Notes du cours d'Équations aux Dérivées Partielles de l'ISIMA, première année
http://www.isima.fr/~leborgne

Problèmes aux différences finies : exemple de l'équation parabolique de la chaleur 1-D

Gilles Leborgne

3 juin 2009

Table des matières

Première partie

Questions

1 Problème : schéma explicite

On considère l'équation de la chaleur dans $\mathbb{R}$, i.e. pour $t \in [0,T]$ et $x \in \mathbb{R}$:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t}(t,x) - a\,\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x) = 0, \\ u(0,x) = u^0(x) \qquad \text{condition initiale donnée pour tout } x \in \mathbb{R}, \\ u(t,-\infty) = u(t,\infty) = 0 \qquad \text{conditions aux limites données pour tout } t \in \mathbb{R}_+. \end{cases} \tag{1.1}$$

L'inconnue est la fonction $u(t,x)$ pour $x \in \mathbb{R}$ et $t > 0$, connaissant sa valeur au temps initial $t = 0$ en tout point, et ses valeurs spatiales limites à l'infinie à tout temps $t \geq 0$. Ici, $a > 0$ est une constante strictement positive.

Ce système n'est alimenté par aucune source de chaleur puisque le second membre de $(1.1)_1$ est nul. Ce système est dit libre.

On supposera la solution $u(t,x)$ régulière (dans $C^4(\mathbb{R} \times \mathbb{R})$).

1.1 Donner la solution analytique

1.2 Écrire le schéma numérique explicite

On notera $u^n(x)$ la valeur approchée de $u(n\Delta t, x)$ correspondant au temps $t = n\Delta t$, où $\Delta t > 0$ est 'petit'.

1.3 Donner l'erreur de troncature

1.4 Donner l'ordre de l'erreur d'approximation

1.5 Étudier à l'aide de la transformation de Fourier la stabilité du schéma

On utilisera la propriété de conservation de l'énergie par transformation de Fourier (identité de Bessel-Parseval).

1.6 L'énergie du système décroît-elle avec a ?

2 Problème : schéma implicite

2.1 Écrire le schéma numérique implicite

2.2 Donner l'erreur de troncature

2.3 Étudier à l'aide de la transformation de Fourier la stabilité du schéma

3 Schéma saute-mouton : inconditionnellement instable

4 θ-schéma et schéma de Crank-Nicholson

Deuxième partie
Réponses

1 Schéma explicite

1.1 Solution analytique

On applique la transformée de Fourier en espace à l'équation $(1.1)_1$, i.e., on multiplie cette équation par $\frac{e^{-ix\xi}}{\sqrt{2\pi}}$ et on intègre en x. On note cette transformée de Fourier :

$$(\mathcal{F}_x u)(t,\xi) = \hat{u}(t,\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} u(x,t) e^{-ix\xi}\, dx, \tag{1.1}$$

et on obtient :

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial t}(t,\xi) + a\xi^2 \hat{u}(t,\xi) = 0. \tag{1.2}$$

D'où :

$$\hat{u}(t,\xi) = C(\xi) e^{-a\xi^2 t}, \tag{1.3}$$

avec $C(\xi)$ qui dépend des conditions initiales. Ici, $\hat{u}(0,\xi) = \hat{u^0}(\xi) = C(\xi)$. Donc :

$$\hat{u}(t,\xi) = \hat{u^0} e^{-at\xi^2}, \tag{1.4}$$

et par transformée de Fourier inverse :

$$u(t,\xi) = u^0(x) *_x (\mathcal{F}_x^{-1} e^{-at\xi^2})(x), \tag{1.5}$$

où $*_x$ est le produit de convolution en x. Sachant que $(\mathcal{F}_x^{-1}(e^{-at\xi^2}))(x) = \frac{1}{\sqrt{2at}} e^{\frac{-x^2}{4at}}$, il vient :

$$u(t,\xi) = u^0(x) *_x \frac{1}{\sqrt{2at}} e^{\frac{-x^2}{4at}} = \int_{y\in\mathbb{R}} u^0(x-y) \frac{1}{\sqrt{2at}} e^{\frac{-y^2}{4at}}\, dy, \tag{1.6}$$

ce qui constitue la solution (l'équation aux dérivées partielles de la chaleur a été intégrée).

1.2 Schéma explicite

1.2.1 Équation donnée par les développements de Taylor

Le développement de Taylor au voisinage de t s'écrit :

$$u(t+\Delta t, x) = u(t,x) + \frac{\partial u}{\partial t}(t,x)\,\Delta t + o(\Delta t), \tag{1.7}$$

dès que u est dérivable en t, ce que nous supposerons, et donc :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t,x) = \frac{u(t+\Delta t,x) - u(t,x)}{\Delta t} + o(1), \tag{1.8}$$

au voisinage de (t,x). En particulier, on obtient la dérivée en temps $\frac{\partial u}{\partial t}(0,x)$ au temps $t=0$ à partir de la valeur connue de $u^0(x)$ et d'une valeur inconnue (prévision) $u(\Delta t, x)$, qu'on va calculer.

Le développement de Taylor au voisinage de x s'écrit (la solution u étant supposée régulière) :

$$u(t,x+\Delta x) = u(t,x) + \frac{\partial u}{\partial x}(t,x)\,\Delta x + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x)\,(\Delta x)^2 + o(\Delta x^2). \tag{1.9}$$

Également :

$$u(t,x-\Delta x) = u(t,x) - \frac{\partial u}{\partial x}(t,x)\,\Delta x + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x)\,(\Delta x)^2 + o(\Delta x^2). \tag{1.10}$$

Et la somme donne :

$$u(t,x+\Delta x) + u(t,x-\Delta x) = 2u(t,x) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x)\,(\Delta x)^2 + o(\Delta x^2), \tag{1.11}$$

d'où :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x) = \frac{u(t,x+\Delta x) + u(t,x-\Delta x) - 2u(t,x)}{(\Delta x)^2} + o(1), \tag{1.12}$$

au voisinage de $\Delta x = 0$.

Finalement :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t,x) - a\,\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x) = \frac{u(t+\Delta t,x)-u(t,x)}{\Delta t} - a\,\frac{u(t,x+\Delta x)-2u(t,x)+u(t,x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} + o(1), \tag{1.13}$$

et au voisinage du point (x,t), l'équation $(1.1)_1$ à résoudre est donc :

$$\frac{u(t+\Delta t,x)-u(t,x)}{\Delta t} - a\,\frac{u(t,x+\Delta x)-2u(t,x)+u(t,x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} = o(1), \tag{1.14}$$

avec les conditions aux limites et initiales $(1.1)_{2,3}$.

Le terme negligeable $o(1)$ ($\simeq 0$ pour Δt et Δx 'petits') permet de construire une solution approchée.

1.2.2 Équation approchée : différences finies

Le schéma numérique explicite en découle : connaissant la solution exacte $u^0(x) = u(x,0)$ au temps $t=0$, (1.14) donne :

$$\frac{u(\Delta t,x)-u(0,x)}{\Delta t} - a\,\frac{u(0,x+\Delta x)-2u(0,x)+u(0,x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} \simeq 0. \tag{1.15}$$

On ne peut pas de cette manière calculer exactement $u(x,\Delta t)$ à cause du signe '$\simeq$'. On se contente alors d'une approximation qu'on note $u^1(x)$ ($\simeq u(x,\Delta t)$) en remplaçant le signe '$\simeq$' par un signe '$=$', et avec la condition initiale $u^0(x)=u(x,0)$ connue, u^1 est donnée par :

$$\frac{u^1(x)-u^0(x)}{\Delta t} - a\,\frac{u^0(x+\Delta x)-2u^0(x)+u^0(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} = 0. \tag{1.16}$$

C'est le schéma numérique explicite cherché, explicite car $u^1(x)$ est donné explicitement en fonction de $u^0(x)$ par :

$$u^1(x) = u^0(x) + a\,\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\big(u^0(x+\Delta x)-2u^0(x)+u^0(x-\Delta x)\big). \tag{1.17}$$

On connaît donc $u^1(x)$ par un calcul immédiat, puisqu'on connaît $u^0(y)$ en tout point y (condition initiale).

De même, connaissant maintenant $u^1(x) \simeq u(\Delta t,x)$ en tout point x, on va chercher une approximation de $u(2\Delta t,x)$, toujours à l'aide de (1.14) où maintenant t est pris égal à Δt. Ce qui donne la solution approchée :

$$\frac{u^2(x)-u^1(x)}{\Delta t} - a\,\frac{u^1(x+\Delta x)-2u^1(x)+u^1(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} = 0, \tag{1.18}$$

d'où $u^2(x)$ (qu'on espère $\simeq u(x,2\Delta t)$).

Par récurrence, on peut calculer la solution approchée au temps $t=(n+1)\Delta t$ connaissant la valeur approchée au temps $t=n\Delta t$:

$$\frac{u^{n+1}(x)-u^n(x)}{\Delta t} - a\,\frac{u^n(x+\Delta x)-2u^n(x)+u^n(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} = 0, \tag{1.19}$$

d'où $u^{n+1}(x)$ obtenu par un calcul immédiat (et on espère que $u^{n+1}(x) \simeq u((n+1)\Delta t,x)$).

Enfin, la connaissance des $u^n(y)$ n'est requise qu'aux points $y=x$ et $y=x\pm\Delta x$ pour pouvoir calculer $u^{n+1}(x)$; et donc la connaissance des $u^{n-1}(y)$ aux points $y=x$ et $y=x\pm\Delta x$ et $y=x\pm 2\Delta x$ est requise pour calculer $u^n(x)$ et $u^n(x\pm\Delta x)$ puis $u^{n+1}(x)$. Et par récurrence, il est immédiat qu'il suffit de connaître $u^0(y)$ aux points $y=x\pm k\Delta x$ pour tout $k\in\mathbb{N}$ de manière à connaître $u^n(x)$ pour tout n.

On note alors $x_j = j\Delta x$ pour $j\in\mathbb{Z}$ et on note $u^n(x_j)=u_j^n$. Le schéma numérique (1.19) est donc noté :

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\Delta t} - a\,\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} = 0. \tag{1.20}$$

Remarque 1.1 Il est clair que les erreurs vont 's'accumuler', puisque si $u^1(x)$ est calculé à partir de la connaissance exacte de $u(x,0) = u^0(x)$ (condition initiale), $u^2(x)$ n'est calculé qu'à partir d'une approximation $u^1(x)$ de $u(x, t+\Delta t)$. Il faut donc faire un calcul d'erreur pour s'assurer que l'accumulation d'erreurs reste 'petite'. ▪

Remarque 1.2 Le schéma est explicite, l'équation (1.19) s'écrivant aussi :

$$u_j^{n+1} = u_j^n + a\,\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\,(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n), \tag{1.21}$$

ce qui permet de calculer directement u_j^{n+1}. ▪

1.3 Erreur de troncature

Il s'agit de 'mesurer' les termes négligeables regroupés dans la notation $o(1)$ de l'équation (1.14) : c'est le terme qui manque dans l'équation tronquée dont on se sert pour calculer une solution approchée. Il suffit pour cela de préciser les développements de Taylor utilisés.

Ainsi, supposant u dérivable 2 fois en t, l'équation (1.7) est précisée à l'aide du développement de Taylor à l'ordre 2 :

$$u(t+\Delta t, x) = u(t,x) + \frac{\partial u}{\partial t}(t,x)\,\Delta t + O((\Delta t)^2), \tag{1.22}$$

où ici, $O((\Delta t)^2) = \frac{1}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(t,x)\,\Delta t^2 + o((\Delta t)^2)$ (terme de l'ordre de grandeur de Δt^2). Et donc :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t,x) = \frac{u(t+\Delta t,x) - u(t,x)}{\Delta t} + O(\Delta t). \tag{1.23}$$

De même pour le développement de Taylor en x, où on suppose maintenant u dérivable 4 fois en x :

$$\begin{cases} u(t,x+\Delta x) = u(t,x) + \dfrac{\partial u}{\partial x}(t,x)\,\Delta x + \dfrac{1}{2!}\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x)\,(\Delta x)^2 + \dfrac{1}{3!}\dfrac{\partial^3 u}{\partial x^3}(t,x)\,(\Delta x)^3 + O(\Delta x^4), \\ u(t,x-\Delta x) = u(x,t) - \dfrac{\partial u}{\partial x}(t,x)\,\Delta x + \dfrac{1}{2!}\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x)\,(\Delta x)^2 - \dfrac{1}{3!}\dfrac{\partial^3 u}{\partial x^3}(t,x)\,(\Delta x)^3 + O(\Delta x^4). \end{cases} \tag{1.24}$$

Et la somme donne :

$$u(t,x+\Delta x) + u(t,x-\Delta x) = 2u(t,x) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x)\,(\Delta x)^2 + O(\Delta x^4), \tag{1.25}$$

d'où :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x) = \frac{u(t,x+\Delta x) + u(t,x-\Delta x) - 2u(t,x)}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x^2). \tag{1.26}$$

Finalement :

$$\begin{aligned} &\frac{\partial u}{\partial t}(t,x) - a\,\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x) = \\ &\qquad \frac{u(t+\Delta t,x) - u(t,x)}{\Delta t} - a\,\frac{u(t,x+\Delta x) - 2u(t,x) + u(t,x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} + O(\Delta t) + O(\Delta x^2), \end{aligned} \tag{1.27}$$

et l'équation de la chaleur $(1.1)_1$ s'écrit :

$$\frac{u(t+\Delta t,x) - u(t,x)}{\Delta t} - a\,\frac{u(t,x+\Delta x) - 2u(t,x) + u(t,x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} = O(\Delta t) + O(\Delta x^2). \tag{1.28}$$

Le terme négligeable $o(1)$ de l'équation (1.14) est donc $= O(\Delta t) + O(\Delta x^2)$, i.e., d'ordre $\Delta t + \Delta x^2$, ou encore, d'ordre 1 en t et d'ordre 2 en x.

On appelle erreur de troncature la quantité négligée, qui donc ici est d'ordre 1 en t et d'ordre 2 en x.

1.4 Erreur d'approximation

C'est l'erreur entre la solution exacte et la solution calculée (solution approchée). On note $e^n(x)$ l'erreur au temps $t = n\Delta t$:

$$e^n(x) = u(n\Delta t, x) - u^n(x). \tag{1.29}$$

Au point $(t, x) = (n\Delta t, x)$, la solution exacte satisfait à (calcul de l'erreur de troncature au point $(x, t) = (x, n\Delta t)$) :

$$\frac{u((n+1)\Delta t, x) - u(n\Delta t, x)}{\Delta t} - a\,\frac{u(n\Delta t, x+\Delta x) - 2u(n\Delta t, x) + u(n\Delta t, x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} = 0 + O(\Delta t) + O(\Delta x^2). \tag{1.30}$$

Alors que la solution approchée calculée par le schéma numérique (1.19) satisfait à :

$$\frac{u^{n+1}(x) - u^n(x)}{\Delta t} - a\,\frac{u^n(x+\Delta x) - 2u^n(x) + u^n(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} = 0. \tag{1.31}$$

On en déduit que :

$$\frac{e^{n+1}(x) - e^n(x)}{\Delta t} - a\,\frac{e^n(x+\Delta x) - 2e^n(x) + e^n(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} = O(\Delta t) + O(\Delta x^2), \tag{1.32}$$

soit encore :

$$e^{n+1}(x) = \beta e^n(x+\Delta x) + (1-2\beta)e^n(x) + \beta e^n(x-\Delta x) + \Delta t\, O(\Delta t) + O(\Delta x^2), \tag{1.33}$$

où

$$\beta = a\,\frac{\Delta t}{\Delta x^2}. \tag{1.34}$$

Si $\beta \le \frac{1}{2}$, alors $e^{n+1}(x)$ est une moyenne pondérée de $e^n(x+\Delta x)$, $e^n(x)$ et $e^n(x-\Delta x)$. D'où, si $\beta \le \frac{1}{2}$:

$$\beta e^n(x+\Delta x) + (1-2\beta)e^n(x) + \beta e^n(x-\Delta x) \in [\min_{y\in I_x} e^n(y), \max_{y\in I_x} e^n(y)], \tag{1.35}$$

où I_x est l'intervalle $[x-\Delta x, x+\Delta x]$. En effet, "$\alpha\frac{e^n(x+\Delta x)+e^n(x-\Delta x)}{2} + (1-\alpha)e^n(x)$" est barycentre des points "$\frac{e^n(x+\Delta x)+e^n(x-\Delta x)}{2}$" et "$e^n(x)$", où $\alpha = 2\beta \in [0,1]$, le point $\frac{e^n(x+\Delta x)+e^n(x-\Delta x)}{2}$ étant lui-même isobarycentre des points $e^n(x+\Delta x)$ et $e^n(x-\Delta x)$.

Et une condition nécessaire pour que l'erreur soit non croissante est $\beta \le \frac{1}{2}$, i.e. :

$$a\,\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \le \frac{1}{2}. \tag{1.36}$$

C'est la condition de stabilité (non amplification de l'erreur).

En d'autres termes, si on souhaite de la précision en espace, donc on prend Δx 'petit', il faudra prendre un pas d'espace Δt de l'ordre de $\frac{1}{2a}(\Delta x)^2$, donc 'très petit'.

L'équation (1.33) implique :

$$|e^{n+1}(x)| = \max_{y\in\mathbb{R}}(|e^n(y)|) + \Delta t\,(O(\Delta t) + O(\Delta x^2)). \tag{1.37}$$

Et par récurrence :

$$|e^n(x)| = n\Delta t\, O(\Delta t) + O(\Delta x^2), \tag{1.38}$$

puisque $e^0(y) = 0$ pour tout y (car $u(y,0) = u^0(y)$ par la donnée de la condition initiale).

On en déduit que si on cherche une solution approchée $u^n(x)$ de l'équation de la chaleur, et qu'on se limite à une recherche de solution sur un temps fini $T > 0$, (donc, si le pas de temps de calcul Δt est fixé, avec n itérations telles que $n\Delta t \le T$), l'erreur d'approximation est $\le T\,(O(\Delta t) + O(\Delta x^2))$. Et comme T est fixé, on a $T\,(O(\Delta t) + O(\Delta x^2)) = O(\Delta t) + O(\Delta x^2)$, et l'erreur d'approximation est d'ordre $O(\Delta t) + O(\Delta x^2)$, i.e., d'ordre 1 en temps et d'ordre 2 en espace (le calcul ne peut se faire que sur un intervalle de temps $[0, T]$ fini sinon l'erreur n'est pas contrôlée).

Remarque 1.3 Plus on souhaitera de la précision en espace (i.e. pour Δx de plus en plus petit), plus il faudra aller lentement en temps et ce, de manière quadratique : une division par 2 du pas d'espace implique une division par 4 du pas de temps. C'est une caractéristique des schémas explicites (la prévision de l'avenir est quelque chose de délicat).

Pour pallier ce problème, il faudra passer aux schémas implicites qui consistent à regarder d'où on vient (contrairement aux schémas explicites qui consistent à regarder où on va) ; et il est alors naturel que ces schémas implicites soient inconditionnellement stables, ce qu'on démontre par transformée de Fourier par exemple. ▟

1.5 Stabilité du schéma par transformée de Fourier

La transformée de Fourier définie par :

$$\hat{f}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(x) e^{-i\xi x}\, dx, \tag{1.39}$$

permet de retrouver facilement le résultat de stabilité du schéma numérique en calculant l'énergie du système à chaque pas de temps.

On multiplie l'équation (1.19) par $e^{-i\xi x}$ et on intègre sur $\mathbb{R}$ pour obtenir (transformée de Fourier en espace uniquement) :

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{u^{n+1}(x) - u^n(x)}{\Delta t} e^{-i\xi x}\, dx - a \int_{\mathbb{R}} \frac{u^n(x+\Delta x) - 2u^n(x) + u^n(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} e^{-i\xi x}\, dx = 0, \tag{1.40}$$

et donc :

$$(\hat{u^{n+1}}(\xi) - \hat{u^n}(\xi)) - a\frac{\Delta t}{\Delta x^2}(e^{i\xi\Delta x} - 2 + e^{-i\xi\Delta x})\hat{u^n}(\xi) = 0, \tag{1.41}$$

soit encore :

$$\begin{aligned} \hat{u^{n+1}}(\xi) &= \hat{u^n}(\xi)\Big(1 - 2a\frac{\Delta t}{\Delta x^2}(1 - \cos(\xi\Delta x))\Big) \\ &= \hat{u^n}(\xi)\Big(1 - 4a\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\sin^2(\frac{\xi\Delta x}{2})\Big). \end{aligned} \tag{1.42}$$

L'identité de Bessel-Parseval donne la conservation de l'énergie par transformée de Fourier :

$$\int_{\mathbb{R}} |\hat{u^n}(\xi)|^2\, d\xi = \int_{\mathbb{R}} |u^n(x)|^2\, dx. \tag{1.43}$$

Et l'énergie d'un système libre (pas de source de chaleur) ne pouvant pas croître, l'énergie ne peut que baisser avec le temps. Il est donc nécessaire que :

$$\int_{\mathbb{R}} |u^{n+1}(x)|^2\, dx \leq \int_{\mathbb{R}} |u^n(x|^2\, dx, \tag{1.44}$$

ou de manière équivalente :

$$\int_{\mathbb{R}} |\hat{u^{n+1}}(\xi)|^2\, d\xi \leq \int_{\mathbb{R}} |\hat{u^n}(\xi)|^2\, d\xi. \tag{1.45}$$

C'est le cas dès que :

$$|1 - 4a\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\sin^2(\frac{\xi\Delta x}{2})| \leq 1. \tag{1.46}$$

Donc dès que :

$$-1 \leq 1 - 4a\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\sin^2(\frac{\xi\Delta x}{2}), \tag{1.47}$$

(l'inégalité '≤ 1' étant trivialement vérifiée) soit :

$$\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2a}. \tag{1.48}$$

On retrouve bien la condition de stabilité $\beta \leq \frac{1}{2}$.

1.6 Décroissance de l'énergie avec a

Multipliant l'équation de la chaleur $(1.1)_1$ par u, il vient :

$$\int_{\mathbb{R}} (u\frac{\partial u}{\partial t} - au\frac{\partial^2 u}{\partial x^2})\,dx = 0, \tag{1.49}$$

soit en sortant la dérivation $\frac{\partial}{\partial t}$ du signe somme et en intégrant par parties le terme $\int u\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ (tenant compte des conditions aux limites) :

$$\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\int_{\mathbb{R}} u^2\,dx = -a\int_{\mathbb{R}} \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2\,dx. \tag{1.50}$$

Et l'énergie réelle du système, $\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\int_{\mathbb{R}} u^2\,dx$ (l'énergie est proportionnelle à la température), décroît d'autant plus vite que a est grand.

2 Schéma implicite

2.1 Schéma implicite

La dérivée au temps t est maintenant calculée à partir des valeurs connues aux temps précédents :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t,x) = \frac{u(t,x) - u(t-\Delta t,x)}{\Delta t} + o(1). \tag{2.1}$$

Ceci n'a de sens que si $t \geq \Delta t$ (à comparer avec (1.7)). On va donc calculer la solution à partir de valeurs connues, et on s'attend à ce que ce schéma soit inconditionnellement stable. Contrairement au schéma explicite qui est un schéma prévisionnel (prévision de la pente $\frac{\partial u}{\partial t}$), le schéma implicite est un schéma de vérification de la solution à partir de la connaissance du passé (la pente $\frac{\partial u}{\partial t}$ est calculée à partir du passé).

On garde l'expression centrée (1.12) donnant $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t)$, et on déduit, pour $t \geq \Delta t$:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t,x) - a\,\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x) = \frac{u(t,x) - u(t-\Delta t,x)}{\Delta t} - a\,\frac{u(t,x+\Delta x) - 2u(t,x) + u(t,x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} + o(1), \tag{2.2}$$

et au voisinage du point (x,t), l'équation $(1.1)_1$ à résoudre est donc :

$$\frac{u(t,x) - u(t-\Delta t,x)}{\Delta t} - a\,\frac{u(t,x+\Delta x) - 2u(t,x) + u(t,x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} = o(1), \tag{2.3}$$

avec les conditions aux limites et initiales $(1.1)_{2,3}$.

Le terme negligeable $o(1)$ ($\simeq 0$ pour Δt et Δx 'petits') permet de construire une solution approchée.

On en déduit une valeur approchée $u^n(x)$ de $u(x, n\Delta t)$:

$$\frac{u^n(x) - u^{n-1}(x)}{\Delta t} - a\,\frac{u^n(x+\Delta x) - 2u^n(x) + u^n(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} = 0, \tag{2.4}$$

et on espère que $u^{n+1}(x) \simeq u(x,(n+1)\Delta t)$. En notant $u^n(x_j) = u^n_j$, le schéma numérique (2.4) s'écrit, pour $n \geq 1$:

$$\frac{u^n_j - u^{n-1}_j}{\Delta t} - a\,\frac{u^n_{j+1} - 2u^n_j + u^n_{j-1}}{(\Delta x)^2} = 0. \tag{2.5}$$

Ce schéma est implicite, car u^n_j est donné implicitement (indirectement) : on doit résoudre un système matriciel pour connaître u^n_j. On a par exemple pour le premier pas de temps ($n=1$) :

$$-a\frac{\Delta t}{\Delta x^2}u^1_{j+1} + (1 + 2a\frac{\Delta t}{\Delta x^2})u^1_j - a\frac{\Delta t}{\Delta x^2}u^1_{j-1} = u^0_j, \tag{2.6}$$

et on a un système matriciel tri-diagonal à inverser :

$$A.\begin{pmatrix} u^1_0 \\ \vdots \\ u^1_J \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u^0_0 \\ \vdots \\ u^0_J \end{pmatrix}, \tag{2.7}$$

avec :

$$A = \begin{pmatrix} \alpha & -\beta & 0 & \dots & & 0 \\ -\beta & \alpha & -\beta & \dots & & \\ 0 & -\beta & \alpha & -\beta & \dots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ & & & -\beta & \alpha & -\beta \\ 0 & & & 0 & -\beta & \alpha \ . \end{pmatrix} \tag{2.8}$$

On a posé :

$$\alpha = (1 + 2a\frac{\Delta t}{\Delta x^2}), \quad \beta = a\frac{\Delta t}{\Delta x^2}, \tag{2.9}$$

et de plus, on a pris des conditions aux limites sur l'intervalle spatial $x \in [0, L] = [0, J\Delta x]$.

2.2 Erreur de troncature

Cette erreur est inchangée par rapport au cas explicite, c'est immédiat au vue des développements de taylor : L'erreur de troncature est en $O(\Delta t) + O(\Delta x^2)$, i.e., d'ordre 1 en temps et d'ordre 2 en espace.

On peut montrer que l'erreur d'approximation est d'ordre 1 en temps et d'ordre 2 en espace, i.e., qu'elle suit l'erreur de troncature.

2.3 Étudier à l'aide de la transformation de Fourier la stabilité du schéma

On a :

$$\frac{u^n(x) - u^{n-1}(x)}{\Delta t} - a\,\frac{u^n(x+\Delta x) - 2u^n(x) + u^n(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2}. = 0 \tag{2.10}$$

Et par transformation de Fourier :

$$\hat{u^n}(\xi) - \hat{u^{n-1}}(\xi) = \frac{a\Delta t}{\Delta x^2}(e^{i\xi\Delta x} - 2 + e^{-i\xi\Delta x})\hat{u^n}(\xi), \tag{2.11}$$

soit :

$$\hat{u^n}(\xi) = b(\xi)\hat{u^{n-1}}(\xi), \quad \text{où} \quad b(\xi) = \frac{1}{1 + 4\frac{a\Delta t}{\Delta x^2}\sin(\frac{\xi\Delta x}{2})}. \tag{2.12}$$

Puisque :

$$|b(\xi)| \leq 1, \quad \forall \xi \in \mathbb{R}, \tag{2.13}$$

on en déduit que le schéma est inconditionnellement stable, i.e., stable indépendamment des valeurs de Δt et Δx (positives).

3 Schéma saute-moutons : inconditionnellement instable

On essaie un schéma centré en temps : à partir des développements de Taylor au premier ordre, il vient :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = \frac{u(t+\Delta t, x) - u(t-\Delta t, x)}{2\Delta t} + o(1). \tag{3.1}$$

Le calcul des approximations $u^n(x)$ de $u(x, n\Delta t)$ se ferait par :

$$\frac{u^{n+1}(x) - u^{n-1}(x)}{2\Delta t} - a\,\frac{u^n(x+\Delta x) - 2u^n(x) + u^n(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} = 0. \tag{3.2}$$

On peut imaginer que ce schéma ne pourra pas converger car il faudrait deux conditions initiales pour commencer le calcul : pour calculer $u^2(x)$, il faudrait connaître $u^0(x)$ et $u^1(x)$. Or on a une équation d'ordre 1 en temps, et le théorème de Cauchy ne permet pas la donnée de 2 conditions initiales (sinon on a un problème surcontraint). On retrouve ce caractère mal posé à l'aide de la transformation de Fourier : l'équation (3.2) donne :

$$\begin{pmatrix} \hat{u^n}(\xi) \\ \hat{u^{n+1}}(\xi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & \frac{8\Delta t}{\Delta x^2}\sin^2(\frac{\xi\Delta x}{2}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \hat{u^{n-1}}(\xi) \\ \hat{u^n}(\xi) \end{pmatrix}. \tag{3.3}$$

On pose :

$$A(\xi) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & \alpha(\xi) \end{pmatrix} \quad \text{où} \quad \alpha(\xi) = \frac{8\Delta t}{\Delta x^2}\sin^2(\frac{\xi\Delta x}{2}). \tag{3.4}$$

Les valeurs propres de la matrice A vérifient :

$$\lambda^2 - \alpha\lambda - 1 = 0, \tag{3.5}$$

et donc, les racines λ_1 et λ_2 sont réelles et leur produit donne $|\lambda_1\lambda_2| = 1$: au moins une des valeurs propres est de module > 1 (quand $\alpha \neq 0$). On en déduit que le schéma explose. En effet :

$$\begin{pmatrix} \hat{u^n}(\xi) \\ \hat{u^{n+1}}(\xi) \end{pmatrix} = A^n . \begin{pmatrix} \hat{u^0}(\xi) \\ \hat{u^1}(\xi) \end{pmatrix}, \tag{3.6}$$

avec le rayon spectral de A qui est > 1. Ce schéma est numériquement instable.

4 θ-schéma et schéma de Crank-Nicholson

4.1 Définition

Le θ-schéma est un schéma intermédiaire entre le schéma explicite et le schéma implicite. On cherche une solution approchée de (1.1). On considère $\theta \in [0,1]$ un réel et le barycentre des équations (2.3) et (1.14), i.e. θ fois l'équation (implicite) (2.3) plus $1-\theta$ fois l'équation (explicite) (1.14) :

$$\begin{aligned} &\theta\Big(\frac{u(t^{n+1},x) - u(t^n,x)}{\Delta t} - a\,\frac{u(t^{n+1},x+\Delta x) - 2u(t^{n+1},x) + u(t^{n+1},x-\Delta x)}{(\Delta x)^2}\Big) \\ &+ (1-\theta)\Big(\frac{u(t^{n+1},x) - u(t^n,x)}{\Delta t} - a\,\frac{u(t^n,x+\Delta x) - 2u(t^n,x) + u(t^n,x-\Delta x)}{(\Delta x)^2}\Big) = o(1). \end{aligned}$$

On pose $t^n = n\Delta t$, on cherche une valeur approchée $u^n(x)$ de $u(t^n,x)$ telle que :

$$\begin{aligned} &\theta\Big(\frac{u^{n+1}(x) - u^n(x)}{\Delta t} - a\,\frac{u^{n+1}(x+\Delta x) - 2u^{n+1}(x) + u^{n+1}(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2}\Big) \\ &+ (1-\theta)\Big(\frac{u^{n+1}(x) - u^n(x)}{\Delta t} - a\,\frac{u^n(x+\Delta x) - 2u^n(x) + u^n(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2}\Big) = 0. \end{aligned} \tag{4.1}$$

Puis on pose :

$$\begin{aligned} &A_\theta(u^n, u^{n+1}, x, x+\Delta x, x-\Delta x) \\ &= \theta\frac{u^{n+1}(x+\Delta x) - 2u^{n+1}(x) + u^{n+1}(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} + (1-\theta)\frac{u^n(x+\Delta x) - 2u^n(x) + u^n(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2}. \end{aligned}$$

Puis on discrétise en espace en posant $x_j = j\Delta x$ pour $j \in \mathbb{Z}$, puis $u_j^n = u^n(x_j)$, et le θ schéma consiste à trouver les u_j^n tels que :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + A_\theta(u^n, u^{n+1}, x_j, x_{j+1}, x_{j-1}) = 0. \tag{4.2}$$

4.2 Erreur de troncature

On a tout d'abord, avec $t^{n+\frac12} = \frac12(t^{n+1} + t^n) = (n+\frac12)\Delta t$, et $u^{n+\frac12}(x) = u(t^{n+\frac12}, x)$ et les développements limités au premier ordre en temps au voisinage de $t^{n+\frac12}$:

$$\begin{cases} u(t_{n+1},x) = u(t^{n+\frac12},x) + \dfrac{\Delta t}{2}\dfrac{\partial u}{\partial t}(x,t^{n+\frac12}) + \dfrac12(\dfrac{\Delta t}{2})^2\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x,t^{n+\frac12}) + O(\Delta t^3), \\ u(t_n,x) = u(t^{n+\frac12},x) - \dfrac{\Delta t}{2}\dfrac{\partial u}{\partial t}(x,t^{n+\frac12}) + \dfrac12(\dfrac{\Delta t}{2})^2\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x,t^{n+\frac12}) + O(\Delta t^3), \end{cases} \tag{4.3}$$

d'où :

$$\frac{u(t_{n+1},x)-u(t_n,x)}{\Delta t} = \frac{\partial u}{\partial t}(x,t^{n+\frac{1}{2}}) + O(\Delta t^2). \tag{4.4}$$

Puis, développements limités de $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,.)$ au premier ordre en temps au voisinage de $t^{n+\frac{1}{2}}$:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t^{n+1}) = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t^{n+\frac{1}{2}}) + \dfrac{\Delta t}{2}\dfrac{\partial}{\partial t}\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t^{n+\frac{1}{2}}) + O(\Delta t^2), \\ \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t^{n}) = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t^{n+\frac{1}{2}}) - \dfrac{\Delta t}{2}\dfrac{\partial}{\partial t}\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t^{n+\frac{1}{2}}) + O(\Delta t^2), \end{cases} \tag{4.5}$$

d'où, avec $A_\theta = \theta\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t^{n+1}) + (1-\theta)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t^n) + O(\Delta x^2)$:

$$A_\theta = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{\Delta t}{2}(2\theta-1)\frac{\partial^3 u}{\partial t\partial x^2}(x,t^{n+\frac{1}{2}}) + O(\Delta t^2) + O(\Delta x^2). \tag{4.6}$$

On en déduit que :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t^{n+\frac{1}{2}}) - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t^{n+\frac{1}{2}}) = \frac{\Delta t}{2}(2\theta-1)\frac{\partial^3 u}{\partial t\partial x^2}(x,t^{n+\frac{1}{2}}) + O(\Delta t^2) + O(\Delta x^2). \tag{4.7}$$

Or le θ-schéma (4.2) supprime les termes de droite, termes qui constituent l'erreur de troncature.

4.2.1 Schéma de Crank–Nicholson

Dans ce cas, $\theta = \frac{1}{2}$ et l'erreur de troncature est $O(\Delta t^2) + O(\Delta x^2)$: quadratique en temps et en espace. Ce schéma est très efficace et très utilisé.

4.2.2 θ-schéma avec $\theta \neq \frac{1}{2}$

Dans ce cas, l'erreur de troncature est $O(\Delta t) + O(\Delta x^2)$: linéaire en temps et quadratique en espace. On retrouve en particulier l'ordre des schémas explicites et implicites.

4.3 Stabilité

Par transformée de Fourier appliquée à (4.1), on calcul le coefficient $\alpha(\xi)$ d'amplification de l'erreur :

$$\hat{u^{n+1}}(\xi) = \alpha(\xi)\hat{u^n}(\xi), \quad \text{avec} \quad \alpha(\xi) = \frac{1-4(1-\theta)\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\sin^2\frac{\xi\Delta x}{2}}{1+4\theta\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\sin^2\frac{\xi\Delta x}{2}}. \tag{4.8}$$

On en déduit que le schéma est inconditionnellement stable si :

$$\theta \geq \frac{1}{2}. \tag{4.9}$$

C'est en particulier le cas du schéma de Crank–Nicholson (et du schéma implicite). Et si :

$$\theta < \frac{1}{2}, \tag{4.10}$$

le schéma est conditionnellement stable (cas du schéma explicite).