Différences finies pour l'équation de la chaleur.

• On s'intéresse au problème de Cauchy pour l'équation de la chaleur, paramétré par un coefficient de diffusion constant $\kappa > 0$, une fonction source $f(\bullet)$ d'une variable réelle et une condition initiale $u_0(\bullet)$:

$$(1) \qquad \begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - \kappa \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x) \,, & x \in \mathbb{R} \,,\ t > 0 \\ u(x,\, 0) = u_0(x) \,, & x \in \mathbb{R} \,. \end{cases}$$

• On se donne un pas d'espace $h > 0$ et un pas de temps $\Delta t > 0$, les points de discrétisation $x_j = j\,h$ $(j \in \mathbb{Z})$ en espace et $t^n = n\,\Delta t$ $(n \in \mathbb{N})$ en temps qui définissent un maillage uniforme. On approche la solution, supposée régulière $u(x,\, t)$ du problème (1) au point de la grille $(x_j\,,\, t^n)$ par le nombre u_j^n. On sait que le schéma de discrétisation explicite classique à deux pas de temps défini par la relation

$$(2) \qquad \frac{1}{\Delta t}\,(u_j^{n+1} - u_j^n) - \frac{\kappa}{h^2}\,(u_{j+1}^n - 2\,u_j^n + u_{j-1}^n) = f(x_j) \,, \quad j \in \mathbb{Z} \,,\ n \in \mathbb{N}$$

est d'ordre deux en espace mais seulement d'ordre un en temps. On se propose dans cet exercice de définir un schéma aux différences à deux pas de temps qui soit stable et d'ordre deux à la fois en espace et en temps.

• On suppose $f \equiv 0$ et on pose

$$(3) \qquad U_j^n \equiv u(x_j\,,\, t^n) \,, \qquad j \in \mathbb{Z} \,,\ n \in \mathbb{N} \,.$$

1) Démontrer que pour $u(\bullet,\, \bullet)$ solution de (1), on a

$$(4) \qquad \frac{1}{\Delta t}\,(U_j^{n+1} - U_j^n) = \frac{\partial u}{\partial t}(x_j\,,\, t^n) + \frac{\kappa^2\,\Delta t}{2}\,\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j\,,\, t^n) + O(\Delta t^2) \,.$$

2) Proposer une approximation à cinq points et précise d'ordre deux de la dérivée partielle $\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$ d'ordre quatre en espace.

3) On suppose toujours $f \equiv 0$. Déduire des questions précédentes un schéma aux différences finies explicite à deux niveaux de temps et cinq points en espace dont l'erreur de troncature, dont on rappellera la définition, est d'ordre deux en espace et en temps, *i.e.* peut se développer sous la forme $O(\Delta t^2) + O(h^2) + O(\Delta t\, h^2)$.

4) Dans les conditions analogues à la question précédente, montrer que le schéma obtenu est stable au sens de Von Neumann sous une condition entre le coefficient de diffusion κ, le pas d'espace h et le pas de temps Δt qu'on précisera. Pour cela, on injecte dans le schéma de la question 3) une "onde" de la forme

$$(5) \qquad u_j^n = \exp(i\,j\,\xi) \,, \qquad j \in \mathbb{Z} \,, \quad i^2 = -1 \,,$$

paramétrée par le nombre réel ξ, on montre que le passage du temps discret conduit à une valeur de u_j^{n+1} de la forme

(6) $\qquad u_j^{n+1} \,=\, g(\sigma,\, \xi)\, u_j^n$

où σ est le paramètre réel à préciser et on exprime enfin que les paramètres du schéma sont tels qu'aucune onde n'est amplifiée.

5) Trouver une condition suffisante pour que le schéma proposé à la question 3) vérifie le principe du maximum, c'est à dire ici la condition :

(7) $\qquad \big(\alpha \,\leq\, u_k^n \,\leq\, \beta\,,\quad \forall\, k \in \mathbb{Z}\big) \;\Longrightarrow\; \big(\alpha \,\leq\, u_j^{n+1} \,\leq\, \beta\,,\quad \forall\, j \in \mathbb{Z}\big)\,.$

6) Comment faut-il modifier le schéma proposé à la question 3) pour garder l'ordre deux de précision en espace et en temps lorsque le second membre $f(\bullet)$ du problème (1) n'est pas identiquement nul ?

Frédéric Nataf et FD, juin 2002.

Différences finies pour l'équation de la chaleur.
Proposition de corrigé.

1) On remarque d'abord qu'on a :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t}\Big(\frac{\partial u}{\partial t}\Big) = \frac{\partial}{\partial t}\Big(\kappa\,\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big) = \kappa\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Big(\frac{\partial u}{\partial t}\Big) = \kappa\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Big(\kappa\,\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big) = \kappa^2\,\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$$

et il suffit ensuite d'appliquer la formule de Taylor pour établir la relation (4).

2) On part de la relation classique

$$\text{(S1)} \qquad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j) = \frac{1}{h^2}\,(u_{j+1} - 2\,u_j + u_{j-1}) + O(h^2)$$

et on l'itère pour approcher $\dfrac{\partial^4 u}{\partial x^4}$:

$$\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\Big(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big)(x_j) \approx \frac{1}{h^2}\Big(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_{j+1}) - 2\,\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j) + 2\,\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_{j-1})\Big)$$

$$\approx \frac{1}{h^4}\Big((u_{j+2} - 2\,u_{j+1} + u_j) - 2\,(u_{j+1} - 2\,u_j + u_{j-1}) + (u_j - 2\,u_{j-1} + u_{j-2})\Big)$$

ce qui conduit au schéma numérique suivant :

$$\text{(S2)} \qquad \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j) \approx \frac{1}{h^4}\,\big(u_{j+2} - 4\,u_{j+1} + 6\,u_j - 4\,u_{j-1} + u_{j-2}\big)\,.$$

Il reste à vérifier que ce schéma est effectivement d'ordre deux, ce qui est un exercice élémentaire d'utilisation de la formule de Taylor, laissé au lecteur.

3) Compte tenu des relations (4), (2) et (S2), le schéma aux différences s'écrit :

$$\text{(S3)} \qquad \left\{ \begin{array}{l} \dfrac{1}{\Delta t}\,(u_j^{n+1} - u_j^n) - \dfrac{\kappa}{h^2}\,(u_{j+1}^n - 2\,u_j^n + u_{j-1}^n) \\ \quad - \dfrac{\kappa^2\,\Delta t}{2\,h^4}\,\big(u_{j+2}^n - 4\,u_{j+1}^n + 6\,u_j^n - 4\,u_{j-1}^n + u_{j-2}^n\big) = 0 \end{array} \right. \qquad j \in \mathbb{Z}\,,\ n \in \mathbb{N}\,.$$

L'erreur de troncature $\mathcal{T}_j^n$ est par définition égale à l'expression obtenue au membre de gauche de la relation (S3), en remplaçant partout l'approximation u_k^p par la valeur interpolée U_k^p définie à la relation (2). La propriété pour le schéma (S3) d'avoir une erreur de troncature de la forme $O(\Delta t^2) + O(h^2) + O(\Delta t\,h^2)$, donc d'être d'ordre deux en espace et en temps, est alors une conséquence directe de la formule de Taylor (4) et de la précision d'ordre deux en espace des schémas proposés aux relations (S1) et (S2).

4) On pose

$$\text{(S4)} \qquad \sigma = \Delta t\,\frac{\kappa}{h^2}$$

et on tire de (S3), (5) et (6) :

$$
\begin{aligned}
g &= 1 + \Delta t\,\frac{\kappa}{h^2}\,(2\cos\xi - 2) + \frac{\Delta t^2}{2}\,\frac{\kappa^2}{h^4}\,(2\cos(2\,\xi) - 8\cos\xi + 6) \\
&= 1 + 2\,\sigma\,(1-\cos\xi) + \sigma^2\,(2\cos^2\xi - 1 - 4\cos\xi + 3) \\
&= 1 - 4\,\sigma\sin^2\big(\frac{\xi}{2}\big) + 2\,\sigma^2\,(1-\cos\xi)^2 \\
&= 1 - 4\,\sigma\sin^2\big(\frac{\xi}{2}\big) + 8\,\sigma^2\sin^4\big(\frac{\xi}{2}\big)\,,
\end{aligned}
$$

donc

(S5) $$g(\sigma\,,\,\xi) = 1 - 4\,\sigma\sin^2\big(\frac{\xi}{2}\big) + \frac{1}{2}\Big(4\,\sigma\sin^2\big(\frac{\xi}{2}\big)\Big)^2 .$$

La condition de stabilité

(S6) $$|\,g(\sigma\,,\,\xi)\,| \leq 1\,, \qquad \forall\,\xi \in \mathbb{R}$$

conduit à étudier pour quelles valeurs de la variable $y \equiv 4\,\sigma\sin^2(\xi/2)$ le polynome $1-y+\frac{1}{2}y^2$ prend des valeurs inférieures ou égales à 1 en valeur absolue. On trouve sans difficulté $0 \leq y \leq 2$ et compte tenu de la relation (S6) et de la positivité des constantes κ, h et Δt, cette condition s'écrit

(S7) $$\sigma \leq \frac{1}{2}\,.$$

5) Il suffit d'exprimer que le schéma (S3) définit la nouvelle valeur u_j^{n+1} comme combinaison convexe des variables u_k^n pour $k \in \mathbb{Z}$. Or on a :

$$u_j^{n+1} = (1-2\,\sigma+3\,\sigma^2)\,u_j^n + (\sigma-2\,\sigma^2)\,(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) + \frac{\sigma^2}{2}\,(u_{j+2}^n + u_{j-2}^n)\,.$$

On vérifie aisément que la somme des coefficients de la relation précédente est égale à 1, donc la condition (7) est impliquée par les deux inégalités $1-2\,\sigma+3\,\sigma^2 \geq 0$ et $\sigma - 2\,\sigma^2 \geq 0$. On en déduit que sous la condition (S7), le schéma (S3) est monotone.

6) La relation (4) doit être modifiée. En effet, si le second membre f est non nul, on a

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial t}\Big(\frac{\partial u}{\partial t}\Big) = \frac{\partial}{\partial t}\Big(\kappa\,\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f\Big) = \kappa\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Big(\frac{\partial u}{\partial t}\Big) = \kappa\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Big(\kappa\,\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f\Big) \\
&= \kappa^2\,\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \kappa\,\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\,.
\end{aligned}
$$

Il suffit donc de modifier le schéma (S3) en utilisant la relation (S1) à partir du calcul précédent. On en déduit :

(S8) $$\left\{\begin{array}{l}
\dfrac{1}{\Delta t}\,(u_j^{n+1} - u_j^n) - \dfrac{\kappa}{h^2}\,(u_{j+1}^n - 2\,u_j^n + u_{j-1}^n) \\
-\dfrac{\kappa^2\,\Delta t}{2\,h^4}\,\big(u_{j+2}^n - 4\,u_{j+1}^n + 6\,u_j^n - 4\,u_{j-1}^n + u_{j-2}^n\big) = \\
\quad = f(x_j) + \dfrac{\kappa\,\Delta t}{2\,h^2}\,\big(f(x_{j+1}) - 2\,f(x_j) + f(x_{j-1})\big)\,, \qquad j \in \mathbb{Z}\,,\ n \in \mathbb{N}\,.
\end{array}\right.$$

FD, juillet 2002.