Étude du θ-schéma pour l'équation de la chaleur

Références : Quarteroni, Sacco, Saleri, *Méthodes numériques*, p 458-459
Di Menza, *Analyse numérique des équations aux dérivées partielles*, p 98

On étudie l'équation de la chaleur unidimensionnelle sur le pavé $[0,T]\times[0,L]$. Elle s'écrit comme suit, pour un paramètre $\nu > 0$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0.$$

On suppose connue l'existence de la solution classique. De plus, on peut montrer qu'elle est $\mathcal{C}^\infty$.

Notre but est d'approcher numériquement la solution de cette équation avec un schéma numérique aux différences finies particulier nommé le θ-schéma.

On se donne une discrétisation en temps $t_n = n\tau$ et en espace $x_j = jh$ avec $n \in [0,N]$, $j \in [0,J]$ et $N\tau = T$, $Jh = L$. On note u_j^n une approximation de $u(t_n, x_j)$ (que l'on va construire).
Pour $\theta \in [0,1]$, on définit le θ-schéma par

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} = \nu\theta \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + \nu(1-\theta)\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2}.$$

Si les indices sortent du domaine défini, on leur donne la valeur 0 pour simplifier.

Théorème.

Le θ-schéma est convergent pour la norme l^2 si $\theta \geqslant \frac{1}{2}$, ou sous la condition CFL $(1-2\theta)\frac{2\nu\tau}{h^2} \leqslant 1$ si $\theta < \frac{1}{2}$.
Il est d'ordre un en temps et deux en espace si $\theta \neq \frac{1}{2}$ et d'ordre deux en temps et en espace sinon (schéma de Crank-Nicholson).

Démonstration. • Le schéma est-il bien défini ?
On note $u^n = (u_j^n)_j$ et

$$A_\Delta = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Alors le schéma se réécrit

$$\left(I + \theta\frac{\nu\tau}{h^2}A_\Delta\right)u^{n+1} = \left(I - (1-\theta)\frac{\nu\tau}{h^2}A_\Delta\right)u^n.$$

Le schéma est donc bien défini si $I + \theta\frac{\nu\tau}{h^2}A_\Delta$ est inversible.
Observons les valeurs propres de A_Δ :
On remarque que le vecteur $V_p = \left(\sin\left(\frac{jp\pi}{J+1}\right)\right)_j$ est vecteur propre de A_Δ pour la valeur propre $\lambda_p = 2\left(1-\cos\left(\frac{p\pi}{J+1}\right)\right)$ pour $p \in [1,J]$. Donc $\mathrm{Sp}(A_\Delta) = \left\{4\sin^2\left(\frac{p\pi}{2(J+1)}\right)\right\}$.
Il vient donc

$$\min \mathrm{Sp}(I + \theta\frac{\nu\tau}{h^2}A_\Delta) = 1 + \theta\frac{4\nu\tau}{h^2}\sin^2\left(\frac{\pi}{2(J+1)}\right) > 0.$$

Donc $I + \theta\frac{\nu\tau}{h^2}A_\Delta$ est inversible et le schéma est bien défini.

• Consistance du schéma.[1]
Il s'agit d'utiliser les formules de Taylor pour montrer que la vraie solution vérifie avec un bon ordre le schéma. On remarque d'abord que

$$\frac{u(t_{n+1},x_j)-u(t_n,x_j)}{\tau} = \frac{\partial u}{\partial t}(t_n,x_j) + \frac{\tau}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(t_n,x_j) + O(\tau^2).$$

Puis

$$\begin{aligned}\frac{u(t_n,x_{j+1})-2u(t_n,x_j)+u(t_n,x_{j-1})}{h^2} &= \frac{1}{h}\left(\frac{\partial u}{\partial x}(t_n,x_j) + \frac{h}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t_n,x_j) + \frac{h^2}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(t_n,x_j) + O(h^3)\right.\\ &\qquad \left. -\frac{\partial u}{\partial x}(t_n,x_j) + \frac{h}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t_n,x_j) - \frac{h^2}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(t_n,x_j) + O(h^3)\right)\\ &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t_n,x_j) + O(h^2).\end{aligned}$$

De même,

$$\begin{aligned}\frac{u(t_{n+1},x_{j+1})-2u(t_{n+1},x_j)+u(t_{n+1},x_{j-1})}{h^2} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t_{n+1},x_j) + O(h^2)\\ &= \frac{1}{\nu}\frac{\partial u}{\partial t}(t_{n+1},x_j) + O(h^2)\\ &= \frac{1}{\nu}\frac{\partial u}{\partial t}(t_n,x_j) + \frac{\tau}{\nu}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(t_n,x_j) + O(h^2+\tau^2)\end{aligned}$$

En remplaçant tous ces termes dans le schéma, on obtient l'erreur de consistance en (t_n,x_j) ε_j^n :

$$\begin{aligned}\varepsilon_j^n &= \frac{\partial u}{\partial t}(t_n,x_j) + \frac{\tau}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(t_n,x_j) - \theta\frac{\partial u}{\partial t}(t_n,x_j) - \tau\theta\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(t_n,x_j) - \nu(1-\theta)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t_n,x_j) + O(h^2+\tau^2)\\ &= (1-\theta)\left(\frac{\partial u}{\partial t} - \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)(t_n,x_j) + \tau\left(\frac{1}{2}-\theta\right)\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(t_n,x_j) + O(h^2+\tau^2)\\ &= \tau\left(\frac{1}{2}-\theta\right)\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(t_n,x_j) + O(h^2+\tau^2)\end{aligned}$$

On a $\max_n \|\varepsilon^n\| = O(h^2+\tau)$, donc le schéma est consistant.
De plus, si $\theta = \frac{1}{2}$, on gagne un ordre en temps !

• Stabilité du schéma.
On a

$$u^{n+1} = \left(I + \theta\frac{\nu\tau}{h^2}A_\Delta\right)^{-1}\left(I - (1-\theta)\frac{\nu\tau}{h^2}A_\Delta\right)u^n.$$

Si on écrit $B = \left(I + \theta\frac{\nu\tau}{h^2}A_\Delta\right)^{-1}\left(I - (1-\theta)\frac{\nu\tau}{h^2}A_\Delta\right)$, alors son spectre est

$$\mathrm{Sp}(B) = \left\{\left(1+\theta\frac{4\nu\tau}{h^2}\sin^2\left(\frac{p\pi}{2(J+1)}\right)\right)^{-1}\left(1-(1-\theta)\frac{4\nu\tau}{h^2}\sin^2\left(\frac{p\pi}{2(J+1)}\right)\right)\right\}$$

En simplifiant,

$$\mathrm{Sp}(B) = \left\{1 - \left(1+\theta\frac{4\nu\tau}{h^2}\sin^2\left(\frac{p\pi}{2(J+1)}\right)\right)^{-1}\frac{4\nu\tau}{h^2}\sin^2\left(\frac{p\pi}{2(J+1)}\right)\right\} \subset]-\infty,1[$$

La méthode est donc stable si et seulement si $\rho(B) \leqslant 1$ (car B est symétrique), c'est à dire si et seulement si pour tout $p \in [1,J]$, on a

$$\frac{4\nu\tau}{h^2}\sin^2\left(\frac{p\pi}{2(J+1)}\right) \leqslant 2\left(1+\theta\frac{4\nu\tau}{h^2}\sin^2\left(\frac{p\pi}{2(J+1)}\right)\right).$$

Donc si et seulement si

$$(2\theta-1)\frac{2\nu\tau}{h^2}\sin^2\left(\frac{J\pi}{2(J+1)}\right) \geqslant -1.$$

1. Selon la leçon, on va plus ou moins vite sur cette partie.

On voit d'abord que si $\theta \geqslant \frac{1}{2}$, alors le schéma est inconditionnellement stable.
Si ce n'est pas le cas, comme on peut faire tendre $\sin^2\left(\frac{J\pi}{2(J+1)}\right)$ vers 1 en augmentant J, il faut que la condition $(1-2\theta)\frac{2\nu\tau}{h^2} \leqslant 1$ soit vérifiée.

On retrouve ainsi les conditions du théorème.

• Autre version de la stabilité pour la leçon 110 (transformée de Fourier discrète).
On applique la transformée de Fourier discrète à notre schéma : pour tout $\xi \in \left[-\frac{\pi}{h}, \frac{\pi}{h}\right]$, on a

$$\widehat{u^{n+1}} = \widehat{u^n} + \frac{\nu\theta\tau}{h^2}(e^{ih\xi} - 2 + e^{-ih\xi})\widehat{u^{n+1}} + \frac{\nu(1-\theta)\tau}{h^2}(e^{ih\xi} - 2 + e^{-ih\xi})\widehat{u^n}.$$

Or $e^{ih\xi} - 2 + e^{-ih\xi} = 2(\cos(h\xi) - 1) = -4\sin^2\left(\frac{h\xi}{2}\right)$, d'où il vient

$$\widehat{u^{n+1}} = \left(1 + \frac{4\nu\theta\tau}{h^2}\sin^2\left(\frac{h\xi}{2}\right)\right)^{-1}\left(1 - \frac{4\nu(1-\theta)\tau}{h^2}\sin^2\left(\frac{h\xi}{2}\right)\right)\widehat{u^n}.$$

Le schéma est stable si et seulement si le coefficient d'amplification est de module inférieur ou égal à 1. On retrouve ainsi les calculs présentés précédemment et on obtient la même condition CFL en évaluant en $\xi = \frac{\pi}{h}$.

• Convergence du schéma.
On va reprouver le théorème de Lax qui dit qu'un schéma stable et consistant est convergeant, c'est à dire $\max_n \|u^n - v^n\| \underset{h,\tau\to 0}{\to} 0$, où on note v^n le vecteur donné par la solution exacte évalué au temps t_n et en les points x_j.

On a $v^{n+1} = Bv^n + \tau\varepsilon^n$, donc si l'on pose $w_n = v_n - u_n$, on a

$$w^{n+1} = Bw^n + \tau\varepsilon^n.$$

Donc $w^n = B^n w^0 + \tau \sum_{k=0}^{n-1} B^k \varepsilon^k$.
Puis on sait que $w^0 = 0$, $\|B\| \leqslant 1$ (par stabilité) et $\max_n \|\varepsilon^n\| \underset{h,\tau\to 0}{\to} 0$ (par consistance), donc

$$\max_n \|w^n\| \leqslant \underbrace{N\tau}_{=T} \max_n \|\varepsilon^n\| \underset{h,\tau\to 0}{\to} 0.$$

Le schéma est donc convergent.

□

Remarques : • On peut aussi étudier la stabilité l^∞, mais la l^2 est plus simple : il suffit d'étudier le rayon spectral.
En effet, si $\rho(B) \leqslant 1$, alors

$$\left\|u^{n+1}\right\|_2 = \|Bu^n\|_2 \leqslant \|B\|_2 \|u^n\|_2 = \rho(B)\|u^n\|_2 \leqslant \|u^n\|_2.$$

Donc $\|u^n\|_2 \leqslant \left\|u^0\right\|_2$ et on a la stabilité.

Si au contraire $\rho(B) > 1$, alors on a une valeur propre de module strictement plus grand que 1, donc en prenant pour condition initiale le vecteur propre associé, on explose.
• Si c'est trop long, on peut juste étudier le cas $\theta = 0$.