

CHAPITRE 4

## Différences finies pour l'équation de la chaleur à une dimension d'espace

- 1) Modèle physico-mathématique
- 2) Schéma aux différences explicite à une dimension
- 3)  $\theta$ -schéma en temps
- 5) Schémas à trois niveaux en temps

## IV. DIFFÉRENCES FINIES POUR L'ÉQUATION DE LA CHALEUR À UNE DIMENSION D'ESPACE

### 1) Modèle physico-mathématique

Dans ce chapitre, nous abordons l'étude d'un modèle de diffusion. Le laplacien du champ décrit directement l'évolution en temps du processus. De façon plus générale, étant donné un domaine  $\Omega$  de  $\mathbb{R}^n$  ( $n \geq 1$  au moins au tout début de ce paragraphe,  $n = 1$  ensuite), on cherche un champ scalaire  $u$  (la température) fonction de  $x \in \Omega$  et du temps  $t$ .

$$(1) \quad ]0, T[ \times \Omega \ni (t, x) \rightarrow u(t, x) \in \mathbb{R}$$

solution de l'équation "de la chaleur" :

$$(2) \quad \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(k \nabla u) = f \quad (t, x) \in ]0, T[ \times \Omega$$

Le second membre  $f$  est la source volumique de chaleur (flamme, radiateur) et  $k$  le coefficient de diffusion thermique (qui peut être une matrice pour un matériau anisotrope) qui relie le gradient de la température au flux de chaleur  $q$  :

$$(3) \quad q = -k \nabla u, \quad (t, x) \in ]0, T[ \times \Omega$$

On pose le problème sur un intervalle de temps  $]0, T[$ , mais en pratique  $T$  peut être arbitrairement grand lorsqu'on recherche un régime permanent ou entretenu régulièrement.

En plus de l'équation aux dérivées partielles (2), on doit aussi se donner une condition initiale  $u_0$  :

$$(4) \quad u(0, x) = u_0(x) \quad x \in \Omega$$

ainsi qu'une condition limite en tout point du bord  $\partial\Omega$  ; on se bornera ici à une condition de Dirichlet sur une portion  $\Gamma_1$  de la frontière :

$$(5) \quad u(t, x) = v_0(t) \quad t \in ]0, T[, \quad x \in \Gamma_1$$

et à une condition de Neumann de flux imposé sur la partie complémentaire  $\Gamma_2$  :

$$(6) \quad -k \frac{\partial u}{\partial n}(t, x) = g(t), \quad t \in ]0, T[, \quad x \in \Gamma_2$$

$$(7) \quad \partial\Omega = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \quad ; \quad \Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \emptyset$$

- Dans le cas d'un barreau infini ( $\Omega = \mathbb{R}$ ), le bord de  $\Omega$  est rejeté à l'infini (pas de condition limite) et le problème de Cauchy (2) (4) a une solution unique  $u(t,x)$  qui peut se représenter à l'aide d'une intégrale :

$$(8) \quad u(t,x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2\Pi t}} \exp\left(-\frac{|x-x'|^2}{4t}\right) u_0(x') dx'$$

Le noyau de Green  $G(t,x)$ ,

$$(9) \quad G(t,x) = \frac{1}{\sqrt{2\Pi t}} \exp\left(-\frac{|x|^2}{4t}\right)$$

est la solution élémentaire de l'équation de la chaleur avec un coefficient de diffusion  $k \equiv 1$ , c'est-à-dire est solution du problème suivant :

$$(10) \quad \frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = 0$$

$$(11) \quad u(0,x) = \delta(x)$$

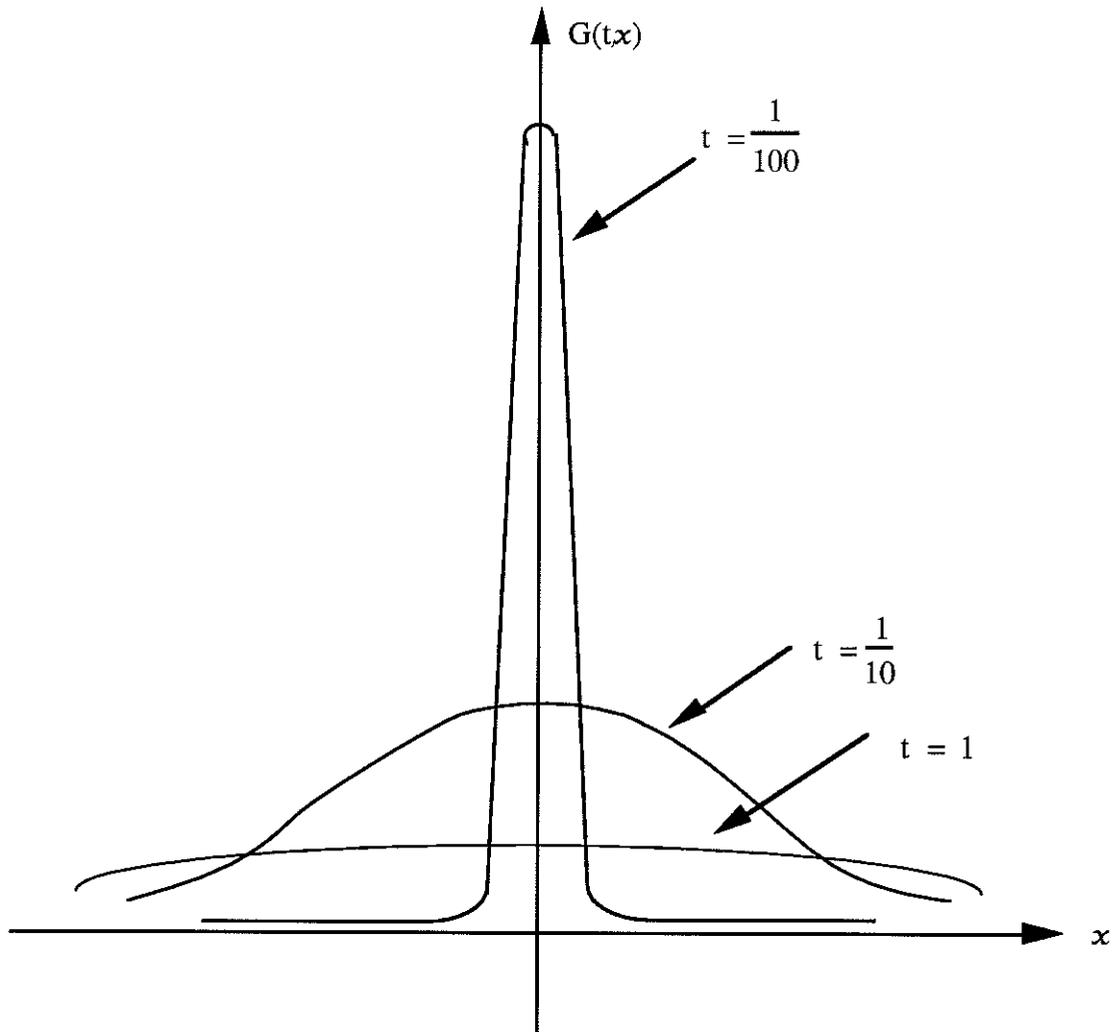
où la "fonction"  $\delta$ , ou plus justement la "masse de Dirac"  $\delta$  est une distribution qui opère sur les fonctions  $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  de la façon suivante :

$$(12) \quad \langle \delta, \varphi \rangle = \varphi(0)$$

On peut dire aussi que  $\delta(x)$  est un "pic" valant 0 sauf en  $x=0$  où il prend une valeur infinie de sorte que la relation (12) soit vérifiée, en identifiant  $\langle \delta, \varphi \rangle$  à l' "intégrale"  $\int_{\mathbb{R}} \delta(x) \varphi(x) dx$ .

Il convient de retenir de ce qui précède que si on se contente d'une source de chaleur de "masse" unité en  $t = 0$ , placée en  $x = 0$ , alors la solution du problème (10) (11) est donnée par la relation (9). De plus, si on remplace la condition particulière (11) par la condition générale (4), le problème (10) (4) a pour solution la température  $u$  donnée par la relation (8), qui est une convolution du noyau de Green (9) par la donnée initiale (4) :

$$(13) \quad u = G * u_0$$



**Figure 1 : Noyau de Green de l'équation de la chaleur à différents instants.**

La représentation graphique du noyau de Green Gaussien (figure 1) montre que dès que  $t > 0$ , la fonction  $G(t, \bullet)$  n'est pas nulle, ce qui indique que la donnée initiale (11), s'est propagée infiniment loin en un temps arbitrairement petit. Nous retenons que la **vitesse de propagation** de l'information est **infinie** pour l'équation de la chaleur (10).

Notons qu'avec le modèle d'advection étudié au chapitre 3, la propagation s'effectuait à vitesse finie, ce qui constitue la principale différence mathématique entre les modèles. L'équation d'advection est le prototype de ce que les mathématiciens appellent un problème hyperbolique alors que l'équation de la chaleur est un modèle dit **parabolique**.

A partir de la représentation intégrale (8), il est facile de tirer plusieurs propriétés de la solution de l'équation de la chaleur, qu'on peut ensuite chercher à retrouver lors de la résolution approchée.

**Proposition : Principe du maximum.**

On a les implications suivantes :

$$(14) \quad u_0 \geq 0 \Rightarrow u(t, x) \geq 0 \quad \forall t, \forall x$$

$$(15) \quad u_* \leq u_0 \leq u^* \Rightarrow u_* \leq u(t, x) \leq u^*, \quad \forall t, \forall X.$$

**Proposition : Stabilité  $L^2$**

Nous notons  $\| \cdot \|_0$  la norme  $L^2$  d'une fonction réelle :

$$(16) \quad \|w\|_0 = \left( \int_{\mathbb{R}} w^2(x) dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

La solution du problème (10) (4) vérifie :

$$(17) \quad \|u(\cdot, t)\|_0 \leq \|u_0\|_0.$$

**2) Schéma aux différences explicite à une dimension**

Nous prenons un second membre  $f$  identiquement nul, nous plaçons sur une barre infinie ( $\Omega = \mathbb{R}$ ), et cherchons donc à approcher numériquement l'équation de diffusion suivante :

$$(18) \quad \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial u}{\partial x} \right) = 0 \quad t > 0, \quad x \in \mathbb{R}.$$

Nous approchons la relation (18) par un schéma à deux niveaux en temps :

$$(19) \quad \frac{\partial u}{\partial t} \simeq \frac{1}{\Delta t} \left( u_j^{n+1} - u_j^n \right) \quad n \geq 0, \quad j \in \mathbb{Z}$$

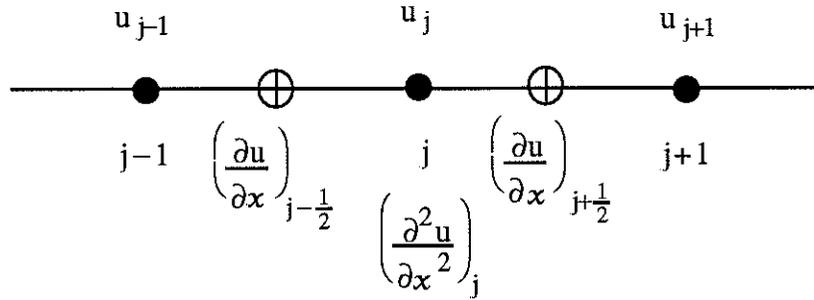
où  $u_j^n$  désigne l'approximation classique.

$$(20) \quad u_j^n \simeq u(n\Delta t, j\Delta x).$$

De plus, nous utilisons d'abord un schéma explicite, c'est-à-dire :

$$(21) \quad -\frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial u}{\partial x} \right) \simeq -\frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial u}{\partial x} \right) (t^n).$$

- La discrétisation de l'opérateur (21) par un schéma aux différences est très classique (figure 2).



**Figure 2 : Différences finies centrées pour l'approximation d'une dérivée seconde.**

On a d'abord une approximation centrée de la dérivée première entre les deux points de grille  $j$  et  $j+1$ .

$$(22) \quad k \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{j+\frac{1}{2}} = \frac{k}{\Delta x} (u_{j+1} - u_j) + O(\Delta x^2)$$

avec une relation analogue en  $(j-\frac{1}{2})$ :

$$(23) \quad k \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{j-\frac{1}{2}} = \frac{k}{\Delta x} (u_j - u_{j-1}) + O(\Delta x^2).$$

On effectue ensuite la différence entre les relations (22) et (23) pour approcher l'opérateur du second ordre (21) :

$$(24) \quad -\frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial u}{\partial x} \right)_j (x_j) = \frac{1}{\Delta x} \left\{ \frac{k}{\Delta x} (u_j - u_{j-1}) - \frac{k}{\Delta x} (u_{j+1} - u_j) \right\} + O(\Delta x^2)$$

$$(25) \quad -\frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial u}{\partial x} \right)_j (x_j) \approx \frac{k}{\Delta x^2} (-u_{j+1} + 2u_j - u_{j-1}).$$

On aboutit, compte tenu des choix antérieurs (19) et (21), au schéma explicite suivant :

$$(26) \quad \frac{1}{\Delta t} (u_j^{n+1} - u_j^n) + \frac{k}{\Delta x^2} (-u_{j+1}^n + 2u_j^n - u_{j-1}^n) = 0$$

dont le graphe de dépendance est illustré figure 3. Connaissant l'ensemble des états à l'instant  $n\Delta t$ , le calcul de chacun des états à l'instant ultérieur  $(n+1)\Delta t$  est directement fourni par la relation (26).

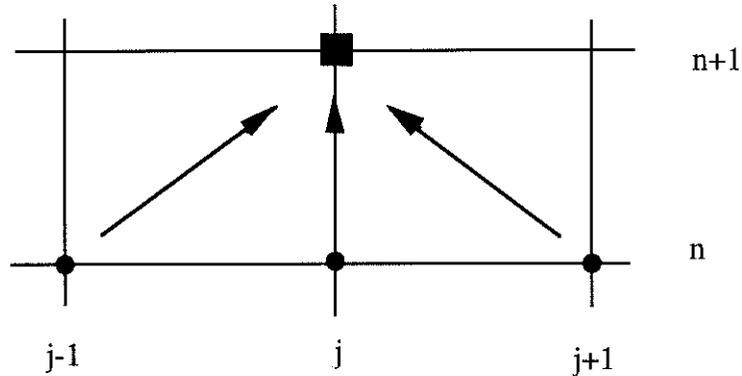


Figure 3 : Graphe de dépendance du schéma explicite (26).

### Proposition

Le schéma (26) approche l'équation de la chaleur (18) au **premier ordre en temps** et au **second ordre en espace**.

La preuve résulte d'un développement de Taylor de la relation au membre de gauche de (26), quand on l'applique aux valeurs de grille d'une solution de l'équation (18). Elle est laissée au lecteur.

### Proposition : Stabilité

On introduit deux coefficients sans dimension  $\alpha$  et  $\xi$ , définis pour une onde  $\exp(i p x)$  par les relations suivantes :

$$(27) \quad \alpha = k \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$

$$(28) \quad \xi = p \Delta x.$$

Le coefficient d'amplification  $g(\alpha, \xi)$  du schéma (26) s'écrit :

$$(29) \quad g(\alpha, \xi) = 1 - 4 \alpha \sin^2 \frac{\xi}{2},$$

la condition de stabilité de Von Neumann :

$$(30) \quad \forall \xi \in [0, 2\Pi], |g(\alpha, \xi)| \leq 1$$

s'écrit dans ce cas :

$$(31) \quad \alpha \leq \frac{1}{2}.$$

- Développement d'une instabilité

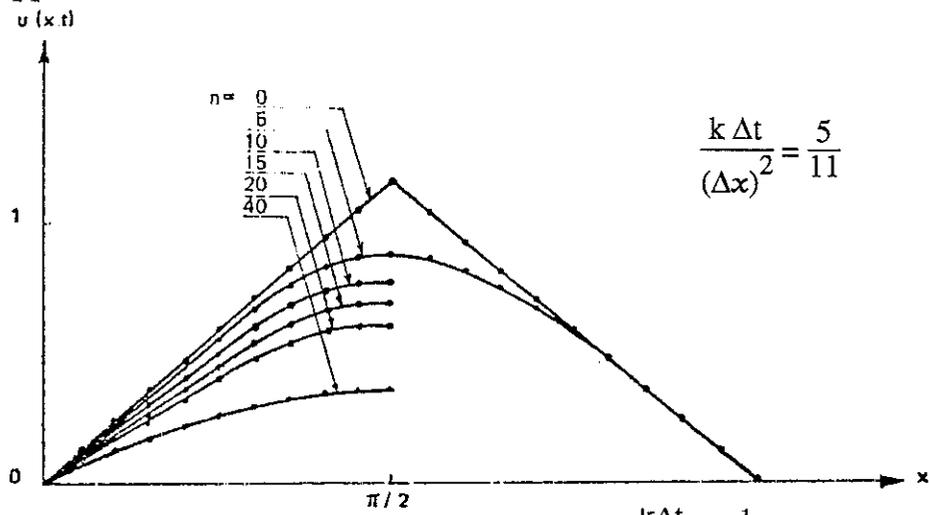


Figure 3 : Stabilité du schéma pour  $\frac{k \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$ .

Choisissons maintenant  $\Delta t$  tel que  $\frac{\Delta t}{\Delta x^2} = \frac{5}{9} \geq \frac{1}{2}$ . On représente les solutions

approchées pour  $n = 5, 10, 15$ .

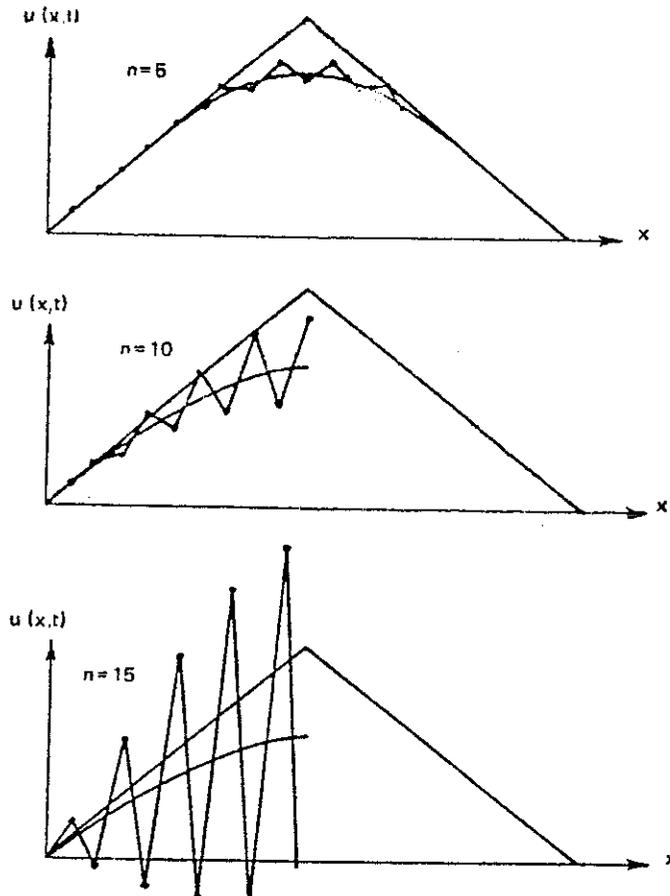


Figure 4 : Instabilité du schéma pour  $\frac{\Delta t}{\Delta x^2} > \frac{1}{2}$ .

### 3) $\theta$ -schéma en temps

L'idée est de passer du schéma explicite en temps, défini à la relation (21), à un schéma implicite paramétré par  $\theta$ ,  $0 \leq \theta \leq 1$ . L'opérateur de diffusion  $-\frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial u}{\partial x} \right)$  est interpolé en temps entre les instants  $n\Delta t$  (avec le poids  $(1-\theta)$ ) et  $(n+1)\Delta t$  (avec le poids  $\theta$ ). On a donc la relation suivante :

$$(32) \quad \frac{1}{\Delta t} \left( u_j^{n+1} - u_j^n \right) - \frac{k}{\Delta x^2} \left\{ \theta \left( u_{j+1}^{n+1} - 2 u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1} \right) + (1-\theta) \left( u_{j+1}^n - 2 u_j^n + u_{j-1}^n \right) \right\} = 0.$$

On remarque que pour  $\theta = 0$ , on retrouve le schéma explicite déjà vu au second paragraphe, alors que les choix  $\theta = 1$  et  $\theta = \frac{1}{2}$  définissent un schéma d'Euler implicite du premier ordre et le schéma de Crank-Nicolson du second ordre en temps. Quelle que soit la valeur de  $\theta$ , le schéma (32) reste du second ordre de précision en espace.

#### **Proposition :** Stabilité

Avec les notations introduites en (27)-(29), le  $\theta$ -schéma (32) pour l'équation de la chaleur a un coefficient d'amplification  $g(\alpha, \xi)$  donné par la relation :

$$(33) \quad g(\alpha, \xi) = \frac{1 - 4\alpha(1-\theta)\sin^2\frac{\xi}{2}}{1 + 4\alpha\theta\sin^2\frac{\xi}{2}}$$

Ce schéma est donc inconditionnellement stable si  $\theta \geq \frac{1}{2}$  :

$$(34) \quad \theta \geq \frac{1}{2} \Rightarrow \forall \xi, \forall \alpha \quad |g(\alpha, \beta)| \leq 1$$

et stable sous la condition suivante si  $\theta < \frac{1}{2}$  :

$$(35) \quad \theta < \frac{1}{2} \text{ et } \alpha \leq \frac{1}{2-4\theta} \Rightarrow \forall \xi, \quad |g(\alpha, \beta)| \leq 1. \quad \blacksquare$$

On gagne donc en stabilité avec le schéma (32) puisque si  $\theta$  est plus grand que  $\frac{1}{2}$ , il n'y a plus de restriction sur le pas de temps pour garantir que le schéma est stable, c'est-à-dire utilisable en pratique sur une machine qui fait des erreurs d'arrondis. Par contre, la construction du schéma est plus complexe. La relation (26) définissait une **formule** de calcul pour évaluer  $u$  à l'instant  $(n+1)\Delta t$  à partir de l'ensemble des valeurs  $u_j$  à l'instant  $n\Delta t$ . La relation (32) ne définit qu'un **système linéaire** pour calculer l'ensemble des valeurs  $u_k$  à l'instant  $(n+1)\Delta t$  à partir de l'ensemble des valeurs  $u_j$  connues à l'instant précédent. Nous précisons un peu ce point dans ce qui suit.

- On dispose d'un domaine unidimensionnel  $\Omega = ]0,L[$  discrétisé avec un pas constant de façon à placer  $N+1$  cellules.

$$(36) \quad \Delta x = \frac{L}{N+1}$$

Le point  $x_0 = 0$  est situé sur la frontière de gauche ; on se donne par exemple une condition de Dirichlet :

$$(37) \quad u_0^n = v_0^n$$

alors que le point  $x_{N+1} = L$  est situé sur la frontière de droite du domaine  $\Omega$  ; on se donne encore (pour simplifier l'exposé) une condition de Dirichlet.

$$(38) \quad u_{N+1}^n = v_L^n$$

Rappelons que l'indice  $n$  au second membre des relations (37) et (38) indique que la donnée au bord est variable en espace.

- Les inconnues sont les nombres  $u_j^{n+1}$  à évaluer à l'instant "suivant", pour  $j = 1, 2, \dots, N$ , ce à partir des valeurs  $u_k^n$  pour  $k = 0, \dots, N+1$ , en tenant compte des relations (37) et (38). Notons également que la condition limite à l'instant  $(n+1)$  est connue, puisque c'est une donnée du problème global à résoudre.

On lit pour les différentes valeurs de  $j$  la relation (32) et on fait apparaître des matrices. On range d'abord les inconnues  $u_j^{n+1}$  dans un vecteur  $U^{n+1}$  :

$$(39) \quad U^{n+1} = \begin{pmatrix} u_1^{n+1} \\ \vdots \\ u_j^{n+1} \\ \vdots \\ u_N^{n+1} \end{pmatrix}$$

On regarde la "ligne courante" pour la relation (32), c'est-à-dire des valeurs de  $j$  qui ne vont pas faire apparaître les conditions aux limites (37) et (38). En pratique,  $2 \leq j \leq N-1$ , on range à gauche du signe d'égalité tout ce qui est inconnu  $(n+1)$  et à droite tout ce qui est connu, après multiplication par  $\Delta t$ . Il vient :

$$(40) \quad -\theta \alpha u_{j-1}^{n+1} + (1 + 2\theta\alpha) u_j^{n+1} - \theta \alpha u_{j+1}^{n+1} = \\ = (1-\theta) \alpha u_{j-1}^n + (1-2(1-\theta)\alpha) u_j^n + (1-\theta) \alpha u_{j+1}^n.$$

• On s'intéresse ensuite aux valeurs extrêmes de  $j$  ( $j = 1$  et  $j = N$ ) où les conditions aux limites (37) (38) jouent un rôle actif. Pour  $j = 1$ , on obtient :

$$(41) \quad (1 + 2\theta\alpha) u_1^{n+1} - \theta \alpha u_2^{n+1} = (1-2(1-\theta)\alpha) u_1^n + (1-\theta) \alpha u_2^n \\ + \theta \alpha v_0^{n+1} + (1-\theta) \alpha v_0^n$$

et pour  $j = N$ , on a de même :

$$(42) \quad -\theta \alpha u_{N-1}^{n+1} + (1 + 2\theta\alpha) u_N^{n+1} = (1-\theta) \alpha u_{N-1}^n + (1 - 2(1-\theta)\alpha) u_N^n \\ + \theta \alpha v_L^{n+1} + (1-\theta) \alpha v_L^n.$$

• On écrit de façon synthétique les relations (41), (40) et (42) à l'aide du vecteur d'inconnues (39) sous la forme :

$$(43) \quad A U^{n+1} = B U^n + V$$

où  $A, B$  sont des matrices  $N \times N$  données par les relations suivantes :

$$(44) \quad A = \begin{bmatrix} 1 + 2\theta\alpha & -\theta\alpha & & & & & & & 0 \\ -\theta\alpha & 1 + 2\theta\alpha & -\theta\alpha & & & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & & & \ddots & \ddots & -\theta\alpha & 1 - 2\theta\alpha & -\theta\alpha & \\ 0 & & & & & -\theta\alpha & & 1 + 2\theta\alpha & \end{bmatrix}$$

$$(45) \quad B = \begin{bmatrix} 1-2(1-\theta)\alpha & (1-\theta)\alpha & & 0 \\ (1-\theta)\alpha & 1-2(1-\theta)\alpha & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1-2(1-\theta)\alpha & (1-\theta)\alpha \\ 0 & & & (1-\theta)\alpha & 1-2(1-\theta)\alpha \end{bmatrix}$$

et  $V$  est un vecteur d'ordre  $N$  associé aux valeurs au bord du domaine.

$$(46) \quad V = \begin{pmatrix} (\theta v_0^{n+1} + (1-\theta) v_0^n) \alpha \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ (\theta v_L^{n+1} + (1-\theta) v_L^n) \alpha \end{pmatrix}$$

- Disposant d'un schéma inconditionnellement stable (pour  $\theta \geq \frac{1}{2}$ ), ou peut être plus exigeant quant à sa qualité, c'est-à-dire se donner une propriété supplémentaire vérifiée par l'équation et se demander si elle est vérifiée par le schéma. Le principe du maximum (que nous ne détaillons pas dans ces notes) entraîne que si la température initiale est positive, cette propriété demeure vraie à tout instant. Cette notion ayant un sens physique évident, nous énonçons le résultat qui suit :

### Proposition

Le  $\theta$ -schéma (32) est de **type positif**, ie :

$$(47) \quad (\forall j \in \mathbb{Z}, u_j^n \geq 0) \Rightarrow (\forall k \in \mathbb{Z}, u_k^{n+1} \geq 0)$$

sous la condition suivante :

$$(48) \quad \alpha \leq \frac{2-\theta}{4(1-\theta)^2}$$

où  $\alpha$  est défini à la relation (27).

- Pour le schéma de Crank-Nicolson par exemple ( $\theta = \frac{1}{2}$ ), on trouve une condition de type  $\alpha \leq \frac{3}{2}$ , qui est moins restrictive que la condition (31) de stabilité pour le schéma explicite, mais donne toujours une condition où le pas de temps est limité par le carré du pas d'espace, à un facteur multiplicatif près.

#### 4) Schémas à trois niveaux en temps

Afin d'enrichir le panel de schémas possibles, où jusqu'ici seul le schéma de Crank-Nicolson est du second ordre en temps mais est en limite de stabilité inconditionnelle, nous présentons deux schémas à deux niveaux en temps, dont l'un a un pur intérêt historique et pédagogique et l'autre est plus récent.

- **Schéma de Richardson**

Ce schéma s'écrit sous forme d'un saute-mouton au-dessus du  $n^{\text{ème}}$  temps entre les instants  $n-1$  et  $n+1$ , l'opérateur en espace étant discrétisé à l'instant  $n$  :

$$(49) \quad \frac{1}{\Delta t} (u_j^{n+1} - u_j^{n-1}) - \frac{k}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) = 0 \quad .$$

On a la proposition suivante :

**Proposition :** Le schéma de Richardson (49) est du second ordre en espace et en temps. Il est **instable** quel que soit le pas de temps  $\Delta t$ .

Cette idée, proposée à la fin du XIX<sup>ème</sup> siècle, ne peut être mise en oeuvre à cause de l'instabilité du schéma explicite centré.

- **Schéma de Gear**

Ce schéma utilise une différentiation rétrograde implicite du second ordre à trois points :

$$(50) \quad \frac{\partial \varphi}{\partial t}(t^{n+1}) = \frac{1}{2} \left[ \frac{3}{2} \varphi^{n+1} - 2\varphi^n + \frac{1}{2} \varphi^{n-1} \right] + O(\Delta t^2)$$

et dans le contexte de l'équation de la chaleur, s'écrit :

$$(51) \quad \frac{1}{\Delta t} \left( \frac{3}{2} u_j^{n+1} - 2u_j^n + \frac{1}{2} u_j^{n-1} \right) - \frac{k}{\Delta x^2} \left( u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1} \right) = 0 .$$

### **Proposition**

Le schéma de Gear (51) est implicite, du second ordre de précision en espace et en temps, **inconditionnellement stable**.

La preuve de cette proposition est laissée en exercice au lecteur.

