Modélisation Numérique pour le Génie des Procédés

Paris, automne 2015

Cours 03

Schéma explicite pour l'équation de la chaleur

François Dubois

CNAM Paris
Génie des Procédés CGP213
Modélisation Numérique

19 avril 2013

(III) Schéma explicite pour l'équation de la chaleur.

1) Introduction.

On se place à une dimension d'espace sur l'intervalle $0 \leqslant x \leqslant L$ (avec $L > 0$). On cherche une fonction $u(x,t)$ de l'espace et du temps qui satisfait à l'équation d'évolution suivante

(1) $\quad \dfrac{\partial u}{\partial t} - K \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad 0 < x < L, \ t > 0$.

L'équation (1) s'appelle "équation de la chaleur" et la diffusivité K est strictement positive.

- On se donne aussi des conditions aux limites en $x = 0$ et $x = L$, valables à tout instant. Ici, pour fixer les idées, on se donne une condition de Dirichlet homogène

(2) $\quad u(0) = 0, \quad u(L) = 0$

en $x = 0$ et $x = L$

- on se donne également une condition initiale à $t=0$

$$(3) \qquad u(x,0) = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq L .$$

Les relations (2) et (3) doivent être compatibles: $u_0(0) = 0$ et $u_0(L) = 0$.

2) Discrétisation en temps.

Le système (1)(2)(3) est un système dynamique; on cherche à tout instant t une fonction de x : $u(\bullet,t)$. Il est plus complexe que le système étudié lors des leçons précédentes où l'on avait simplement $u(t) \in \mathbb{R}$. On a maintenant $u(\bullet,t)$ qui est une fonction de x (donc appartient à un espace de dimension infinie).

- on peut faire opérer une discrétisation en temps analogue à ce qui a été fait lors des leçons précédentes:

$$(4) \qquad u^n(x) \simeq u(x, n\Delta t), \quad \Delta t > 0, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Maintenant l'approximation u^n est une fonction de x ($x \in [0,L]$).

- Le schéma d'Euler explicite s'écrit sans difficulté :

$$(5) \quad \frac{1}{\Delta t}(u^{n+1} - u^{n})(x) - K\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)^{n} = 0, \quad 0 < x < L.$$

Il faut bien entendu disposer d'une approximation de la dérivée seconde $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ à l'instant $n\Delta t$.

- Pour le schéma d'Euler implicite, on a

$$(6) \quad \frac{1}{\Delta t}(u^{n+1} - u^{n})(x) - K\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)^{n+1} = 0, \quad 0 < x < L.$$

Nous développerons cette idée à la leçon suivante.

3) Discrétisation en espace

Les problèmes (5) ou (6) restent posés en dimension infinie car l'inconnue u^n est une fonction de l'espace continu. On discrétise maintenant l'espace de façon uniforme (pour fixer les idées) :

$$(7) \quad \Delta x = \frac{L}{J}, \quad J \text{ entier} \geq 1.$$

On cherche simplement des valeurs approchées u_j de $u(j\Delta x)$:

$$(8) \quad u_j \simeq u(j\Delta x), \quad 0 \leq j \leq J.$$

- Afin de préciser le schéma d'Euler explicite (5), il importe de savoir approcher $\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)(j\Delta x)$.

On part de la connaissance des valeurs u_ℓ pour $0 \leq \ell \leq J$. A un point $j\Delta x$ fixé, on dispose de u_j mais aussi des valeurs voisines u_{j-1} et u_{j+1}. Il est alors facile de définir une valeur approchée de la dérivée $\frac{\partial u}{\partial x}$ "au point milieu" $(j+\frac{1}{2})\Delta x$:

$$(9) \qquad \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j+1/2} \simeq \frac{1}{\Delta x}\left(u_{j+1} - u_j\right).$$

De façon analogue "entre" les points $(j-1)\Delta x$ et $j\Delta x$:

$$(10) \qquad \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j-1/2} \simeq \frac{1}{\Delta x}\left(u_j - u_{j-1}\right)$$

- La dérivée seconde $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ est la dérivée de la dérivée. Au vu de (9) et (10), on dispose de $\frac{\partial u}{\partial x}$ (de façon approchée) aux points $(j-\frac{1}{2})\Delta x$ et $(j+\frac{1}{2})\Delta x$. Il est donc possible d'écrire

$$(11) \qquad \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j \simeq \frac{1}{\Delta x}\left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j+1/2} - \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j-1/2}\right].$$

On reporte (9) et (10) au membre de droite de (11) :

$$(12) \qquad \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j \simeq \frac{1}{\Delta x^2}\left(u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}\right).$$

- L'approximation (12) est précise "à l'ordre deux" (comme le schéma de Crank-Nicolson ...). De façon précise ici, si $u(\bullet)$ est une fonction régulière de l'espace (quatre fois continuement dérivable), on a la propriété suivante

$$(13)\begin{cases}\dfrac{1}{\Delta x}\Big(u(j\Delta x+\Delta x)-2u(j\Delta x)+u(j\Delta x-\Delta x)\Big) = \\ \qquad\qquad \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(j\Delta x) + C\,\Delta x^2 + \cdots \quad .\end{cases}$$

La preuve de la relation (13) est un simple développement de Taylor ; elle est laissée au lecteur.

4) Schéma explicite en temps, centré en espace

On associe le schéma en temps explicite (5) et l'approximation (12) de la dérivée seconde. On trouve, avec $u_j^n \simeq u(j\Delta x, n\Delta t)$:

$$(14)\quad \frac{1}{\Delta t}\big(u_j^{n+1}-u_j^n\big) - \frac{K}{\Delta x^2}\big(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n\big),\ 1\leq j\leq J-1.$$

On note que (14) est défini pour $j\neq 0, J$ car u_{j-1} (resp u_{j+1}) n'a pas de sens pour $j=0$ (resp $j=J$). Mais pour ces deux points, on écrit simplement la condition de Dirichlet (2):

(15) $\quad u_0^n = 0, \; u_J^n = 0, \quad \forall n \geq 0.$

- La relation (14) s'écrit facilement en fonction du paramètre sans dimension $\mathfrak{J} > 0$ défini par

(16) $\quad \mathfrak{J} = K \dfrac{\Delta t}{\Delta x^2}.$

On a

(17) $\quad u_j^{n+1} = u_j^n + \mathfrak{J}\left(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n\right), \quad 1 \leq j \leq J-1.$

5) Mise en œuvre numérique.

La programmation du schéma (15)(17) est facile ; on peut n'utiliser que <u>deux</u> vecteurs U et UN de longueur J+1.

Initialisation

```
boucle en j : 1 -> J+1
    U(j) = V * sin( (j-1) π /J ) %  { pour fixer les idées

boucle en temps n : 1 -> N.
    UN(1) = 0 ; UN(J+1) = 0   % condition limite
    boucle en j : 2 -> J
        UN(j) = U(j) + J*(U(j+1) - 2*U(j) + U(j-1))

    boucle en j : 1 -> J+1
        U(j) = UN(j)          % passage du temps
```

A l'entrée dans la boucle UN(j) = ..., le vecteur U contient u^n à l'instant $n\Delta t$. A l'issue de cette boucle, UN contient lui u^{n+1} à l'instant ultérieur. Avec la boucle U(j) = UN(j), le vecteur UN va remplacer U, donc U contient maintenant u^{n+1} à l'instant ultérieur ; il y a eu "passage du temps discret".

6) Stabilité.

Avec J. Van Neumann, on néglige les conditions aux limites (15) et on injecte dans (17) une onde u_j^n de la forme

$$(18) \qquad u_j^n = \hat{u}(k)\, e^{ikj\Delta x}, \quad k \in \mathbb{R}, \; j \in \mathbb{Z}.$$

On définit le nombre d'onde (sans dimension) ξ par

$$(19) \qquad \xi = k\Delta x, \quad \xi \in \mathbb{R}.$$

Ce paramètre est quelconque car on doit pouvoir simuler une onde quelconque de fréquence arbitraire.

- Si on injecte (18) dans (17), si on remarque que

$$(20) \qquad u_{j+1}^n = e^{i\xi}\, u_j \;; \quad u_{j-1}^n = e^{-i\xi}\, u_j \,, \quad j \in \mathbb{Z}$$

on a

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \varsigma\left(e^{i\xi} - 2 + e^{-i\xi}\right) u_j^n$$
$$= \left(1 + 2\varsigma\,(\cos\xi - 1)\right) u_j^n$$
$$= \left(1 - 4\varsigma \sin^2\frac{\xi}{2}\right) u_j^n$$

D'où

(21) $\quad u_j^{n+1} = g(\varsigma,\xi)\, u_j^n, \quad j \in \mathbb{Z}$

(22) $\quad g(\varsigma,\xi) = 1 - 4\varsigma \sin^2\frac{\xi}{2}$

- Le coefficient d'amplification $g(\varsigma,\xi)$ est défini en (22). Avec l'onde (18), le schéma (17) est une simple suite géométrique de raison $g(\varsigma,\xi)$. Si il existe $\xi \in \mathbb{R}$ tel que $|g(\varsigma,\xi)| > 1$, la suite (21) tend vers l'infini (en module) pour n assez grand. Ceci est fâcheux et conduit à une instabilité! En pratique, de telles instabilités doivent être évitées! On doit donc imposer une condition de stabilité

(23) $\quad \forall \xi \in \mathbb{R}, \ |g(\varsigma,\xi)| \leq 1.$

- On explicite (23) en regardant le cas particulier $\xi = \pi$. Alors $|g(\sigma,\xi)| \leq 1$ s'écrit

$-1 \leq 1 - 4\sigma \leq 1$, soit $0 \leq \sigma \leq \frac{1}{2}$.

Réciproquement, si $0 \leq \sigma \leq \frac{1}{2}$, on a

$0 \leq 4\sigma \sin^2 \frac{\xi}{2} \leq 2$, donc $-1 \leq g(\sigma,\xi) \leq 1$.

La condition (23) équivaut donc à

$$(24) \qquad 0 \leq \sigma \equiv K \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}.$$

7) Coût du schéma explicite en temps.

La condition de stabilité induit un coût de calcul très important. Nous l'illustrons avec un exemple. On cherche à approcher la solution de (1)(2)(3) jusqu'à un instant $T>0$ fixé. Pour cela, on utilise N pas de temps :

$$(25) \qquad N \Delta t = T.$$

On utilise aussi une grille en temps avec Δx défini en (7). Le nombre de pas de temps est proportionnel au carré du nombre de points en espace, à $\sigma > 0$ fixé. En effet,

$$N = \frac{T}{\Delta t} = \frac{TK}{\delta} \frac{1}{\Delta x^2} = \frac{TK}{\delta L^2} J^2$$

$$(26) \qquad N = \frac{TK}{\delta L^2} J^2 .$$

Si on choisit T de sorte que $\frac{TK}{\delta L^2}$ soit entier ≥ 1 ($\delta \leq \frac{1}{2}$ à cause de (24)), L et K sont imposés par la donnée du problème physique, le schéma (17) permet de calculer une approximation $u^N \simeq u(\cdot, T)$. On note que le coût (26) est important ; $N = 100$ si $J = 10$, $N = 10000$ si $J = 100$, $N = 10^6$ si $J = 1000$...

Dubois
22 avril 2013