage, et $\mathbf{T} = (T_1, \dots, T_p)$ est l'opérateur de translation discrète sur les variables indépendantes :

$$T_i[u](x_1, \dots, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, \dots, x_p) = u(x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+h_i}, x_{i+1}, \dots, x_p)$$

B.2.1 Approximation différentielle d'ordre s .

On appelle alors approximation différentielle d'ordre s de l'équation aux différences, l'équation différentielle :

$$P(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}^{(l_1)}, \mathbf{u}^{(l_1 \dots l_{\mu'})}) = F(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{u}^{(l_1)}, \dots, \mathbf{u}^{(l_1 \dots l_{\mu'})}) + \sum_{\beta=1}^s \sum_{i=1}^p (h_i^{l_\beta}) R_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{u}^{(l_1)}, \dots, \mathbf{u}^{(l_1 \dots l_{\mu'})})$$

pour $\lambda = 1, \dots, q$ et $l' = \max_{\lambda, i} l'_{\lambda, i}$. Elle est obtenue par troncature du développement de Taylor de \mathbf{T} .

Soit G un groupe de transformation agissant sur l'espace des jets J^n , engendré par

le générateur infinitésimal \mathbf{v} . Alors le prolongement à l'ordre l' de \mathbf{v} s'écrit :

$$\text{pr}^{(l')} \mathbf{v} = \mathbf{v} + \sum_{j=1}^n \sum_{\mu=1}^{l'} \sigma_j^{(l_1 \dots l_\mu)} \frac{\partial}{\partial u_j^{(l_1 \dots l_\mu)}}$$

Le résultat fondamental de la méthode permettant de construire un schéma aux différences finies invariant jusqu'à un certain ordre est le suivant :

Théorème B.2.1 (Semi-invariance) *L'approximation différentielle est invariante sous l'action du groupe G si et seulement si :*

$$\text{pr}^{(l')} \mathbf{v} [P(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}^{(l_1)}, \mathbf{u}^{(l_1 \dots l_{\mu'})})]_{|P=0} = 0$$

Ce qui est équivalent d'après la définition de l'approximation différentielle à :

$$\begin{aligned} 0 &= \text{pr}^{(l')} \mathbf{v} [F(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}^{(l_1)}, \mathbf{u}^{(l_1 \dots l_{\mu'})})]_{|P=0} \\ &+ \text{pr}^{(l')} \mathbf{v} \left[\left(\sum_{\beta=1}^s \sum_{i=1}^p (h_i^{l_\beta}) R(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \dots, \mathbf{u}^{(l_1)}, \mathbf{u}^{(l_1 \dots l_{\mu'})}) \right) \right]_{|P=0} \end{aligned}$$

Cette condition d'invariance conduit à un système d'équations dont les inconnues sont les fonctions jouant le rôle des coefficients dans l'expression du prolongement du générateur infinitésimal.

On construit un schéma semi-invariant en imposant au terme résiduel de l'approximation différentielle la condition d'invariance par le groupe de symétrie de l'équation d'origine.

B.2.2 Schéma semi-invariant pour l'équation de Burgers

On présente à titre d'exemple la méthode appliquée à l'équation de Burgers, traité par Hoarau *et al.* [58].

On considère le schéma numérique :

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x} \left(\mu \delta - \frac{\mu \delta^3}{6} \right) \left(\frac{u^2}{2} \right)_i^n - \nu \frac{1}{\Delta x^2} \left(\delta^2 - \frac{\delta^4}{12} \right) (u_i^n) - \left(\Omega_{i+\frac{1}{2}}^n \delta^+ - \Omega_{i-\frac{1}{2}}^n \delta^- \right) u_i^n = 0$$

où l'on a noté les opérateurs de dérivation :

$$\delta(u_i^n) = \frac{u_{i+\frac{1}{2}}^n - u_{i-\frac{1}{2}}^n}{\Delta x}, \quad \mu(u_i^n) = \frac{u_{i+\frac{1}{2}}^n + u_{i-\frac{1}{2}}^n}{2}, \quad \delta^\pm(u_i^n) = \pm \frac{u_{i\pm 1}^n - u_i^n}{\Delta x},$$

et où $\Omega_i^n = \Omega(x_i, t^n, u_i^n)$ est la discrétisation du terme de viscosité artificielle calculée de sorte à ce que l'approximation différentielle :

$$u_t + uu_x - \nu u_{xx} + (Cu_x)_x = 0$$

vérifie les symétries de l'équation de Burgers.

En considérant un groupe de transformation agissant sur les variables dans l'approximation différentielle, la condition d'invariance s'écrit :

$$\text{pr}^{(2)} \mathbf{v}[(u_t - uu_x - \nu_{xx})]_{|F=0} + \text{pr}^{(3)} \mathbf{v}[(C u_x)_x]_{|F=0} = 0$$

Le système d'équations différentielles portant sur les coefficients des générateurs infinitésimaux est :

$$\begin{aligned} \xi_1 &= a + bx + ct + dtx, & \xi_2 &= e + dt^2 + (2b - f)t, & \eta &= c + dx + (-b - dt + f)u, \\ \zeta_1 &= bh, & \zeta_2 &= (2b - f)\tau, & \theta &= f\nu, \end{aligned}$$

où a, b, c, d, e, f sont des coefficients réels.

L'expression de C est alors déduite à l'aide de ces équations, en résolvant la condition d'invariance pour l'approximation différentielle par rapport aux symétries de l'équation de Burgers. Hoarau *et al.* [58] propose d'écrire la viscosité artificielle rendant l'approximation différentielle invariante grâce à :

$$\Omega = \frac{1}{\Delta x^2} \left(\frac{\Delta t}{2} u^2 - C \right)$$

et en prenant $C = -0.01t(tu - x)^2(u_x)^2$.

On obtient au final le schéma semi-invariant d'ordre 1 en temps et 2 en espace :

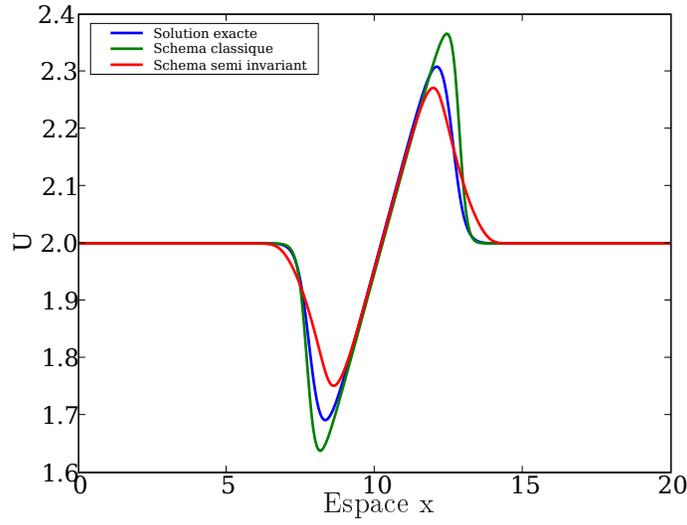
$$\begin{aligned} 0 &= \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x} \left(\mu\delta - \frac{\mu\delta^3}{6} \right) \left(\frac{u^2}{2} \right)_i^n - \nu \frac{1}{\Delta x^2} \left(\delta^2 - \frac{\delta^4}{12} \right) (u_i^n) \\ &\quad - \left(\Omega_{i+\frac{1}{2}}^n (u_{i+1}^n - u_i^n) - \Omega_{i-\frac{1}{2}}^n (u_i^n - u_{i-1}^n) \right) u_i^n \\ &\quad + \frac{\nu\Delta t}{2} \left((u_{i+\frac{1}{2}}^n)^2 \frac{\mu\delta^2}{\Delta x^2} - (u_{i-\frac{1}{2}}^n)^2 \frac{\mu\delta^2}{\Delta x^2} \right) - \frac{\nu^2\Delta t}{2} \frac{\delta^4}{\Delta x^4} u_i^n + \frac{\nu\Delta t}{2} \frac{\mu\delta^3}{\Delta x^3} \left(\frac{u^2}{2} \right)_i^n \end{aligned}$$

Remarque 13 Outre l'aspect semi-invariant de la méthode, un point à noter est que la méthode réduit l'ordre du schéma par deux. Ainsi, le schéma d'origine d'ordre 4 devient un schéma semi-invariant d'ordre 2.

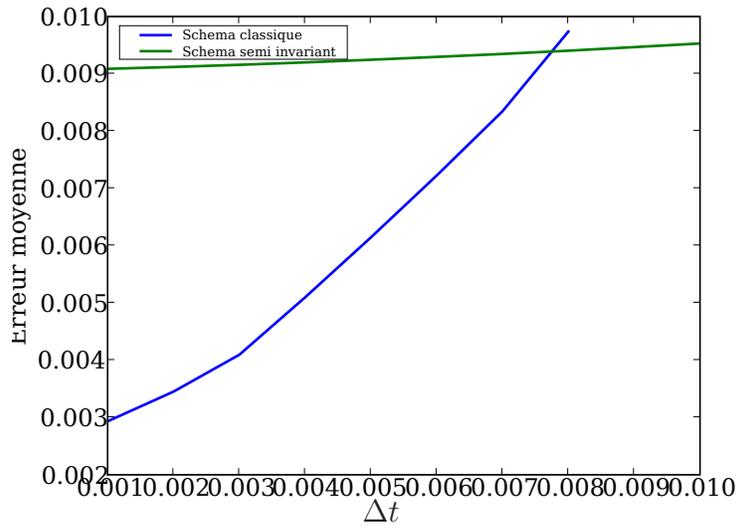
Résultats numériques On montre les performances numériques d'une telle approche sur l'exemple de l'équation de Burgers. Pour l'exemple présent, on considère le problème dont la condition initiale et les conditions aux limites sont données par la solution exacte suivante :

$$u_{\text{exacte}}(x, t) = \frac{\frac{x-2t}{t+0.1}}{1 + \nu^2\sqrt{t+0.1}\exp\left(\frac{(x-2t)^2}{4\nu(t+0.1)}\right)} + 2$$

Le temps initial est de $t_0 = 0.1$ et le temps final est $t_1 = 5.2$. Le domaine spatial est $[a, b] = [0, 20]$. La Fig. (B.1) (a) représente les solutions numériques du schéma classique d'ordre 4 et du schéma semi-invariant d'ordre 2, comparées à la solution



(a) Courbes



(b) Erreur moyenne

FIG. B.1 – Équation de Burgers. Temps d'intégration $T = 5$. Le pas d'espace est de $\Delta x = 6.10^{-2}$ sur le domaine $[0,20]$ (a) profil des solutions numériques en fonction du temps : schéma classique d'ordre 4 (-) et du schéma semi-invariant d'ordre 2 (-). Le pas de temps est de 8.10^{-3} . (b) Évolution de l'erreur relative de l'énergie, en fonction du pas de temps. Le pas de temps Δt varie de 1.10^{-3} à 1.10^{-2} .

exacte. Le pas d'espace est de $\Delta x = 6.10^{-2}$ sur le domaine $[0,20]$. Le pas de temps est de 8.10^{-3} . Le temps d'intégration est de $T = 5.1$. On constate que la courbe du schéma semi-invariant présente une légère diffusion. Elle ne reproduit pas exactement la solution exacte, mais reste globalement comparable au schéma classique d'ordre 4.

La Fig. (B.1) (b) représente l'évolution de l'erreur moyenne sur le domaine spatial : $\text{Err} = \sum_{i=0}^N |u_{\text{exacte}} - u_{\text{num.}}|/N$. On remarque que pour un petit pas de temps ($\Delta t = 10^{-3}$), le schéma classique d'ordre 4 présente une erreur moyenne bien plus petite que le schéma semi-invariant. Cependant, lorsque le pas de temps augmente, l'erreur associée au schéma classique croît beaucoup plus rapidement que celle associée au schéma semi-invariant ; le pas d'espace étant fixé, la solution numérique devient de plus en plus instable : au-delà de $\Delta t = 8.10^{-3}$, la solution semi-invariante conserve le même ordre de précision contrairement à la solution classique qui a complètement explosée.

Ainsi, bien que cette méthode réduise l'ordre de précision du schéma d'origine, il existe des valeurs des paramètres numériques (pas d'espace, pas de temps) pour lesquelles la solution du schéma semi-invariant est comparable à la solution du schéma classique d'ordre plus élevé. On observe même sur cet exemple un gain de stabilité de la solution numérique.

B.3 Invariance d'échelle et maillage adaptatif

Il s'agit d'une méthode d'intégration numérique consistant à adapter le maillage afin de préserver l'invariance d'échelle. L'invariance d'échelle correspond à la transformation :

$$t \rightarrow \lambda t, \quad x \rightarrow \lambda^{1/2} x, \quad u \rightarrow \lambda^\alpha u, \quad \forall \alpha, \lambda > 0,$$

Elle est particulièrement présente pour de nombreux systèmes physiques et mécaniques. Elle se retrouve en effet dans le groupe de symétrie de nombreuses EDP, comme l'équation de la chaleur, l'équation de Burgers, les équations de Navier-Stokes... Une solution invariante par échelle signifie qu'elle se produit quel que soit l'ordre de grandeur considéré pour observer le système.

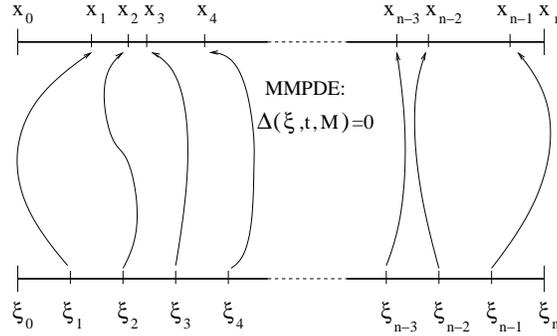
On rappelle donc dans un premier temps la méthode du maillage mobile comme elle a été originalement introduite par Huang *et al.* [63]. Puis on présente la manière dont Budd *et al.* [17] utilise l'invariance d'échelle pour développer cette méthode. Cette méthode est particulièrement bien adaptée pour capter les singularités comme les phénomènes de *blow-up*, ainsi que pour reproduire le comportement des solutions sur des temps longs, notamment celles associées aux solutions autosimilaires.

B.3.1 Principe d'équidistribution et invariance d'échelle.

Principe d'équidistribution Le principe d'équidistribution a été introduit par Boor [33]. On suppose un maillage uniforme décrit par des coordonnées fictives $\xi \in [0,1]$ avec $\xi_i = \frac{i}{N}$ pour $i = 0, \dots, N$. À ces coordonnées est associé le maillage $\{x_0, \dots, x_N\}$ défini pour $x(\xi, t) \in [0,1]$, avec $x(0, t) = 0$ et $x(1, t) = 1$. L'évaluation des x_i est donnée par la résolution d'une EDP portant sur une fonction de régulation $M(x, t) > 0$ vérifiant le principe d'équidistribution :

$$\int_0^{x(\xi, t)} M(z, t) dz = \xi \theta(t), \quad \theta(t) = \int_0^1 M(z, t) dz,$$

En différenciant par rapport à ξ le principe d'équidistribution, on obtient les EDP



(a) Maillage physique $x(x_i, t)$ et maillage fictif x_i

FIG. B.2 – Construction du maillage adaptatif.

permettant d'évaluer le maillage $\{x_0, \dots, x_N\}$:

$$M(x(\xi, t), t) \frac{\partial}{\partial \xi} x(\xi, t) = \theta(t), \quad \frac{\partial}{\partial \xi} \left(M(x(\xi, t), t) \frac{\partial}{\partial \xi} x(\xi, t) \right) = 0,$$

Ces équations sont appelées équations du principe d'équidistribution quasi-statiques (QSEP) dans la mesure où elles ne font pas intervenir la vitesse de déplacement des nœuds du maillage \dot{x}_i . La fonction de régulation $M(x(\xi, t), t)$ est choisie selon l'EDP considérée de sorte à minimiser les erreurs numériques. Ce sont à partir des QSEP que les équations du maillage mobile (*Moving Mesh Partial Differential Equations* - MMPDEs) sont calculées¹.

Il existe plusieurs MMPDEs dérivées des QSEP :

- la MMPDE suivante a été proposée par Ren *et al.* [137] :

$$\frac{\partial}{\partial \xi} (M \dot{x}) + \frac{\partial M}{\partial t} \frac{\partial x}{\partial \xi} = \dot{\theta}$$

¹les MMPDEs sont alors à discrétiser et à résoudre en même temps que l'équation aux différences

obtenue en différenciant par rapport au temps la première équation différentielle du principe d'équidistribution, et en remarquant que :

$$\begin{aligned}\partial_\xi(M\dot{x}) &= (\partial_\xi M)\dot{x} + M\partial_\xi\dot{x} \\ &= \partial_x M|_t \partial_\xi x|_t \partial_t M|_\xi + M\partial_t \partial_\xi x \\ &= (\partial_t M|_\xi - \partial_t M|_t) \partial_\xi x|_t + M\partial_t \partial_\xi x \\ &= \partial_t(M\partial_\xi x) - \partial_t M \partial_\xi x\end{aligned}$$

où $\partial_x M|_t = \left(\frac{\partial M}{\partial x}\right)|_t$ constant.

En divisant par $\partial_\xi x$, et en remarquant que $M = \theta \partial_\xi x$, on obtient la MMPDE sous forme conservative :

$$\frac{\partial M}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(M\dot{x}) = M \frac{\dot{\theta}}{\theta}$$

Cependant, la fonction θ n'est pas pratique dans les calculs, c'est pourquoi il est possible d'obtenir des MMPDEs ne faisant pas intervenir ce facteur :

- en différenciant par rapport au temps la forme intégrale du principe d'équidistribution, on obtient la MMPDE introduite par Flaherty *et al.* [45] :

$$\dot{x}M + \int_0^x \partial_t M(dz) = \xi \dot{\theta}$$

Ensuite en différenciant une première fois par ξ :

$$M\partial_\xi\dot{x} + \dot{x}\partial_\xi M + \partial_\xi x \partial_t M = \dot{\theta}$$

puis une deuxième fois :

$$\partial_\xi(M\partial_\xi\dot{x} + \dot{x}\partial_\xi M) = -\partial_\xi(\partial_t M \partial_\xi x)$$

- une autre méthode pour obtenir les MMPDEs est de supposer que les QSEP doivent être vérifiées pour un temps initial non nul $t + \tau$, avec $0 < \tau \ll 1$. La seconde équation des QSEP s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial \xi}(M(x(\xi, t + \tau), t + \tau) \frac{\partial}{\partial \xi} x(\xi, t + \tau)) = 0$$

En écrivant le développement de Taylor pour chacun des termes :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \xi} x(\xi, t + \tau) &= \frac{\partial}{\partial \xi} x(\xi, t) + \tau \frac{\partial}{\partial \xi} \dot{x}(\xi, t + \tau) + O(\tau^2) \\ M(x(\xi, t + \tau), t + \tau) &= M(x(\xi, t), t + \tau) + \tau \dot{x} \frac{\partial}{\partial x} M(x(\xi, t), t) \\ &\quad + \tau \frac{\partial}{\partial t} M(x(\xi, t), t) + O(\tau^2)\end{aligned}$$

on obtient finalement la MMPDE :

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(M \frac{\partial \dot{x}}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial M}{\partial \xi} \dot{x} \right) = - \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial M}{\partial t} \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) - \frac{1}{\tau} \left(M \frac{\partial x}{\partial \xi} \right)$$

Invariance d'échelle La pierre angulaire de la méthode du maillage adaptatif basée sur le principe d'équidistribution repose sur la fonction de régulation $M(x,t)$. Le point de vue géométrique consiste à déterminer M de sorte à ce que le maillage puisse transporter la structure géométrique de l'équation. Le système formé par le schéma aux différences et les équations du maillage obtenues conserve alors les propriétés d'invariance.

On présente le cas particulier de construction d'un maillage adaptatif construit pour respecter l'invariance par transformation d'échelle, comme le propose Budd *et al.* [15].

B.3.2 L'équation de la chaleur non linéaire

Considérons l'équation :

$$u_t = (uu_x)_x$$

Elle admet les symétries continues :

- Translation spatiale :
 $(x, t, u) \longrightarrow (x + \tau_1, t, u)$
- Translation temporelle :
 $(x, t, u) \longrightarrow (x, t + \tau_2, u)$
- Première transformation d'échelle :
 $(x, t, u) \longrightarrow (\lambda_1^{1/2}x, \lambda_1 t, u)$
- Seconde transformation d'échelle :
 $(x, t, u) \longrightarrow (x, \lambda_2 t, \lambda_2^{-1/2}u)$

La famille des solutions autosimilaires pour les transformations d'échelle est donnée par :

$$u(x,t) = t^\gamma v(x/t^\beta), \quad 2\beta - \gamma = 1,$$

L'équation différentielle donnant l'évolution du maillage est, pour cet exemple, l'équation MMPDE1. La fonction de régulation doit être prise de sorte à respecter l'invariance d'échelle. Elle peut alors être de la forme $M(u) = u^\lambda$. Prenons par exemple $\lambda = 1$. Le principe d'équidistribution s'écrit alors :

$$\int_{X(0,t)}^{X(\xi,t)} u \, dx = \xi$$

En différenciant par rapport à ξ , on obtient :

$$uX_\xi = 1$$

En différenciant par rapport à t , on a :

$$u(X_t + u_x) = 0$$

Ainsi, le maillage évolue en fonction du temps comme :

$$X_t = -u_x$$

On vérifie que les équations obtenues par dérivation du principe d'équidistribution, avec la fonction de régulation choisie, sont bien invariantes par transformation d'échelle. En substituant ces équations dans l'équation d'origine, on obtient l'équation :

$$u(\xi, t)_t = \frac{1}{2}u^2(u^2)_{\xi\xi}$$

Le schéma à maillage adaptatif est alors donné par l'approximation de cette équation et de celle de l'évolution du maillage :

$$\frac{du_i}{dt} = \frac{n^2}{2}u_i^2(u_{i+1}^2 - 2u_i^2 + u_{i-1}^2), \quad (X_{i+1} - X_i)(u_{i+1} - u_i) = \frac{2}{n},$$

B.4 Méthodes utilisant les invariants en différences finies

On présente la méthode comme elle est introduite par Dorodnitsyn [35] pour le cas particulier d'une équation différentielle de la forme :

$$F(x, t, u, u_t, u_x, u_{xx}) = 0$$

Soit X le générateur d'une symétrie continue pour l'EDP :

$$X = \xi^t \frac{\partial}{\partial t} + \xi^x \frac{\partial}{\partial x} + \eta \frac{\partial}{\partial u} + \dots$$

Le principe de construction de la méthode est le suivant : grâce aux opérateurs discrets de dérivation, on construit le prolongement \tilde{X} de X sur l'espace des variables discrètes associées à l'équation aux différences. On peut alors calculer les invariants I_1, \dots, I_l en différences finies de \tilde{X} . On obtient une méthode complètement invariante en établissant un schéma numérique et un maillage composé des invariants I_k .

B.4.1 Schémas invariants

Opérateurs de dérivation discret On pose les opérateurs discrets de dérivation :

$$D^+ = \frac{\partial}{\partial x} + \tilde{D}_{+h}(u) \frac{\partial}{\partial u} + \dots, \quad D^- = \frac{\partial}{\partial x} + \tilde{D}_{-h}(u) \frac{\partial}{\partial u} + \dots,$$

où :

$$\tilde{D}_{+h} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-h)^{n-1}}{n} D_{+h}^n, \quad \tilde{D}_{-h} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{h^{n-1}}{n} D_{-h}^n,$$

L'opérateur de différence à gauche (respectivement à droite) défini par $D_{-h} = -\frac{S_{-h}-Id}{h}$ (respectivement $D_{+h} = \frac{S_{+h}-Id}{h}$) est une combinaison de l'opérateur de translation discrète à gauche $S_{-h} : x \mapsto x^-$ (respectivement à droite $S_{+h} : x \mapsto x^+$), de sorte que :

$$D_{+h} = \frac{x^+ - x}{h}, \quad D_{-h} = \frac{x - x^-}{h},$$

Supposons que l'équation aux différences $F_{\Delta} = 0$ associée à l'EDP s'exprime à partir du stencil formé par les points discrets (Fig. B.3(b))

$$\Delta = \{x, t, \tau, h^+, h^-, u, u^+, u^-, \hat{x}, \hat{t}, \hat{u}\}$$

Le prolongement des opérateurs de différences D^{\pm} sur Δ permet de définir le prolongement \tilde{X} de X sur Δ . La condition d'invariance pour toute fonction $I : \Delta \mapsto \mathbb{R}$ est :

$$\tilde{X}I(x, t, \tau, h^+, h^-, u, u^+, u^-, \hat{x}, \hat{t}, \hat{u}) = 0$$

La résolution de cette condition d'invariance donne l'ensemble des invariants discrets en différences finies I_1, \dots, I_l . Il suffit alors de composer un schéma numérique et les équations de maillage en fonction des ces invariants pour obtenir une méthode complètement invariante.

B.4.2 Equation de la chaleur non linéaire

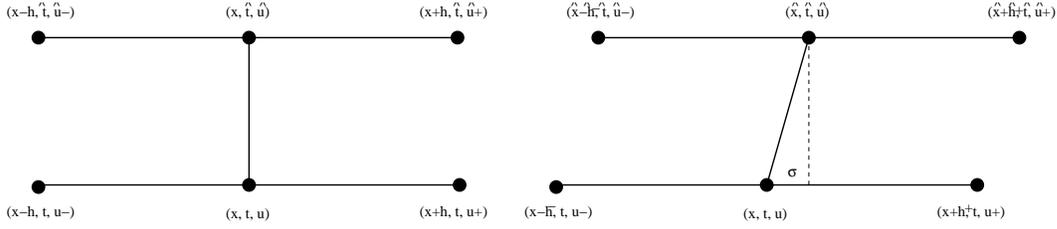
On reprend l'exemple de l'équation de la chaleur non linéaire $u_t = (uu_x)_x$ et on reproduit la méthode complètement invariante par rapport aux symétries de l'équation, suivant l'article original de Dorodnitsyn [39].

Considérons le stencil régulier et orthogonal défini par les points discrets

$$(x, t, h, \tau, u, u_-, u_+, \hat{u}, \hat{u}_-, \hat{u}_+)$$

disposés comme sur la Fig. B.3(a). Les symétries de l'équation sont

$$\begin{aligned} (x, t, u) &\longrightarrow (x + \tau_1, t, u), & (x, t, u) &\longrightarrow (x, t + \tau_2, u), \\ (x, t, u) &\longrightarrow (\lambda_1^{1/2}x, \lambda_1 t, u), & (x, t, u) &\longrightarrow (x, \lambda_2 t, \lambda_2^{-1/2}u), \end{aligned}$$



(a) Stencil régulier et orthogonal

(b) Stencil régulier

FIG. B.3 – Stencil pour l'équation de la chaleur non linéaire.

et les invariants associés sont :

$$u \frac{\tau}{h^2}, \quad \frac{\hat{u}}{u}, \quad \frac{u_+}{u}, \quad \frac{u_-}{u}, \quad \frac{\hat{u}_+}{u}, \quad \frac{\hat{u}_-}{u}$$

Un schéma invariant construit avec ces invariants est, par exemple :

$$\frac{\hat{u} - u}{\tau} = \frac{1}{h} \left(\left(\frac{u_+ + u}{2} \right) \left(\frac{u_+ - u}{h} \right) - \left(\frac{u + u_-}{2} \right) \left(\frac{u - u_-}{h} \right) \right)$$

Cependant, pour utiliser un maillage mobile, on a besoin d'une équation d'évolution discrète pour le maillage du type $\frac{dx}{dt} = \phi(t, x, u)$. En remarquant que l'équation de la chaleur non linéaire s'écrit sous la forme d'une loi conservative pour la chaleur u , Dorodnitsyn [39] propose que l'équation d'évolution du maillage doive satisfaire $\frac{d}{dt} \int_{x_1(t)}^{x_2(t)} u dx = 0$, c'est-à-dire :

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1(t)}^{x_2(t)} u dx = \int_{x_1(t)}^{x_2(t)} \frac{\partial u}{\partial t} dx + \left[u \frac{dx}{dt} \right]_{x_1}^{x_2} = \left[u u_x + u \frac{dx}{dt} \right]_{x_1}^{x_2} = 0$$

L'équation d'évolution du maillage est alors donnée par $\frac{dx}{dt} = -u_x$.

Ainsi, le système à résoudre avec un maillage adaptatif s'écrit :

$$\frac{dx}{dt} = -u_x, \quad \frac{1}{u} \frac{du}{dt} = (u_x)_x,$$

Ce qui s'écrit aussi sous forme conservative :

$$\frac{dx}{dt} = -u_x, \quad \frac{d \ln u}{dt} = (u)_{xx},$$

Un tel système peut se résoudre sur un maillage donné comme pour le stencil de la Fig. B.3(b). Les invariants discrets sont :

$$u \frac{\tau}{h^{+2}}, \quad \frac{\hat{u}}{u}, \quad \frac{u_+}{u}, \quad \frac{u_-}{u}, \quad \frac{\hat{u}_+}{u}, \quad \frac{\hat{u}_-}{u}, \quad \frac{\hat{h}^-}{h^+}, \quad \frac{h^-}{h^+}, \quad \frac{\hat{h}^+}{h^+}, \quad \frac{\hat{x} - x}{h^+}$$

Finalement, on obtient la méthode suivante :

$$\begin{aligned}\frac{\hat{x} - x}{\tau} &= -\frac{1}{2} \left(\frac{u_+ - u}{h^+} + \frac{u - u_-}{h^-} \right) \\ \frac{1}{\tau} \ln \frac{\hat{u}}{u} &= \frac{2}{h^+ + h^-} \left(\frac{u_+ - u}{h^+} - \frac{u - u_-}{h^-} \right)\end{aligned}$$

Cette méthode est complètement invariante pour un maillage mobile. Ainsi, on a présenté un échantillon des méthodes d'intégration utilisant des techniques associées à la conservation des symétries. Les principales limites relatives à ces méthodes sont :

- la méthode de semi-invariance, outre le fait qu'elle ne permette pas de rendre complètement invariant un schéma, elle réduit son ordre de précision ; il est alors nécessaire de partir d'un schéma d'ordre élevé.
- la méthode préservant l'invariance par transformation d'échelle ne prend pas en compte les autres symétries ; du coup, les lois de conservation ou d'évolution des quantités remarquables associées à une symétrie quelconque ne sont pas transportées. En fait cette méthode n'est applicable que pour la famille d'équations admettant la transformation d'échelle comme symétrie.
- la méthode utilisant les invariants en différences finies produit une famille nombreuse de schémas invariants. Cependant, il n'y a pas de critères de stabilité ou d'ordre de précision. Il n'y a donc pas de critères permettant de discerner un schéma ayant de bonnes propriétés numériques d'un mauvais.

Cette présentation sommaire de trois intégrateurs géométrique pour les EDP amène comme premières constatations :

- Les approches géométriques sont d'autant plus variées qu'il est possible d'en exploiter la richesse. Le formalisme employé, ainsi que les propriétés à conserver permettent d'établir autant de méthodes d'intégration.
- Cependant, aucune des approches ne permet d'obtenir un unique schéma invariant associé à une équation. Il subsiste toujours un paramètre, une fonction, une famille d'invariants à choisir de façon arbitraire. Ce choix conditionne la qualité numérique du schéma.

Bibliographie

- [1] R. Abraham and J. Marsden. *Foundations of Mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- [2] H. Aref and N. Pomphrey. Integrable and chaotic motions of four vortices I. The case of identical vortices. *Proc. R. Soc. Lond.*, 380(A) :359–387, 1982.
- [3] V. I. Arnold. Sur la géométrie différentielle des groupes de Lie de dimension infinie et ses applications à l’hydrodynamique des fluides parfaits. In *Ann. Inst. Fourier*, volume 16, pages 319–361. 1966.
- [4] V. I. Arnold. *Geometrical Methods in the Theory of Ordinary Differential Equations*. Springer-Verlag, 1988.
- [5] V. I. Arnold. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. Springer-Verlag, 1991.
- [6] V. I. Arnold, V. V. Kozlov, and A. I. Neishtadt. *Dynamical Systems III, Mathematical Aspects of Classical and Celestial Mechanics*, volume 3 of *Encyclopedia of Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, 2nd edition, 1988.
- [7] U. M. Ascher and R. I. McLachlan. Multisymplectic box schemes and the Korteweg-de-Vries equation. *Appl. Numer. Math.*, 48 :255–269, 2004.
- [8] M. I. Bakirova, V. A. Doronitsyn, and R. V. Kozlov. Symmetry-preserving differences schemes for some heat transfer equations. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 30 :8139–8155, 1997.
- [9] E. Bécu and V. Pavlov. Évolution de configurations de tourbillons avec les mêmes invariants globaux. *Comptes Rendus Mécanique*, 332 :835–840, 2004.
- [10] E. Bécu and V. Pavlov. Evolution of localized vortices in the presence of stochastic perturbations. *Nonlinear Processes in Geophysics*, 13 :41–51, 2006.
- [11] S. Boatto and R. T. Pierrehumbert. Dynamics of a passive tracer in velocity field of four identical point vortices. *J. Fluid Mech.*, 394 :137–174, 1999.
- [12] T. J. Bridges. Multi-symplectic structures and wave propagation. *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.*, 121 :147–190, 1997.
- [13] T. J. Bridges, P. E. Hydon, and S. Reich. Vorticity and symplecticity in Lagrangian fluid dynamics. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 38 :1403–1418, 2005.

- [14] T. J. Bridges and S. Reich. Multisymplectic integrators : numerical schemes for Hamiltonian PDEs that conserve symplecticity. *Phys. Lett., A* :184–193, 2001.
- [15] C. J. Budd and G. J. Collins. Symmetry based numerical methods for partial differential equations. *Numerical analysis, Notes Math.*, 380 :16–36, 1998. Longman, Harlow.
- [16] C. J. Budd and V. A. Dorodnitsyn. Symmetry adapted moving mesh schemes for the nonlinear Schrödinger equation. *J. Phys.*, 34(48) :10387–10400, 2001.
- [17] C.J. Budd and M. Piggott. Geometric integration and its applications. Preprint Dept. of Math. Sc., Univ. of Bath, 2000.
- [18] J. M. Burgers. *The Nonlinear Diffusion Equation*. Riedel, Boston, 1974.
- [19] J. A. Cadzow. Discrete calculus of variations. *Internat J. Control.*, 11 :393–407, 1970.
- [20] M. P. Calvo and E. Hairer. Accurate long-term integration of dynamical systems. *Journal of Applied Mathematics*, 18 :95–105, 1995.
- [21] B. J. Cantwell. *Introduction to symmetry analysis*. Cambridge University Press, 2002.
- [22] É. Cartan. *La Méthode du Repère Mobile, La Théorie des Groupes Continues, et Les Espaces Généralisés*. Number 5 in Exposés de Géométrie. Hermann, 1935.
- [23] M. S. A. C. Castilla, V. Moauro, P. Negrini, and W. M. Oliva. The four positive vortices problem : regions of chaotic behavior and the non-integrability. *Ann. Inst. Henri Poincaré*, 59(1) :99–115, 1993.
- [24] P. J. Channell and C. Scovel. Symplectic integration of Hamiltonian systems. *Nonlinearity*, 3 :231–259, 1990.
- [25] J-B. Chen. Total variation in discrete multisymplectic field and multisymplectic-energy-momentum integrators. *Letters in Mathematical Physics*, 61 :63–73, 2002.
- [26] J-B. Chen, H. Y. Guo, and K. Wu. Discrete total variation calculus and Lee’s discrete mechanics. *Applied Mathematics and Computation*, 177 :226–234, 2006.
- [27] J-B. Chen and M. Z. Qin. Multisymplectic Fourier pseudospectral method for the nonlinear Schrödinger equation. *Electron. Trans. Numer. Anal*, 12 :193–204, 2001.
- [28] J-B. Chen and M. Z. Qin. Multisymplectic composition integrators of high orders. *J. Comput. Math*, 21 :647–656, 2003.
- [29] J-B. Chen, M. Z. Qin, and Y-F Tang. Symplectic and multisymplectic methods for the nonlinear Schrödinger equation. *Comput. Math. Appl.*, 43 :1095–1106, 2002.

- [30] G. Cicogna. A discussion on the different notions of symmetry of differential equations. *Proceedings of Institute of Mathematics of NAS of Ukraine*, 50 :77–84, 2004.
- [31] G. J. Cooper. Stability of Runge-Kutta methods for trajectory problems. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 13(7), 1987.
- [32] A. S. Dawes. Invariant numerical methods. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 56(8) :1185–1191, 2008.
- [33] C. de Boor. *Good approximation by splines with variable knots II*. 363. Springer Lecture Note, Springer-Verlag edition, 1973.
- [34] S. Decossin and V. Pavlov. Quelques remarques sur la dynamique Hamiltonienne des tourbillons. *C.R. Acad. Sci. Paris, IIb*(329) :901–906, 2001.
- [35] V. A. Dorodnitsyn. Finite-difference models entirely inheriting continuous symmetry of original differential equations. *International Journal of Modern Physics C, (Physics and Computers)*, 5(4) :723–734, 1994.
- [36] V. A. Dorodnitsyn. Some new invariant difference equations on evolutionary grids. *IMACS World Congress of Computational and Applied Mathematics*, 1(Proceedings of 14-th), 1994.
- [37] V. A. Dorodnitsyn. Continuous symmetries of finite-difference evolution equations and grids. *Proceedings of Workshop on Symmetries and Integrability of Difference Equations, CRM*, 9 :103–112, 1996.
- [38] V. A. Dorodnitsyn. Group theoretical methods for finite difference modeling. *Proceedings of the First World Congress of Nonlinear Analysts*, pages 979–990, 1996.
- [39] V. A. Dorodnitsyn and R. Kozlov. The whole set of symmetry preserving discrete version of a heat transfer equation with a source. preprint 4/1997, 1997.
- [40] D. B. Duncan. Symplectic finite difference approximations of the nonlinear Klein-Gordon equation. *SIAM J. Num. Anal.*, 1995.
- [41] A. Echeverría-Enríquez, M. de León, M. C. Muñoz-Lecanda, and N. Román-Roy. Extended Hamiltonian systems in multisymplectic field theories. *Journal of Mathematical Physics*, 48(11) :112901–+, November 2007.
- [42] M. Fels and P. J. Olver. Moving coframes I. a practical algorithm. *Acta Appl. Math.*, 51 :161–213, 1998.
- [43] M. Fels and P. J. Olver. Moving coframes II. regularization and theoretical foundations. *Acta Appl. Math.*, 55 :127–208, 1999.
- [44] K. S. Fine, A. S. Cass, W-G. Flynn, and C. F. Driscoll. Relaxation of 2d turbulence to vortex crystals. *Phys. Rev. Lett.*, 25, 1995.
- [45] J. E. Flaherty, J. M. Coyle, R. Ludwig, and S. F. Davis. Adaptive finite element methods for parabolic partial differential equations. *Adaptive*

- Computational Methods for Partial Differential Equations*, pages 144–164, 1983.
- [46] M. Gandarias, E. Medina, and M. Bruzón. An approach to the $b - \epsilon$ model for turbulence through symmetry reductions. *Europhysics Letters*, 44(6) :679–685, 1998.
- [47] Z. Ge and J. E. Marsden. Lie-Poisson Hamilton-Jacobi theory and Lie-Poisson integrators. *Physics Letters A*, 133 :134–139, November 1988.
- [48] S. S. Girimaji and Y. Zhou. Spectrum and energy transfer in steady Burgers turbulence. Technical Report 95-13, ICASE, NASA, March 1995.
- [49] O. Gonzalez. Time integration and discrete Hamiltonian systems. *J. Nonlinear Sci.*, 6 :449–468, 1996.
- [50] O. Gonzalez and J. C. Simo. On the stability of symplectic and energy-momentum algorithms for non-linear Hamiltonian systems with symmetry. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 134(3-4) :197–222, 1996.
- [51] M. J. Gotay. A multisymplectic framework for classical field theory and the calculus of variations I : Covariant Hamiltonian formalism. *Mechanics, Analysis and Geometry : 200 Years after Lagrange*, pages 203–235, 1991. Ed. Elsevier Sciences Pub.
- [52] M. J. Gotay. A multisymplectic framework for classical field theory and the calculus of variations II : Space + Time decomposition. *Diff. Geom. Appl.*, 1 :375–390, 1991.
- [53] V. Grassi, R. A. Leo, G. Soliani, and P. Tempesta. Vorticities and invariant surfaces generated by symmetries for the 3D Navier-Stokes equation. *Physica A*, 286 :79–108, 2000.
- [54] E. Hairer. Variable time step integration with symplectic methods. *Applied Numerical Mathematics : Transactions of IMACS*, 25(2-3) :219–227, 1997.
- [55] E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner. *Geometric Numerical Integration*. Springer-Verlag, 2002.
- [56] E. Hairer, S. P. Nørsett, and G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations I*. Springer-Verlag, 1993.
- [57] E. Hairer and G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations II*. Springer-Verlag, 1996.
- [58] E. Hoarau, C. David, P. Sagaut, and T. H. Le. Lie group stability of finite difference schemes. *Discrete and continuous dynamical systems*, supp. :1–10, 2007.
- [59] J. Hong, H. Liu, and G. Sun. The multisymplecticity of partitioned Runge-Kutta methods for Hamiltonian PDEs. *Mathematics of Computation*, 75(253) :167–181, 2005.

- [60] J. Hong and Y. Liu. Multisymplecticity of the centred box scheme for a class of Hamiltonian PDEs and an application to quasi-periodically solitary waves. *Math. Comput. Modelling*, 39 :1035–1047, 2004.
- [61] J. Hong and M. Z. Qin. Multisymplecticity of the centred box scheme for Hamiltonian PDEs with $m \geq 2$ space dimensions. *Appl. Math. Lett.*, pages 1005–1011, 2002.
- [62] W. Huang and B. Leimkuhler. The adaptive Verlet method. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 18(1) :239–256, 1997.
- [63] W. Huang, Y. Ren, and R.D. Russell. Moving Mesh Partial Differential Equations (MMPDES) based on the equidistribution principle. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 31(3) :709–730, 1994.
- [64] X. P. Huang and C. F. Driscoll. Relaxation of 2d turbulence to a metaequilibrium near the minimum enstrophy state. *Phys. Rev. Lett.*, 72, 1994.
- [65] P. Hydon. *Symmetry Methods for Differential Equations*. Cambridge University Press, 2000.
- [66] P. E. Hydon. Multisymplectic conservation laws for differential and differential-difference equations. In London A, editor, *Proc. Roy. Soc.*
- [67] P. E. Hydon. How to construct the discrete symmetries of partial differential equations. *Eur. J. Appl. Math.*, 11 :515–527, 2000.
- [68] N. H. Ibragimov. *CRC Handbook of Lie Group Analysis of Differential Equations, Vol. I : Symmetries, Exact Solutions, and Conservation Laws*. CRCC Press : Boca Raton, 1994.
- [69] N. H. Ibragimov. *CRC Handbook of Lie Group Analysis of Differential Equations, Vol. II : Applications in Engineering and Physical Sciences*. CRCC Press : Boca Raton, 1994.
- [70] N. H. Ibragimov. A new conservation theorem. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 333 :311–328, September 2007.
- [71] N. H. Ibragimov and T. Kolsrud. Lagrangian approach to evolution equations : Symmetries and conservation laws. *Nonlinear Dynamics*, 36 :29–40, 2004.
- [72] A. Iserles and A. Zanna. Preserving algebraic invariants with Runge–Kutta methods. *J. Comput. Appld Maths. to appear.*, 2000.
- [73] A. L. Islas and C. M. Schober. On the preservation of phase space structure under multisymplectic discretization. *J. Comput. Phys.*, 197(2) :585–609, 2004.
- [74] A. L. Islas and C. M. Schober. Backward error analysis for multisymplectic discretizations of Hamiltonian PDEs. *Math. Comput. Simul.*, 69(3-4) :290–303, 2005.
- [75] B. W. Jordan and E. Polak. Theory of a class of discrete optimal control systems. *J. Electroni. Control*, 17 :697–711, 1964.

- [76] C. Kane, J. E. Marsden, and M. Ortiz. Symplectic energy-momentum integrators. *J. Math. Phys.*, 40 :3353–3371, 1999.
- [77] C. Kane, J. E. Marsden, M. Ortiz, and M. West. Variational integrators and the Newmark algorithm for conservative and dissipative mechanical systems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 49(10) :1295–1325, 2000.
- [78] P. Kim. *Invariantization of Numerical Schemes Using Moving Frames*. PhD thesis, School of Mathematics, University of Minnesota, Minneapolis, 2006.
- [79] P. Kim. Invariantization of numerical schemes using moving frames. *BIT Numerical Mathematics*, 47(3) :525–546, 2007.
- [80] P. Kim. Invariantization of the Crank–Nicolson method for Burgers equation. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 237(2) :243–254, 2008.
- [81] G. R. Kirchhoff. *Vorlesungen uber mathematische*. Teubner., Leipzig, 1876.
- [82] A. N. Kolmogorov. Equations of turbulent motion in an incompressible fluid. *Izv. Akad. Nauk. USSR*, VI(1.2) :56–58, 1942.
- [83] R. Kozlov. Conservation laws of semidiscrete Hamiltonian equations. *Journal of Mathematical Physics*, 42(4) :1708–1727, 2001.
- [84] S. B. Kuskin. *Handbook of Dynamical Systems*, volume 1B, chapter 15 Hamiltonian PDEs, pages 1087–1133. Elsevier, 2006.
- [85] A. Laforgia, X. Leoncini, L. Kuznetsov, and G. M. Zaslavsky. Passive tracer dynamics in 4 point-vortex flow. *Eur. Phys. J.*, B(20) :427–440, 2001.
- [86] T. D. Lee. Can time be a discrete dynamical variable? *Phys. Lett.*, 122 :217–220, 1983.
- [87] T. D. Lee. Difference equations and conservation laws. *J. Stat. Phys.*, 46 :843–860, 1987.
- [88] B. Leimkuhler and S. Reich. *Simulating Hamiltonian Dynamics*. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, 2004.
- [89] M. Leok. *Foundations of Computational Geometric Mechanics*. PhD thesis, California Institute of Technology, Pasadena, California, 2004.
- [90] D. Levi, J. Negro, and M. A. del Olmo. Lie symmetries of difference equations. *Czechoslovak Journal of Physics*, 51(4), 2001.
- [91] A. Lew. *Variational Time Integrators in Computational Solid Mechanics*. PhD thesis, California Institute of Technology, Pasadena, California, 2003.
- [92] A. Lew, J. E. Marsden, M. Ortiz, and M. West. Asynchronous variational integrators. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 2 :85–146, 2003.
- [93] A. Lew, J. E. Marsden, M. Ortiz, and M. West. Variational time integrators. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2003.

- [94] D. Lewis, J. E. Marsden, R. Montgomery, and T. S. Ratiu. The hamiltonian structure for dynamic free boundary problems. *Physica D*, 18 :391–404, 1986.
- [95] Q. Li, Y. Sun, and Y. Wang. On multisymplectic integrators based on Runge-Kutta-Nystrom methods for Hamiltonian wave equations. *Appl. Math. Comput.*, 182 :1056–1063, 2006.
- [96] B. Lindgren, J. M. Osterlund, and A. V. Johansson. Evaluation of scaling laws derived from Lie group symmetry methods in zero-pressure-gradient turbulent boundary layers. *J. Fluid Mech.*, 502 :127–152, 2004.
- [97] T. Liu and M. Z. Qin. Multisymplectic geometry and multisymplectic Preissman scheme for the KP equation. *J. Math. Phys.*, 43 :4060–4077, 2002.
- [98] J. D. Logan. First integrals in the discrete calculus of variations. *Aequationes Mathematicae*, 9 :210–220, 1973.
- [99] S. Maeda. Canonical structure and symmetries for discrete systems. *Math. Japonica*, 25 :405–420, 1980.
- [100] S. Maeda. Extension of discrete Noether theorem. *Math. Japonica*, 26 :85–90, 1980.
- [101] S. Maeda. Lagrangian formulation of discrete systems and concept of difference space. *Math. Japonica*, 27 :345–356, 1980.
- [102] J. E. Marsden, G. W. Patrick, and S. Shkoller. Multisymplectic geometry, variational integrators, and nonlinear PDEs. *Communication in Mathematical Physics*, 199(2) :351–395, 1998.
- [103] J. E. Marsden, S. Pekarsky, S. Shkoller, and M. West. Variational methods, multisymplectic geometry and continuum mechanics. *J. Geom. Phys.*, 38(3-4) :253–284, 2001.
- [104] J. E. Marsden and T. S. Ratiu. *Introduction to Mechanics and Symmetry*, volume 17 of *Texts in Applied Mathematics*. Springer-Verlag, 2nd edition, 1999.
- [105] J. E. Marsden and S. Shkoller. Multisymplectic geometry, covariant hamiltonians and water waves. *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.*, 125 :553–575, 1999.
- [106] J. E. Marsden and M. West. Discrete mechanics and variational integrators. *Acta Numerica*, 10, 2001. Cambridge University Press.
- [107] R. McLachlan. Symplectic integration of Hamiltonian wave equation. *Numer. Math.*, 66 :465–492, 1994.
- [108] R. I. McLachlan. Explicit Lie-Poisson Intgration and the Euler equations. *Phys. Rev. Lett.*, 71 :3043–3046, 1993.
- [109] R. I. McLachlan, G. R. W. Quispel, and G. S. Turner. Numerical integrators that preserve symmetries and reversing symmetries. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 35(2) :586–599, 1998.

- [110] R.I. McLachlan and G. R. W. Quispel. Splitting methods. *Acta Numerica*, 11 :341–434, 2002.
- [111] B. E. Moore and S. Reich. Dispersion relations for numerical methods that preserve a multisymplectic conservation law. preprint.
- [112] B. E. Moore and S. Reich. Backward error analysis for multisymplectic integration methods. *Numer. Math.*, 95 :625–652, 2003.
- [113] B. E. Moore and S. Reich. Multi-symplectic integration methods for Hamiltonian PDEs. *Future Gener. Comput. Syst.*, 19(3) :395–402, 2003.
- [114] E. Nøther. Invariante variationsprobleme. *Konig. Gesell. Wissen.*, pages 235–257, 1918.
- [115] A. Noullez, S. N. Gurbatov, E. Aurell, and S. I. Simdyankin. Global picture of self-similar and non-self-similar decay in Burgers turbulence. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, 71(5) :056305.1–056305.14, 2005.
- [116] A. Noullez and J.-F. Pinton. Global fluctuations in decaying Burgers turbulence. *The European Physical Journal B*, 28(2) :231–241, 2002.
- [117] M. Oberlack. Symmetries, invariance and scaling-laws in inhomogeneous turbulent shear flows. *Flow, Turbulence and Combustion*, 62(2), 1999.
- [118] M. Oberlack. *Symmetries of the Navier–Stokes equations and their applications for subgrid-models in large eddy simulation of turbulence*. Fundamental Problematic Issues in Turbulence, Birkhäuser-Verlag, 1999.
- [119] M. Oberlack. On symmetries on invariant solutions of laminar and turbulent wall-bounded flows. *Z. Angew. Math. Mech.*, 80 :791–800, 2000.
- [120] P. J. Olver. *Applications of Lie Groups to Differential Equations*. Springer-Verlag., 2nd edition, 1993.
- [121] P. J. Olver. *The Concise Handbook of Algebra*, chapter Lie Groups and Differential Equations. Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, Netherlands, 2002. 92-97.
- [122] P. J. Olver. Moving frames. *J.Symb.Comp.*, 3(501-512), 2003.
- [123] D. I. Pullin and P. G. Saffman. Long-time symplectic integration : The example of four-vortex motion. In The Royal Society, editor, *Mathematical and Physical Sciences*, volume 432, pages 481–494, 1991.
- [124] G. R. W. Quispel and C. Dyt. Solving ODE’s numerically while preserving symmetries, Hamiltonian structure, phase space volume or first integrals. *Proceedings IMALS*, 2 :601–607, 1997.
- [125] G. R. W. Quispel. Volume-preserving integrators. 206 :26–30, 1995.
- [126] D. Razafindralandy. *Contribution à l’étude mathématique et numérique de la simulation des grandes échelles*. PhD thesis, Université de La Rochelle, 2005.

- [127] D. Razafindralandy and A. Hamdouni. Subgrid models preserving the symmetry group of the Navier-Stokes equations. *Comptes Rendus Mecanique.*, 333 :481–486, 2005.
- [128] D. Razafindralandy and A. Hamdouni. Consequences of symmetries on the analysis and construction of turbulence models. *SIGMA*, 2 :20 p., 2006.
- [129] D. Razafindralandy and A. Hamdouni. Analysis of subgrid models of heat convection by symmetry group theory. *Comptes rendus. Mécanique*, 2007.
- [130] D. Razafindralandy, A. Hamdouni, and C. Béghein. A class of subgrid-scale models preserving the symmetry group of Navier–Stokes equations. *Comm. Nonlinear Sci. Numer. Simulation*, 12 :243–253, 2007.
- [131] D. Razafindralandy, A. Hamdouni, and M. Chhay. *Symmetry in Turbulence Simulation*, chapter IV. Numerical Simulation Research Progress. Nova Publishers, 2008.
- [132] D. Razafindralandy, A. Hamdouni, and M. Oberlack. Analysis and development of subgrid turbulence models preserving the symmetry properties of the Navier-Stokes equations. *to appear in European Journal of Mechanics - B/Fluids.*, 2006. available online 11/22/06.
- [133] S. Reich. Numerical Integration of the Generalized Euler Equations. Technical report, Vancouver, BC, Canada, Canada, 1993.
- [134] S. Reich. Symplectic integration of constrained Hamiltonian systems by composition methods. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 33(2) :475–491, 1996.
- [135] S. Reich. Backward error analysis for numerical integrators. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 36(5) :1549–1570, 1999.
- [136] S. Reich. Multisymplectic Runge-Kutta collocation methods for Hamiltonian wave equations. *J. Comput. Phys.*, 157 :473–499, 2000.
- [137] Y. Ren and R. D. Russell. Moving mesh techniques based upon equidistribution, and their stability. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 13 :1265–1286, 1992.
- [138] B. N. Ryland, R. I. McLachlan, and J. Franck. On multisymplecticity of partitioned Runge-Kutta and splitting methods. *International Journal of Computer Mathematics*, 84(6) :847–869, 2007.
- [139] J. M. Sanz-Serna. "symplectic integrators for hamiltonian problems : An overview.
- [140] J. M. Sanz-Serna and M. P. Calvo. *Numerical Hamiltonian Systems*. Chapman and Hall, London, 1994.
- [141] C. M. Schober and T. H. Wlodarczyk. Dispersive properties of multisymplectic integrators. *J. Comput. Phys.*, 227(10) :5090–5104, 2008.
- [142] Y. I. Shokin. *The Method of Differential Approximation*. Springer-Verlag, 1983.

- [143] J. C. Simo, N. Tarnow, and K. K. Wong. Exact energy-momentum conserving algorithms and symplectic schemes for nonlinear dynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 10 :63–116, 1992.
- [144] W. Strauss and L. Vazquez. Numerical solution of a nonlinear Klein-Gordon equation. *J. Comput. Phys.*, 28 :271–278, 1978.
- [145] T. J. Stuchi. Symplectic integrators revisited. *Brazilian Journal of Physics*, 32(2) :958–979, 2002.
- [146] G. Sun. Construction of high order symplectic Runge-Kutta methods. *Journal of Computational Mathematics*, 11(250-260), 1993.
- [147] Y-J. Sun and M. Z. Qin. Construction of multisymplectic schemes of any finite order for modified wave equations. *J. Math. Phys.*, 41 :7854–7868, 2000.
- [148] Y. Suris. Hamiltonian methods of Runge-Kutta type and their variational interpretation. *Math. Model.*, 2(4) :78–87, 1990.
- [149] S. Vasylykevych and J. E. Marsden. The Lie-Poisson structure of the Euler equations of an ideal fluid. *Dynamics of PDE*, 2(4) :281–300, 2005.
- [150] A. P. Veselov. Integrable discrete-time systems and difference operators. *Funct. Anal. Appl.*, 22(2) :83–93, 1988.
- [151] Y. Wang, B. Wang, and M. Z. Qin. Numerical implementation of the multisymplectic Preissman scheme and its equivalent schemes. *Appl. Math. Comput.*, 149 :299–326, 2004.
- [152] Y. Wang, B. Wang, H. Yang, and Y. Wang. An artificial boundary condition for the multisymplectic Preissman scheme. *J. Phys. Soc. Japan*, 73 :1457–1463, 2004.
- [153] Y. S. Wang and M. Z. Qin. Multisymplectic geometry and multisymplectic scheme for the nonlinear Klein Gordon equation. *J. Phys. Soc. Japan*, 70 :653–661, 2001.
- [154] Y. S. Wang and M. Z. Qin. Multisymplectic scheme for the nonlinear Klein Gordon equation. *Math. Comput. Modelling*, 36 :963–977, 2002.
- [155] Y. S. Wang and M. Z. Qin. Multisymplectic structure and multisymplectic scheme for the nonlinear wave equation. *Actae Mathematicae Applicatae Sinica, English Series*, 18 :169–176, 2002.
- [156] J. M. Wendlandt and J. E. Marsden. Mechanical integrators derived from a discrete variational principle. *Physica D*, 106 :223–246, 1997.
- [157] J. M. Wendlandt and J. E. Marsden. Mechanical systems with symmetry, variational principle and integration algorithms. In *Current and Future Direction in Applied Mathematics*, volume 106, pages 219–261, 1997.
- [158] M. West. *Variational Integrators*. PhD thesis, California Institute of Technology, Pasadena, California, 2004.

- [159] P. F. Zhao and M. Z. Qin. "multisymplectic geometry and multisymplectic preissman scheme for the kdv equation.
- [160] G. Ünal. Application of equivalence transformations to inertial subrange of turbulence. *Lie Group and Their Applications (1)*, 1 :232–240, 1994.