REVUE FRANÇAISE D'INFORMATIQUE ET DE RECHERCHE OPÉRATIONNELLE

ANDRÉ SALÈS
BRIGITTE BRAMI-DÉPAUX
JEAN GUY

Résolution d'une équation différentielle et d'une équation aux dérivées partielles avec conditions aux limites à l'aide d'une méthode intégrale non linéaire

Revue française d'informatique et de recherche opérationnelle, tome 2, nº R2 (1968), p. 3-9
<http://www.numdam.org/item?id=M2AN_1968__2_2_3_0>

R.I.R.O.
(2e année, N° 10, 1968, p. 3-10)

RESOLUTION D'UNE EQUATION DIFFERENTIELLE ET D'UNE EQUATION AUX DERIVEES PARTIELLES AVEC CONDITIONS AUX LIMITES A L'AIDE D'UNE METHODE INTEGRALE NON LINEAIRE

par M. André SALÈS, Mme Brigitte BRAMI-DÉPAUX et M. Jean GUY (*)

Résumé. — *Afin de préciser les possibilités d'emploi d'une méthode intégrale récemment décrite pour la résolution de certaines équations différentielles ou aux dérivées partielles du 2e ordre, deux exemples sont complètement traités, le premier dans le cas d'un espace fini à une dimension, le second dans le cas d'un espace infini à trois dimensions.*

Nous avons utilisé la méthode itérative dont la théorie a été précédemment exposée [1, 2], en nous limitant au cas où nous traitons $\xi(M')$ comme un paramètre ajustable, pour résoudre deux exemples d'équations du type

$$\Delta U = f(M) + g(M) \cdot U(M) \tag{1}$$

concernant respectivement un domaine fini et un domaine infini.

Premier exemple. Résolution d'une équation différentielle

Dans l'espace à une dimension, l'équation (1) devient :

$$U''(x) = f(x) + g(x) \cdot U(x) \tag{2}$$

et nous nous proposons d'obtenir la solution de (2), définie à l'intérieur du domaine $D(0 \leqslant x \leqslant 1)$ et satisfaisant aux conditions aux limites

$$U(0) = U(1) = 0.$$

(*) Laboratoire de Physique moléculaire théorique de la Faculté des Sciences de Paris.

Les fonctions $f(x)$ et $g(x)$ ont été choisies telles que la solution recherchée soit exactement :

$$U(x) = x^2(x-1)(3x-1) \tag{3}$$

La forme analytique (3), relativement simple, a été retenue car elle accumule plusieurs difficultés pour le calcul numérique : absence de symétrie, existence d'une racine ($x = 1/3$) à l'intérieur de D, racine double pour la limite $x = 0$. D'autre part, la fonction $g(x)$ a été prise de la forme

$$g(x) = -a[1 + (x-1)^2] \tag{4}$$

de manière à traiter un problème pour lequel $g(x)$ ne soit pas identique à une constante (ici $g(0) = 2g(1)$).

Ces choix entraînent

(5)

$$f(x) = 3a \cdot x^6 - 10a \cdot x^5 + 15a \cdot x^4 - 10a \cdot x^3 + (36 + 2a)x^2 - 24x + 2$$

La série de Liouville-Neumann, associée à l'équation de Fredholm

$$U(z) = F(z) + \int_D G(x, z) \cdot g(x) \cdot U(x) \cdot \mathrm{d}x \tag{6}$$

où $G(x, z)$ représente la fonction de Green adaptée à notre problème, soit [4]

$$G(x, z) = \begin{cases} (x-1)z & \text{pour} \quad 0 \leqslant z \leqslant x \\ x(z-1) & \text{pour} \quad x \leqslant z \leqslant 1 \end{cases} \tag{7}$$

est sûrement convergente pour [3]

$$|a| \leqslant \left\{ \int_0^1 \int_0^1 |G(x, z) \cdot [1 + (x-1)^2]|^2 \, \mathrm{d}x \cdot \mathrm{d}z \right\}^{-1/2} \tag{8}$$

soit, dans le cas étudié $|a| \leqslant 7{,}3$.

Nous avons pris $a = 10$ et vérifié numériquement que cette valeur provoque la divergence de la série de Liouville-Neumann. Dans ces conditions, où les techniques intégrales usuelles deviennent inopérantes pour résoudre (2), nous avons appliqué la méthode itérative définie par la relation [1, 2]

$$U_{n+1}(z) = F(z) - \frac{A \cdot \xi \int_D G(x, z) \cdot g(x) \cdot U_n(x) \, \mathrm{d}x}{A[1-\xi] + \int_D [g(x) \cdot h(x) - h''(x)] U_n(x) \cdot \mathrm{d}x} \tag{9}$$

pour laquelle nous utilisons $h(x) = x(x-1)$, c'est-à-dire le polynôme le plus simple s'annulant aux limites de D. Le paramètre ξ a été ajusté en rendant minimum [2]

$$\int_D [U_2(x;\,\xi) - U_1(x;\,\xi)]^2\,\mathrm{d}x, \tag{10}$$

ce qui conduit à deux valeurs de ξ, soit $\xi_1 = -8{,}53$ et $\xi_2 = -18{,}0$. Le tableau I permet de comparer à la solution rigoureuse (3) les solutions approchées obtenues au 4e et au 8e tour d'itération en utilisant les valeurs $\xi = \xi_1$ et $\xi = \xi_2$. Une colonne supplémentaire donne également le résultat de la 4e itération par la méthode de Sokolov [5] lorsque le paramètre α_n de cet auteur est une constante.

TABLEAU I

x	$U_0 = F(x)$	$\xi = \xi_1 = -8{,}53$		$\xi = \xi_2 = -18{,}0$		SOKOLOV $U_4(x)$	SOLUTION EXACTE $U(x)$
		$U_4(x)$	$U_8(x)$	$U_4(x)$	$U_8(x)$		
0	0	0	0	0	0	0	0
0,1	+ 0,024 3	− 0,003 1	0,005 8	0,005 3	0,006 6	− 0,610 3	0,006 3
0,2	+ 0,049 9	− 0,008 1	0,011 8	0,012 7	0,013 0	− 1,014 7	0,012 8
0,3	+ 0,064 4	− 0,028 3	0,004 7	0,009 7	0,006 1	− 1,273 9	0,006 3
0,4	+ 0,060 6	− 0,068 1	− 0,021 2	− 0,010 3	− 0,020 0	− 1,424 4	− 0,019 2
0,5	+ 0,036 3	− 0,122 9	− 0,064 8	− 0,047 7	− 0,064 1	− 1,483 6	− 0,062 5
0,6	− 0,005 2	− 0,180 8	− 0,117 5	− 0,096 1	− 0,117 4	− 1,453 1	− 0,115 2
0,7	− 0,053 8	− 0,223 2	− 0,163 7	− 0,141 7	− 0,164 1	− 1,320 8	− 0,161 7
0,8	− 0,090 8	− 0,226 9	− 0,180 6	− 0,162 4	− 0,181 3	− 1,061 7	− 0,179 2
0,9	− 0,086 9	− 0,163 5	− 0,138 4	− 0,128 1	− 0,139 0	− 0,638 2	− 0,137 7
1	0	0	0	0	0	0	0

Trois paramètres, que nous désignons par B_{n-1}, η_n et σ_n^2 sont particulièrement intéressants pour tester la convergence de la suite (9). Les relations de définition sont les suivantes :

$$B_{n-1} = \int_D [g(x)h(x) - h''(x)]U_{n-1}(x)\cdot \mathrm{d}x \tag{11}$$

$$\eta_n = \frac{A\xi}{A[1-\xi] + B_{n-1}} \tag{12}$$

$$\sigma_n^2 = \int_D [U_n(x) - U_{n-1}(x)]^2\,\mathrm{d}x \tag{13}$$

Lorsque la fonction $U_n(x)$ devient très proche de la solution exacte $U(x)$, la comparaison de (9) et de (6) montre que $B_{n-1} \to -A$, $\eta_n \to -1$ pour $n \to +\infty$ s'il y a convergence; σ_n^2 doit, de son côté, tendre vers zéro. L'évolution de ces trois paramètres apparaît clairement dans le tableau II.

TABLEAU II

	$\xi = \xi_1 = -8{,}53$			$\xi = \xi_2 = -18{,}0$		
n	B_{n-1}	η_n	σ_n^2	B_{n-1}	η_n	σ_n^2
1	+ 0,033 8	+ 1,71	$1{,}7 \cdot 10^{-3}$	+ 0,033 8	− 4	$9{,}4 \cdot 10^{-3}$
2	+ 0,005 9	− 1,22	$1{,}2 \cdot 10^{-3}$	+ 0,099 0	+ 0,767	$3{,}7 \cdot 10^{-2}$
3	+ 0,019 6	− 7,52	$3{,}6 \cdot 10^{-2}$	− 0,028 9	− 0,573	$2{,}0 \cdot 10^{-3}$
4	− 0,011 4	− 0,591	$1{,}4 \cdot 10^{-2}$	+ 0,000 4	− 0,956	$1{,}5 \cdot 10^{-4}$
5	− 0,017 3	− 0,503	$3{,}0 \cdot 10^{-3}$	+ 0,005 9	− 1,09	$5{,}2 \cdot 10^{-5}$
6	+ 0,003 8	− 1,08	$7{,}3 \cdot 10^{-5}$	+ 0,006 2	− 1,10	$2{,}4 \cdot 10^{-5}$
7	+ 0,005 0	− 1,16	$9{,}3 \cdot 10^{-5}$	+ 0,004 5	− 1,05	$7{,}3 \cdot 10^{-6}$
8	+ 0,001 7	− 0,969	$1{,}1 \cdot 10^{-6}$	+ 0,002 9	− 1,01	$1{,}6 \cdot 10^{-6}$

$A = -0{,}002\,3$

Deuxième exemple : résolution d'une équation aux dérivées partielles définie dans l'espace infini R^3

Nous traitons cette fois l'exemple physique simple du calcul de la polarisabilité de l'atome d'hydrogène. Dans le système des unités de Hartree, il convient de résoudre l'équation [6]

$$\Delta U = 2z \cdot e^{-r} + \left(1 - \frac{2}{r}\right) U \tag{14}$$

où e^{-r} représente, au facteur de normalisation près, la fonction propre Ψ_0 de l'état fondamental de l'atome et $\left(1 - \frac{2}{r}\right)$ le rapport $\frac{\Delta \Psi_0}{\Psi_0}$.

La solution exacte de (14) est connue [6]

$$U_e = -z\, e^{-r}\left(1 + \frac{r}{2}\right) \tag{15}$$

et la polarisabilité α de l'atome d'hydrogène est donnée par la quadrature

$$\alpha = -\int_D \left[4zU\Psi_0 + \Psi_0^2 \left|\overrightarrow{\text{grad}}\, \frac{U}{\Psi_0}\right|^2\right] d\tau = 4{,}5 a_0^3 \tag{16}$$

L'équation (14) est équivalente à

$$\Delta U - k^2 U = 2z \cdot e^{-r} + \left(1 - k^2 - \frac{2}{r}\right) U \tag{17}$$

et nous utilisons la fonction de Green

$$G(M, M') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-kr_{MM'}}}{r_{MM'}}, \tag{18}$$

associée à l'opérateur $\Delta - k^2$, cette fonction n'introduisant pas de difficultés en ce qui concerne les intégrales à calculer, contrairement à $-\frac{1}{4\pi} \cdot \frac{1}{r_{MM'}}$, fonction de Green associée à Δ [2].

Il est pratique de prendre $k = 1$, ce qui simplifie la fonction

$$g(M) - k^2 = 1 - \frac{2}{r} - k^2 = -\frac{2}{r} \tag{19}$$

Pour cet exemple, l'équation intégrale singulière de Fredholm

$$U(M) = F(M) + \frac{1}{4\pi} \int_D \frac{2}{r_{M'}} \cdot \frac{e^{-r_{MM'}}}{r_{MM'}} U(M') \, d\tau' \tag{20}$$

déduite de (17) est résoluble par emploi de la série de Liouville-Neumann mais nous allons constater qu'une utilisation convenable de la relation itérative

(21)

$$U_{n+1}(M) = F(M) - \frac{A\xi \int_D G(M, M') \left(-\frac{2}{r_{M'}}\right) U_n(M') \, d\tau'}{A[1 - \xi] + \int_D \left[\left(1 - \frac{2}{r_{M'}}\right) h(M') - \Delta h(M')\right] U_n(M') \, d\tau'}$$

donne une convergence plus rapide. $U_n(M')$ étant antisymétrique en z', nous prenons $h(M') = z'$, ce qui représente la fonction la plus simple conduisant à une valeur non nulle de $A = \int_D f(M) \cdot h(M) \, d\tau$ (1).

Le paramètre ξ a été ajusté soit par le test (10) conduisant à $\xi = \xi_1 = 0{,}913$ soit par le test rendant extrémale l'intégrale [2]

(22)

$$\int_D \left[2z \cdot U_1(M; \xi) + \left(1 - \frac{2}{r}\right) U_1^2(M; \xi) + |\overrightarrow{\mathrm{grad}}\, U_1(M; \xi)|^2\right] d\tau$$

conduisant à $\xi = \xi_2 = 1{,}0625$.

---

(1) Dans le cas des équations intégrales singulières, l'annulation de $h(M')$ n'est pas nécessaire pour M' infiniment éloigné.

L'intégration est obtenue par voie analytique, en utilisant les coordonnées sphéroïdales de pôles 0 et M. Toutes les solutions sont du type :

$$U_n(M) = -z\,e^{-r}(\beta_n + \gamma_n r) \tag{23}$$

aussi bien pour la série de Liouville-Neumann que pour la suite définie par la relation (21).

Les résultats obtenus pour les fonctions et les polarisabilités sont rassemblés dans le tableau III; l'évolution des paramètres B_{n-1}, γ_n et σ_n^2 est donnée dans le tableau IV.

TABLEAU III

FONCTIONS $U_e(M) = -z\,e^{-r}(1 + 0{,}5\,r)$	POLARISABILITÉ $\alpha = 4{,}5$
$U_0(M) = -z\,e^{-r}(0{,}333\,333 + 0{,}333\,333\,r)$	3,444 444
SÉRIE DE LIOUVILLE-NEUMANN	
$U_1(M) = -z\,e^{-r}(0{,}611\,111\,1 + 0{,}444\,444\,4\,r)$	4,243 827
$U_2(M) = -z\,e^{-r}(0{,}787\,037\,0 + 0{,}481\,481\,4\,r)$	4,436 814
$U_3(M) = -z\,e^{-r}(0{,}887\,345\,7 + 0{,}493\,827\,2\,r)$	4,484 299
$U_4(M) = -z\,e^{-r}(0{,}941\,615\,2 + 0{,}497\,942\,4\,r)$	4,496 085
$U_5(M) = -z\,e^{-r}(0{,}970\,121\,7 + 0{,}499\,314\,1\,r)$	4,499 023
$U_6(M) = -z\,e^{-r}(0{,}984\,832\,2 + 0{,}499\,771\,4\,r)$	4,499 756
$U_7(M) = -z\,e^{-r}(0{,}992\,339\,9 + 0{,}499\,923\,8\,r)$	4,499 939
$\xi = 0{,}913$	
$U_1(M) = -z\,e^{-r}(0{,}844\,444\,4 + 0{,}537\,777\,8\,r)$	4,490 746
$U_2(M) = -z\,e^{-r}(0{,}923\,322\,8 + 0{,}509\,167\,6\,r)$	4,496 428
$U_3(M) = -z\,e^{-r}(0{,}968\,487\,6 + 0{,}504\,069\,4\,r)$	4,499 421
$U_4(M) = -z\,e^{-r}(0{,}986\,870\,6 + 0{,}501\,683\,7\,r)$	4,499 899
$U_5(M) = -z\,e^{-r}(0{,}994\,544\,8 + 0{,}500\,700\,0\,r)$	4,499 983
$U_6(M) = -z\,e^{-r}(0{,}997\,734\,2 + 0{,}500\,290\,7\,r)$	4,499 997
$U_7(M) = -z\,e^{-r}(0{,}999\,059\,1 + 0{,}500\,120\,7\,r)$	4,499 999 5
$\xi = 1{,}062\,5$	
$U_1(M) = -z\,e^{-r}(0{,}790\,322\,6 + 0{,}516\,129\,0\,r)$	4,468 002
$U_2(M) = -z\,e^{-r}(0{,}916\,016\,9 + 0{,}510\,071\,5\,r)$	4,495 722
$U_3(M) = -z\,e^{-r}(0{,}964\,865\,7 + 0{,}504\,304\,7\,r)$	4,499 259
$U_4(M) = -z\,e^{-r}(0{,}985\,295\,3 + 0{,}501\,803\,8\,r)$	4,499 870
$U_5(M) = -z\,e^{-r}(0{,}993\,852\,2 + 0{,}500\,754\,2\,r)$	4,499 977
$U_6(M) = -z\,e^{-r}(0{,}997\,431\,1 + 0{,}500\,315\,2\,r)$	4,499 996
$U_7(M) = -z\,e^{-r}(0{,}998\,926\,8 + 0{,}500\,131\,6\,r)$	4,499 999 3

TABLEAU IV

	$\xi = 0{,}913$			$\xi = 1{,}062\,5$		
n	B_{n-1}/π	η_n	σ_n^2	B_{n-1}/π	η_n	σ_n^2
1	− 37,333	− 1,840	3,45	− 37,333	− 1,645 16	2,76
2	− 65,138	− 0,980 89	$3{,}38 \cdot 10^{-3}$	− 62,194	− 1,027 29	$3{,}85 \cdot 10^{-2}$
3	− 63,653	− 1,005 97	$3{,}40 \cdot 10^{-3}$	− 63,623	− 1,005 57	$3{,}86 \cdot 10^{-3}$
4	− 63,886	− 1,001 95	$5{,}07 \cdot 10^{-4}$	− 63,851	− 1,002 19	$6{,}56 \cdot 10^{-4}$
5	− 63,952	− 1,000 83	$8{,}92 \cdot 10^{-5}$	− 63,938	− 1,000 91	$1{,}15 \cdot 10^{-4}$
6	− 63,980	− 1,000 34	$1{,}54 \cdot 10^{-5}$	− 63,974	− 1,000 38	$2{,}01 \cdot 10^{-5}$
7	− 63,992	− 1,000 14	$2{,}64 \cdot 10^{-6}$	− 63,989	− 1,000 16	$3{,}49 \cdot 10^{-6}$

$$\frac{A}{\pi} = 64$$

CONCLUSION

La méthode itérative proposée, correspondant à la formule (9), nous a permis sur un premier exemple d'obtenir la solution recherchée alors que les conditions de convergence de la série de Liouville-Neumann ne sont pas satisfaites.

Sur un deuxième exemple de nature physique conduisant à une équation de Fredholm singulière mais toutefois résoluble à l'aide de la série de Liouville-Neumann, la relation (9) nous a également fourni la solution avec une convergence plus rapide.

BIBLIOGRAPHIE

[1] J. GUY, A. SALÈS, F. JOLY-CABARET, *J. Phys.* **26**, 1965, p. 335-338.

[2] J. GUY, A. SALÈS, B. BRAMI-DÉPAUX, F. JOLY-CABARET, C. R. Acad. Sc., **265**, 1967, p. 109-111.

[3] S. G. MIKHLIN, *Integral equations*, Pergamon Press, edit. Londres (1957).

[4] H. MARGENAU et G. M. MURPHY, *The mathematics of Physics and Chemistry*, Van Nostrand edit, New York (1964).

[5] A. Yu. LUCHKA, *The method of averaging functional corrections theory and applications*, Academic Press (1965).

[6] J. C. SLATER et J. G. KIRKWOOD, *Phys. Rev.*, **37**, 1931, 682.