

Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles

Cours 04

Equation de la chaleur

- Modélisation physique

On exprime la conservation de l'énergie dans le contexte de la mécanique des milieux continus. La variation au cours du temps de l'énergie interne volumique ρe est équilibrée par la divergence du flux de chaleur q :

$$(1) \quad \frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \frac{\partial q}{\partial x} = 0, \quad x \in \mathbb{R}, t > 0.$$

Dans l'hypothèse d'un gaz parfait à chaleurs spécifiques constantes, on peut écrire l'énergie interne spécifique e en fonction de la capacité calorifique à volume constant c_v et de la température T : $e = c_v T$. Par ailleurs, pour de nombreux milieux continus, on peut supposer la loi de Fourier : le flux de chaleur est proportionnel au gradient de la température, c'est à dire $q = -k \frac{\partial T}{\partial x}$. On reporte les expressions précédentes au sein de la loi de conservation (1) et on change le nom de la fonction inconnue qui devient $u(x, t)$ au lieu de $T(x, t)$. On obtient ainsi l'équation de la chaleur :

$$(2) \quad \frac{\partial u}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad x \in \mathbb{R}, t > 0,$$

avec le coefficient de conductivité thermique κ donné par la relation $\kappa = \frac{k}{\rho c_v}$.

- Discrétisation par différences finies de la dérivée seconde en espace

On se donne une grille de pas $\Delta x > 0$ et on cherche à approcher la dérivée partielle $\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j$ au point $j\Delta x$ par les valeurs ponctuelles u_{j-1} , u_j et u_{j+1} . On a d'abord une approximation de la dérivée première $\frac{\partial u}{\partial x}$ au point intermédiaire $\left(j + \frac{1}{2}\right)\Delta x$ en fonction des valeurs u_j et u_{j+1} :

$$(3) \quad \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j+1/2} \approx \frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta x}.$$

De même, en changeant j en $(j-1)$, on a

$$(4) \quad \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j-1/2} \approx \frac{u_j - u_{j-1}}{\Delta x}.$$

Puis on applique le même raisonnement pour la dérivée de la fonction dérivée $\frac{\partial u}{\partial x}$ de part et d'autre du point $j\Delta x$:

$$(5) \quad \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j \approx \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j+1/2} - \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j-1/2} \right].$$

On reporte le résultat des relations (3) et (4) dans la relation (5) et il vient

$$(6) \quad \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j \approx \frac{1}{\Delta x^2} (u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}).$$

- Schéma explicite en temps et centré en espace

On discrétise maintenant l'équation aux dérivées partielles (2) en espace et en temps. On se donne un pas d'espace $\Delta x > 0$ et un pas de temps $\Delta t > 0$. Pour $j \in \mathbb{Z}$ et $n \in \mathbb{N}$, on note u_j^n une approximation de $u(j\Delta x, n\Delta t)$. On discrétise la dérivée en temps par un schéma aux différences finies à deux points :

$$(7) \quad \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_j^n \approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}.$$

Puis on discrétise la dérivée seconde en espace par un schéma centré à l'instant $n\Delta t$:

$$(8) \quad \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j^n \approx \frac{1}{\Delta x^2} (u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n).$$

On obtient ainsi le schéma explicite en temps et centré en espace pour approcher l'équation de la chaleur (2) par la méthode de différences finies :

$$(9) \quad \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \frac{\kappa}{\Delta x^2} (u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n) = 0.$$

On introduit le paramètre sans dimension ζ défini par la relation $\zeta \equiv \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2}$. Alors le schéma (9) peut se réécrire comme une formule où on calcule la valeur au nouvel instant $(n+1)\Delta t$ en fonction des valeurs voisines à l'instant courant :

$$(10) \quad u_j^{n+1} = u_j^n + \zeta (u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n).$$

- Condition initiale et conditions aux limites.

Pour cette leçon introductive à l'équation de la chaleur, on se donne une longueur $L > 0$ et on se place pour fixer les idées dans l'intervalle borné $[0, L]$. A l'instant initial ($t = 0$), on se donne une fonction de l'espace $u_0(x)$ pour $0 < x < L$:

$$(11) \quad u(x, 0) = u_0(x), \quad 0 < x < L.$$

On se donne aussi une condition limite dite "de Dirichlet homogène" aux bords $x = 0$ et $x = L$ à tout instant $t > 0$:

$$(12) \quad u(0, t) = 0, \quad u(L, t) = 0, \quad t > 0.$$

On peut alors démontrer que, sous des hypothèses raisonnables d'un point de vue mathématique, le problème d'évolution (2) joint à la condition initiale (11) et aux conditions limites (12) a une solution unique $u(x, t)$ pour $0 \leq x \leq L$ et $t \geq 0$.

La discrétisation des conditions initiales et aux limites impose de fixer un nombre $J \geq 1$ de points de grille : $\Delta x = \frac{L}{J}$. Compte tenu de (11), la condition initiale discrète prend la forme

$$(13) \quad u_j^0 = u_0(j\Delta x), \quad 1 \leq j \leq J-1.$$

Les conditions limites (12) prennent la forme discrète suivante :

$$(14) \quad u_0^n = 0, \quad u_J^n = 0, \quad n \in \mathbb{N}$$

puisque $L = J\Delta x$. Le lecteur peut se rendre compte par lui-même que l'équation d'évolution discrète (10) pour $1 \leq j \leq J-1$ jointe aux conditions (13)(14) définit une unique famille discrète u_j^n solution du schéma numérique.

Cette famille discrète u_j^n a été évaluée numériquement dans le cas $L = 1$ pour élaborer le document compagnon, pour la condition initiale particulière $u_0(x) = \sin(\pi x)$ avec $J = 16$ points de grille.

- Solution analytique du problème continu pour une condition initiale sinusoïdale

On se donne un entier $k \geq 1$ et une condition initiale

$$(15) \quad u_0(x) = \widehat{u}_k \sin\left(\frac{k\pi x}{L}\right), \quad 0 \leq x \leq L.$$

Alors on peut calculer analytiquement (c'est à dire avec une formule) la solution du problème constitué des relations (2)(11)(12) et (15) ; on la cherche sous la forme

$$(16) \quad u(x, t) = g(t) \sin\left(\frac{k\pi x}{L}\right), \quad 0 \leq x \leq L, \quad t \geq 0.$$

On calcule $\frac{\partial u}{\partial t}$ et $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ pour la fonction u donnée à la relation (16) et on reporte les expressions obtenues dans la relation (2). On trouve :

$$(17) \quad 0 = \frac{\partial u}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \left[\frac{dg}{dt} + \kappa \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 g(t) \right] \sin\left(\frac{k\pi x}{L}\right), \quad 0 \leq x \leq L, \quad t > 0.$$

On insiste sur le fait que la relation (17) est vraie pour tout x entre 0 et L et tout instant $t > 0$. En choisissant x de sorte que $\sin\left(\frac{k\pi x}{L}\right)$ soit non nul, on en déduit que la fonction $g(t)$ vérifie l'équation différentielle $\frac{dg}{dt} + \kappa \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 g(t) = 0$ pour $t > 0$.

Cette équation a été résolue lors de la première leçon. Compte tenu de la condition initiale

(15), il vient $g(t) = \widehat{u}_k \exp\left(-\kappa \frac{k^2 \pi^2 t}{L^2}\right)$ avec $t \geq 0$. La solution analytique du problème (2)(11)(12)(15) est donné par la relation

$$(18) \quad u(x, t) = \widehat{u}_k \exp\left(-\kappa \frac{k^2 \pi^2 t}{L^2}\right) \sin\left(\frac{k\pi x}{L}\right), \quad 0 \leq x \leq L, \quad t \geq 0.$$

- Stabilité du schéma numérique explicite

Comme pour la leçon précédente, on regarde la solution du schéma (10) si on suppose que u_j^n au n^o instant est une onde de vecteur d'onde K :

$$(19) \quad u_j^n = \widehat{u}_K \exp\left(iK j \Delta x\right), \quad j \in \mathbb{Z}.$$

On introduit le nombre d'onde $\xi \equiv K \Delta x$ et on a après un calcul élémentaire laissé au lecteur : $u_{j+1}^n = \exp(i\xi) u_j^n$ et $u_{j-1}^n = \exp(-i\xi) u_j^n$. Quand on injecte ces expressions dans le schéma (10), il vient alors $u_{j+1}^{n+1} = g(\zeta, \xi) u_j^n$. Pour une onde de vecteur d'onde K , le schéma aux différences finies (10) se réduit à une simple suite géométrique et raison $g(\zeta, \xi)$. Un calcul laissé au lecteur montre que le coefficient d'amplification $g(\zeta, \xi)$ est donné par la relation

$$(20) \quad g(\zeta, \xi) = 1 - 4\zeta \sin^2\left(\frac{\xi}{2}\right).$$

La condition de stabilité de von Neumann ($|g(\zeta, \xi)| \leq 1 \forall \xi \in \mathbb{R}$) s'exprime alors sous la forme

$$(21) \quad 0 \leq \zeta \leq \frac{1}{2}.$$

Dans le document compagnon, on montre ce qui se passe si on prend par exemple $\zeta = 1$. Les erreurs d'arrondis finissent par s'amplifier ; le schéma est instable et ses résultats n'ont bientôt plus rien à voir avec la solution analytique (18).