Analyse du θ-schéma pour l'équation de la chaleur.

C'est long mais on peut choisir d'en présenter seulement quelques parties. Par exemple, je prévoyais de développer seulement la stabilité et la convergence et d'admettre la consistance qui est un calcul fort peu intéressant.

Introduction

On cherche une méthode numérique de résolution de l'équation de la chaleur (dans un cercle) :

$$\begin{cases} \partial_t u &= \nu \partial_{xx}^2 u \quad (x,t) \in (0,1) \times \mathbf{R}_+^* \\ u(0,x) &= u_0(x) \end{cases}$$

On admet que le problème a une unique solution, notée u qui est suffisamment régulière. On discrétise le temps et l'espace :

$$\Delta t > 0, \quad \Delta x = \frac{1}{N+1}, \quad (t_n, x_j) = (n\Delta t, j\Delta x).$$

On pose pour $j \in \{0, \ldots, N+1\}$, $u_j^0 = u_0(x_j)$. On définit le θ-schéma pour $\theta \in [0,1]$:

$$F\Big(\{u_j^n\}\Big) := \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \theta\nu \frac{-u_{j-1}^{n+1} + 2u_j^{n+1} - u_{j+1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + (1-\theta)\nu \frac{-u_{j-1}^n + 2u_j^n - u_{j+1}^n}{(\Delta x)^2} = 0$$

où u_j^n est une approximation de $u(t_n, x_j)$ pour $n \geq 0$ et $j \in \{0, \ldots, N+1\}$. Les conditions au bord sont périodiques : $u_{N+1}^n = u_0^N = 0$ de sorte qu'on s'intéresse à $(u_j^n)_{1 \leq j \leq N} \in \mathbf{C}^N$ pour tout $n \in \mathbf{N}$. De façon plus concise on peut écrire :

$$(Id + s\theta A)u^{n+1} = (Id - s(1-\theta)A)u^n$$

où

$$s = \nu \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \quad \text{et} \quad A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \in \mathcal{M}_N(\mathbf{C}).$$

Consistance

On dit que le schéma donné par F est consistant lorsque $F\Big(\big\{u(t_n,x_j)\big\}\Big) \to 0$ lorsque $\Delta t, \Delta x \to 0$. On dit qu'il est d'ordre (p,q) lorsque $F\Big(\big\{u(t_n,x_j)\big\}\Big) = \mathcal{O}\Big((\Delta t)^p + (\Delta x)^q\Big)$.

Appliquons les formules de Taylor :

$$\frac{u(t_{n+1},x_j) - u(t_n,x_j)}{\Delta t} = \partial_t u(t_n,x_j) + \frac{\Delta t}{2}\partial_{tt}^2(t_n,x_j) + \mathcal{O}\big((\Delta t)^2\big).$$

$$\frac{u(t_n,x_{j-1})-2u(t_n,x_j)+u(t_n,x_{j+1})}{(\Delta x)^2}=\partial^2_{xx}u(t_n,x_j)+\mathcal{O}\big((\Delta x)^2\big).$$

$$\begin{aligned}\frac{u(t_n,x_{j-1})-2u(t_n,x_j)+u(t_n,x_{j+1})}{(\Delta x)^2} &= \partial^2_{xx}u(t_n,x_j)+\mathcal{O}\big((\Delta x)^2\big)\\ &= \frac{1}{\nu}\partial_t u(t_{n+1},x_j)+\mathcal{O}\big((\Delta x)^2\big)\\ &= \frac{1}{\nu}\partial_t u(t_n,x_j)+\frac{\Delta t}{\nu}\partial^2_{tt}u(t_n,x_j)+\mathcal{O}\big((\Delta x)^2+(\Delta t)^2\big)\end{aligned}$$

De sorte que :

$$F\Big(\big\{u(t_n,x_j)\big\}\Big)=\Delta t\left(\frac{1}{2}-\theta\right)\partial^2_{tt}u(t_n,x_j)+\mathcal{O}\big((\Delta x)^2+(\Delta t)^2\big).$$

Stabilité L^2

On dit que le schéma est stable en norme $\|\cdot\|$ lorsqu'il existe une constante $K>0$ indépendante de Δt et Δx telle que pour tout $n>0$, $\big\|\{u_j^n\}_j\big\|\le K\big\|\{u_j^0\}_j\big\|$. Dans la suite, on étudie la stabilité du θ-schéma en norme L^2.

On note u^n la fonction constante par morceaux égale à u_j^n sur chaque intervalle $[(j-1/2)\Delta x,(j+1/2)\Delta x]$, 1-périodique. Alors,

$$\|u^n\|_{L^2}=\left(\int_0^1|u^n(x)|^2dx\right)^{1/2}=\left(\sum_{j=0}\Delta x|u_j^n|^2\right)^{1/2}=\big\|\{u_j^n\}_j\big\|_{\ell^2}.$$

En tant que fonction périodique de $L^2(0,1)$, u^n se décompose en série de Fourier :

$$u^n(x)=\sum_{k\in\mathbf{Z}}\hat{u}^n(k)\exp(2i\pi kx)\quad\text{où}\quad\hat{u}^n(k)=\int_0^1u^n(x)\exp(-2i\pi kx)dx.$$

Notons que si $v^n(x)=u^n(x+\Delta x)$ alors $\hat{v}^n(k)=\hat{u}^n(k)\exp(2i\pi k\Delta x)$ et que la norme L^2 de u^n est reliée à la norme ℓ^2 des coefficients par la formule de Plancherel :

$$\|u^n\|_{L^2}=\left(\sum_{k\in\mathbf{Z}}|\hat{u}^n(k)|^2\right)^{1/2}.$$

En Fourier-transformant la définition du schéma, on trouve :

$$\begin{aligned}\frac{\hat{u}^{n+1}(k)-\hat{u}^n(k)}{\Delta t}&+\theta\nu\frac{-\hat{u}^{n+1}(k)e^{-2i\pi k\Delta x}+2\hat{u}^{n+1}(k)-\hat{u}^{n+1}(k)e^{2i\pi k\Delta x}}{(\Delta x)^2}\\ &+(1-\theta)\nu\frac{-\hat{u}^n(k)e^{-2i\pi k\Delta x}+2\hat{u}^n(k)-\hat{u}^n(k)e^{2i\pi k\Delta x}}{(\Delta x)^2}=0\end{aligned}$$

c'est à dire :

$$\hat{u}^{n+1}(k) = \frac{1 - 2\frac{(1-\theta)\nu\Delta t}{(\Delta x)^2}(1-\cos(2\pi k\Delta x))}{1 + 2\frac{\theta\nu\Delta t}{(\Delta x)^2}(1-\cos(2\pi k\Delta x))}\hat{u}^n(k) =: A(k)\hat{u}^n(k).$$

La formule de Plancherel donne :

$$\|u^n\|_2^2 = \sum_{k\in\mathbf{Z}} |\hat{u}^n(k)|^2 = \sum_{k\in\mathbf{Z}} |A(k)^n \hat{u}^0(k)|^2$$

d'où l'on voit que la stabilité du schéma est équivalente à la condition de von Neumann :

$$\forall k \in \mathbf{Z}, \ \ |A(k)| \leq 1.$$

(prendre u^0 avec un seul mode de Fourier non nul tel que $|A(k)| > 1$). Dans le cas présent, on résume la situation par :

Proposition. *Le θ-schéma est stable en norme L^2 inconditionnellement si $1/2 \leq \theta \leq 1$ et sous le condition CFL (Courant-Friedrichs-Lewy)*

$$2(1-2\theta)\nu\Delta t \leq (\Delta x)^2$$

si $0 \leq \theta < 1/2$.

PREUVE. La condition s'écrit :

$$-1 - 2s\theta(1-\cos(2\pi k\Delta x)) \leq 1 - 2(1-\theta)s(1-\cos(2\pi k\Delta x))$$

C'est à dire :

$$s(1-2\theta)(1-\cos(2\pi k\Delta x)) \leq 1.$$

Et une formule de trigonométrie donne :

$$2s(1-2\theta)\sin^2(\pi k\Delta x) \leq 1.$$

Ceci devant être vrai pour tout $k \in \mathbf{Z}$ et tout $\Delta x > 0$. □

Convergence

En notant $e_j^n = u_j^n - u(t_n, x_j)$, on montre (c'est un cas local du théorème de Lax) que sous hypothèses de consistance et de stabilité L^2, le θ-schéma est convergent au sens où :

$$\forall T > 0, \quad \lim_{\Delta t, \Delta x \to 0} \left(\sup_{t_n \leq T} \|e^n\|_{\ell^2} \right) = 0.$$

Comme le schéma est linéaire, on peut écrire :

$$u^{n+1} = Au^n$$

pour une certaine matrice A. En notant $\tilde{u}_j^n = u(t_n, x_j)$, on a par consistance du schéma

$$\tilde{u}^{n+1} = A\tilde{u}^n + \Delta t \varepsilon^n \ \text{ où } \lim_{\Delta t, \Delta x \to 0} \|\varepsilon^n\| = 0.$$

Puis :

$$e^{n+1} = Ae^n - \Delta t \varepsilon^n.$$

et par stabilité ℓ^2 du schéma, $\|A^n\| \leq K$ donc :

$$\|e^n\|_{\ell^2} \leq \Delta t \sum_{k=1}^{n} \|A^{n-k}\| \|\varepsilon^{k-1}\| \leq \Delta t n K C \Big((\Delta x)^p + (\Delta t)^q \Big).$$

Calcul numérique et FFT.

On définit la convolution circulaire de deux vecteurs $f, g \in \mathbf{C}^N$ par :

$$f * g(j) = \sum_{k=1}^{N} f(k) g(j-k)$$

où les coefficients sont vus modulo N avec la convention $f(N+1) = g(N+1) = f(0) = g(0) = 0$. Plus précisément :

$$f * g(j) = \sum_{k=1}^{N} f(k) g(j-k) = \sum_{k=1}^{j-1} f(k) g(j-k) + \sum_{k=j+1}^{N} f(k) g(j-k+N).$$

Avec cette écriture et en posant $g = (s,\, 0, \ldots,\, s,\, -2s) \in \mathbf{C}^N$, le θ-schéma s'écrit :

$$u^{n+1} - u^n = g * (\theta u^{n+1} + (1-\theta) u^n).$$

Maintenant, on définit la transformée de Fourier d'un vecteur $v \in \mathbf{C}^N$ par :

$$\forall k \in \{1, \ldots, N\}, \quad \hat{v}(k) := \sum_{n=1}^{N} v(n) e^{2i\pi kn/N}.$$

Proposition. *La transformée de Fourier discrète jouit des propriétés suivantes :*

- *Pour $f, g \in \mathbf{C}^N$, on a :*

$$\forall k \in \{1, \ldots, N\}, \quad \widehat{f * g}(k) = \hat{f}(k) \hat{g}(k).$$

- *On a la formule d'inversion suivante :*

$$\forall n \in \{1, \ldots, N\}, \quad f(n) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \hat{f}(k) e^{2i\pi nk/N}.$$

- *Il existe un algorithme permettant de calculer la transformée de Fourier discrète d'un vecteur de $\mathbf{C}^N$ (ou son inverse) en $\mathcal{O}(N \log N)$ opérations.*

On dispose dès lors d'un moyen efficace pour le calcul numérique du θ-schéma puisque :

$$\forall k \in \{1, \ldots, N\}, \quad \hat{u}^{n+1}(k) = \frac{1 + (1-\theta)\hat{g}(k)}{1 - \theta \hat{g}(k)} \hat{u^n}(k)$$

avec

$$\forall k \in \{1, \dots, N\}, \quad \hat{g}(k) = 2s\left(\cos\left(\frac{2k\pi}{N}\right) - 1\right).$$

Il suffit d'inverser la relation pour trouver $\hat{u}^n$ à l'itération voulue. Remarquons qu'on retrouve l'étude de stabilité de von Neumann, la condition de stabilité étant ici :

$$\forall k \in \{1, \dots, N\}, \quad \left|\frac{1 + (1-\theta)\hat{g}(k)}{1 - \theta\hat{g}(k)}\right| \leq 1.$$

Références.

G. Allaire, *Analyse numérique et à optimisation*
G. Peyré, *L'algèbre discrète de la transformée de Fourier*

110 Caractères d'un groupe abélien fini et transformée de Fourier discrète. Applications. *(après FFT)*
218 Applications des formules de Taylor. *(ou pas, du coup)*
222 Exemples d'équations aux dérivées partielles linéaires.
233 Méthodes itératives en analyse numérique matricielle.
246 Séries de Fourier. Exemples et applications.