

Analyse Numérique des EDO et des EDP - Projet

A rendre au plus tard le jour de l'examen final, en Janvier 2011.

- Ce qui vous est demandé :
 - Rédiger les réponses aux questions théoriques de l'énoncé en les illustrant, le cas échéant, par les résultats numériques obtenus par des programmes Scilab.
 - Fournir également (par e-mail) vos programmes Scilab (scripts et fonctions). On fera un programme différent pour chacune des deux parties de l'énoncé.
- Conseils importants :
 - Lire tout le sujet avant de commencer.
 - Avant de vous lancer dans la programmation, écrire sur papier :
 - Un canevas rapide de ce que vous devez mettre dans votre programme principal et dans quel ordre (initialisation, calcul proprement dit, sortie numérique ou graphique des résultats, etc ...).
 - La liste des variables principales que vous allez utiliser, en précisant la taille des vecteurs et des matrices pour éviter les (**très fréquentes**) erreurs dans les indices ...
 - Les fonctions annexes que vous devrez éventuellement programmer.
 - Ne pas hésiter à utiliser les lignes de commentaires dans Scilab pour bien signaler les différentes parties du programme, la signification des variables, etc ...
- Les deux parties du projet sont totalement indépendantes !

Partie I - Un peu de cinétique chimique

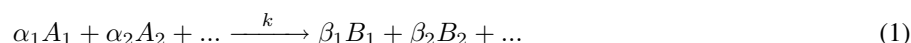
I.1 Introduction

Pendant de nombreuses années, les chimistes ont cru que, dès que l'on fait réagir un certain nombre de composants entre eux, deux types de comportement pouvaient survenir : ou bien le système est très instable et s'emballe (sous la forme d'une explosion par exemple ...) ou alors le système évolue vers un état d'équilibre chimique dans lequel les proportions de chacun des constituants restent constantes au cours du temps.

Ce n'est qu'au milieu du 20^{ème} siècle que l'existence de réactions chimiques présentant un comportement cyclique périodique a été prouvée¹. Le but de cette partie est d'étudier un modèle mathématique rendant compte de tels phénomènes.

I.2 Rappels de cinétique chimique

On note une réaction chimique **élémentaire** irréversible sous la forme



Les A_i sont les réactifs, les B_i sont les produits² et les coefficients entiers positifs α_i, β_i sont appelés coefficients stoechiométriques de la réaction, ils mesurent le nombre de molécules de chaque réactif nécessaire pour que la réaction ait lieu et le nombre de produits obtenus. Le nombre k au-dessus de la flèche désigne la constante cinétique de la réaction et sert à établir la dynamique temporelle de celle-ci.

De façon plus précise, cette dynamique est régie par **la loi d'action de masse** qui dit que la vitesse d'avancement de la réaction est proportionnelle aux concentrations de tous les réactifs (comptés autant de fois que ne l'exige le coefficient stoechiométrique associé). Ainsi, en supposant le volume, la température, la pression constante dans le dispositif expérimental, le nombre moyen de réactions qui vont se produire durant un petit intervalle de temps $\Delta t > 0$ va être de la forme

$$\Delta t k [A_1]^{\alpha_1} [A_2]^{\alpha_2} \dots,$$

où k est la constante cinétique indiquée sur (1) et où on a noté $[\cdot]$ la concentration d'une espèce dans la solution.

1. En supposant que la réaction (1) ne concerne que deux réactifs A_1, A_2 et deux produits B_1, B_2 , ces quatre constituants étant distincts, justifier que l'évolution en temps de la réaction est décrite par les équations différentielles

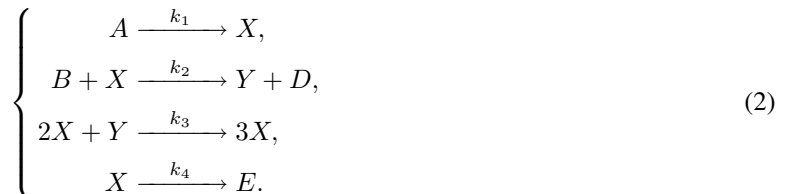
1. Voir par exemple : <http://www.youtube.com/watch?v=Ch93AKJm9os> ou encore <http://www.youtube.com/watch?v=8YIhTn-GY3c>

2. Rien n'empêche un constituant d'être à la fois un réactif et un produit, on parle alors de catalyseur.

suivantes

$$\begin{cases} \frac{d[A_1]}{dt} = -\alpha_1 k [A_1]^{\alpha_1} [A_2]^{\alpha_2}, \\ \frac{d[A_2]}{dt} = -\alpha_2 k [A_1]^{\alpha_1} [A_2]^{\alpha_2}, \\ \frac{d[B_1]}{dt} = \beta_1 k [A_1]^{\alpha_1} [A_2]^{\alpha_2}, \\ \frac{d[B_2]}{dt} = \beta_2 k [A_1]^{\alpha_1} [A_2]^{\alpha_2}. \end{cases}$$

2. Dans toute la suite on s'intéresse à une réaction chimique complexe composée de quatre réactions élémentaires simultanées, mettant en jeu 6 composants notés A, B, D, E, X et Y :



On suppose que les concentrations $[A]$ et $[B]$ sont maintenues constantes (par un apport extérieur de la part de l'expérimentateur par exemple). Ces deux concentrations sont donc maintenant des paramètres du modèle.

- Ecrire le système d'équations différentielles ordinaires régissant l'évolution des quatre concentrations restantes $[X], [Y], [D], [E]$.
- Expliquer pourquoi l'étude de ce système peut simplement se ramener à l'étude d'un système de deux équations à deux inconnues $[X]$ et $[Y]$. Ecrire le système correspondant.
- Le système obtenu dans la question précédente dépend de nombreux paramètres. Pour en simplifier l'étude qualitative, on va essayer de faire ressortir les paramètres les plus importants. Pour cela, on va effectuer des changements de variable affines. Plus précisément, on va chercher les fonctions $t \mapsto [X](t)$ et $t \mapsto [Y](t)$ sous la forme

$$[X](t) = \alpha x(\gamma t), \quad [Y](t) = \beta y(\gamma t),$$

où α, β, γ sont des paramètres réels et $s \mapsto x(s)$ et $s \mapsto y(s)$ sont les nouvelles fonctions inconnues.

Montrer que l'on peut choisir les nombres α, β et γ (en fonction des paramètres initiaux du modèle) pour que les fonctions x et y vérifient le système

$$\begin{cases} x' = a + x^2 y - (b+1)x \\ y' = bx - x^2 y, \end{cases} \quad (3)$$

où les seuls paramètres restant sont maintenant a et b (qu'on calculera explicitement en fonction des paramètres initiaux du modèle).

Ainsi, toute la dynamique de la réaction chimique est décrite par le système (3) qui ne comporte plus que 2 paramètres.

I.3 Etude mathématique du système réduit

Dans cette question on s'intéresse à l'étude mathématique du système (3) et en particulier au comportement qualitatif des solutions en fonction des valeurs des paramètres a et b .

On se donne dans toute la suite une donnée de Cauchy (x_0, y_0) au temps $t = 0$ pour ce système³. On supposera $x_0 \geq 0$ et $y_0 \geq 0$ (c'est raisonnable vu que ce sont des concentrations). On notera que les paramètres a et b obtenus précédemment sont aussi des nombres positifs.

- Montrer que le problème de Cauchy au temps 0 associé au problème (3) admet une unique solution maximale dont on notera J l'intervalle de définition et $J^+ = J \cap [0, +\infty[$.
- On va montrer dans cette question que x et y restent positives sur J^+ .
 - Montrer qu'il existe $\varepsilon > 0$ tel que $x(t) > 0$ pour tout $t \in]0, \varepsilon]$. On pourra séparer le cas $x_0 > 0$ du cas $x_0 = 0$.
 - On suppose que la fonction x prend des valeurs négatives ou nulles sur $J^+ \setminus \{0\}$. On introduit alors l'ensemble $S = \{t > 0, \text{ tel que } t \in J^+, \text{ et } x(t) = 0\}$.
 - Montrer que S est non vide.

3. Pour des raisons de commodité on note à nouveau t la variable de temps qui s'appelait s dans la partie précédente

- ii. Montrer que $t^* \stackrel{\text{def}}{=} \inf S > 0$.
 - iii. Montrer que $x(t^*) = 0$ et que $x'(t^*) > 0$.
 - iv. En déduire qu'il existe $0 < t_1 < t^*$ tel que $x(t_1) = 0$. Conclure.
- (c) On suppose $y_0 = 0$.
- i. Montrer que si $x_0 > 0$ alors il existe $\varepsilon' > 0$ tel que $y(t) > 0$ pour tout $t \in]0, \varepsilon']$.
 - ii. Montrer que si $x_0 = 0$, alors $y''(0) > 0$ et montrer à nouveau l'existence de $\varepsilon' > 0$ comme la question précédente.
- (d) On suppose que la fonction y prend des valeurs négatives ou nulles sur $J^+ \setminus \{0\}$. On introduit alors l'ensemble $S' = \{t > 0, \text{ tel que } t \in J^+, \text{ et } y(t) = 0\}$.
- i. Montrer que S' est non vide.
 - ii. Montrer que $t_* \stackrel{\text{def}}{=} \inf S' > 0$.
 - iii. Montrer que $y(t_*) = 0$ et que $y'(t_*) > 0$.
 - iv. En déduire qu'il existe $0 < t_2 < t^*$ tel que $y(t_2) = 0$. Conclure.

Dans toute la suite, on supposera que $x_0 > 0$ et $y_0 > 0$, ce qui n'enlève rien à la généralité de l'étude d'après ce qu'on vient de démontrer.

3. On veut établir dans cette question que x et y sont bornées sur J^+ . Pour cela, on pose $K_0 = \min\left(x_0, \frac{a}{b+1}\right)$, on choisit un $\delta > 0$ tel que $\delta < K_0$, puis on pose $K_1 = \max\left(y_0, \frac{b}{K_0 - \delta}, x_0 + y_0 - a\right)$, et on définit la région suivante du plan (x, y) :

$$R = \{(x, y), x \geq K_0 - \delta, 0 \leq y \leq K_1 + \delta, x + y \leq K_1 + \delta + a\}.$$

- (a) Dessiner l'ensemble R .
- (b) Montrer que $(x_0, y_0) \in \overset{\circ}{R}$.
- (c) On introduit l'ensemble $S = \{t \in J^+, \forall s \in [0, t[, (x(s), y(s)) \in \overset{\circ}{R}\}$ et on pose $t^* = \sup S$ et on veut montrer que $t^* = +\infty$. On suppose donc que $t^* < +\infty$.
 - i. Montrer que $t^* \in J^+$.
 - ii. Montrer que $(x(t^*), y(t^*)) \in \partial R$.
 - iii. Montrer qu'on ne peut pas avoir $y(t^*) = 0$.
 - iv. Montrer que si $x(t^*) = K_0 - \delta$, alors $x'(t^*) > 0$. Aboutir à une contradiction.
 - v. Montrer que si $x(t^*) > K_0 - \delta$ et $y(t^*) = K_1 + \delta$, alors on a $x(t^*)y(t^*) > b$ et donc $y'(t^*) < 0$. Aboutir à une contradiction.
 - vi. Montrer que si $y(t^*) < K_1 + \delta$ et $x(t^*) + y(t^*) = K_1 + \delta + a$, alors nécessairement on a $x(t^*) > a$ et donc $x'(t^*) + y'(t^*) < 0$. Aboutir encore à une contradiction.
 - vii. Conclure.

Les solutions du système (3) sont donc globales et bornées.

4. Montrer que le système (3) admet un unique point fixe (\bar{x}, \bar{y}) dans $(\mathbb{R}^+)^2$ que l'on calculera. Vérifier que, selon les valeurs des paramètres a et b , ce point fixe peut être asymptotiquement stable ou asymptotiquement instable. Dans le cas où le point d'équilibre est instable, il existe un théorème général (difficile !) qui nous assure l'existence d'une trajectoire périodique du système qui "attire" toutes les autres trajectoires, c'est-à-dire exactement que le système a un comportement cyclique en temps long. Nous allons vérifier ce comportement numériquement dans la suite.

I.4 Etude numérique du problème

Pour essayer de mieux comprendre ce système on va utiliser une résolution numérique. Pour cela, on fixe un temps final du calcul T . Pour un nombre M de pas de temps, on pose $\Delta t = T/M$ et $t^n = n\Delta t$ pour tout $n \in \{0, \dots, M\}$ puis on propose le schéma numérique suivant

$$\begin{cases} \frac{x^{n+1} - x^n}{\Delta t} = a + (x^n)^2 y^{n+1} - (b+1)x^{n+1}, \\ \frac{y^{n+1} - y^n}{\Delta t} = bx^{n+1} - (x^n)^2 y^{n+1}, \end{cases} \quad (4)$$

avec $x^0 = x_0$ et $y^0 = y_0$.

1. Montrer que le schéma (4) se met sous la forme

$$A_n \begin{pmatrix} x^{n+1} \\ y^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^n + \Delta t a \\ y^n \end{pmatrix},$$

où A_n est une matrice 2×2 qui dépend de n et qu'on donnera explicitement.

2. Montrer que, pour tout $n \geq 0$, la matrice A_n est inversible, en déduire que le schéma proposé est bien posé.
3. Montrer que, pour tout n , tous les coefficients de A_n^{-1} sont positifs, en déduire que le schéma ci-dessus produit des suites $(x^n)_n$ et $(y^n)_n$ positives.
4. Montrer que

$$\forall n \geq 0, \quad x^{n+1} + y^{n+1} \leq x^n + y^n + a\Delta t.$$

5. En déduire qu'il existe une constante $\tilde{C} > 0$ ne dépend que des données du problème telle que

$$\sup_{n \leq T/\Delta t} \left\| \begin{pmatrix} x^n \\ y^n \end{pmatrix} \right\| \leq \tilde{C}.$$

6. On définit les erreurs de consistance R_x^n et R_y^n suivantes

$$R_x^n = \frac{x(t^{n+1}) - x(t^n)}{\Delta t} - a - (x(t^n))^2 y(t^{n+1}) + (b+1)x(t^{n+1}),$$

$$R_y^n = \frac{y(t^{n+1}) - y(t^n)}{\Delta t} - bx(t^{n+1}) + (x(t^n))^2 y(t^{n+1}).$$

Montrer qu'il existe une constante $\bar{C} > 0$ ne dépendant que des données telle que

$$\sup_{n \leq T/\Delta t} (|R_x^n| + |R_y^n|) \leq \bar{C}\Delta t.$$

7. On définit les erreurs d'approximation $e_x^n = x(t^n) - x^n$ et $e_y^n = y(t^n) - y^n$. Démontrer qu'il existe $C_1 > 0$ ne dépendant que des données telle que :

$$|e_x^{n+1}| \leq |e_x^n| + C_1 \Delta t (|e_x^n| + |e_y^n|) + \Delta t C_1 (|R_x^n| + |R_y^n|),$$

$$|e_y^{n+1}| \leq |e_y^n| + C_1 \Delta t (|e_x^n| + |e_y^n|) + \Delta t C_1 (|R_x^n| + |R_y^n|).$$

8. En déduire l'estimation d'erreur suivante

$$\sup_{n \leq T/\Delta t} (|e_x^n| + |e_y^n|) \leq C_2 \Delta t.$$

9. Programmer en Scilab le schéma (4) et effectuer un certain nombre de simulations pour illustrer la dynamique **en temps long** de la réaction chimique. On pourra notamment s'intéresser au cas où $a = 1, b = 1$ et au cas où $a = 1, b = 3$. Décrire les comportements observés dans ces deux cas, pour différentes valeurs des données initiales x_0 et y_0 . Commenter l'influence du choix du pas de temps sur les résultats observés.
10. Qu'observe-t-on, dans certains cas, si on utilise la méthode d'Euler explicite traditionnelle à la place du schéma proposé ?

Partie II - Autour de l'équation de la chaleur

II.1 Préliminaires

Pour tout $k \geq 1$, on note $y_k(x) = \sqrt{2} \sin(k\pi x)$ et on rappelle (Cf. TD1 exo 5 et/ou le cours d'Analyse de Fourier et/ou le cours d'Analyse Fonctionnelle) que la famille $(y_k)_k$ forme une base Hilbertienne de $L^2(]0, 1[)$, c'est-à-dire que toute fonction $u \in L^2(]0, 1[)$ s'écrit de manière unique sous la forme

$$u = \sum_{k=1}^{\infty} u_k y_k, \quad \text{avec } u_k = (u, y_k)_{L^2} = \sqrt{2} \int_0^1 u(x) \sin(k\pi x) dx, \quad \forall k \geq 1. \quad (5)$$

1. Pour tout $k \geq 1$, on pose $\tilde{y}_k(x) = \sqrt{2} \cos(k\pi x)$. Montrer que la famille $(\tilde{y}_k)_k$ est une famille orthonormée dans $L^2(]0, 1[)$. En déduire que pour toute fonction $f \in L^2(]0, 1[)$, si on pose $\tilde{f}_k = \sqrt{2} \int_0^1 f(x) \cos(k\pi x) dx$, alors la série de terme général $|\tilde{f}_k|^2$ est convergente et que

$$\sum_{k=1}^{\infty} |\tilde{f}_k|^2 \leq \|f\|_{L^2}^2.$$

2. Montrer que pour tout $k \geq 1$, $y_k \in H_0^1(]0, 1[)$.
3. Soit $u \in L^2(]0, 1[)$ que l'on décompose sous la forme (5). Montrer que

$$u \in H_0^1(]0, 1[) \iff \sum_{k \geq 1} (k\pi)^2 u_k^2 < +\infty.$$

Indication : Dans un sens, on pourra effectuer une intégration par parties dans la définition de u_k . Dans l'autre sens, on montrera que la suite des sommes partielles $\sum_{k=1}^N u_k y_k$ est de Cauchy dans $H_0^1(]0, 1[)$.

II.2 Présentation et premiers résultats de base

On se place sur le domaine $\Omega =]0, 1[$ et sur l'intervalle de temps $[0, T]$. On s'intéresse dans toute la suite à l'étude de l'équation de la chaleur suivante

$$\begin{cases} \partial_t u - \lambda \partial_x^2 u = 0, & \text{dans }]0, T[\times \Omega, \\ u(t, x) = 0, & \text{sur }]0, T[\times \partial\Omega, \\ u(0, x) = u_0(x), & \text{dans } \Omega, \end{cases} \quad (6)$$

où $u_0 \in L^2(\Omega)$ est une donnée initiale fixée et $\lambda > 0$ est un paramètre.

Cette équation modélise l'évolution de la température dans un matériau conducteur isolé (ici dans ce cas simple : une tige de taille 1) dont les deux extrémités sont maintenues à une température constante (nulle ici pour simplifier). Le paramètre λ est appelé *conductivité thermique* du matériau⁴. Dans toute la suite, on décompose la donnée initiale u_0 sous la forme (5).

1. Pour tout $t \geq 0$, on pose

$$u(t, x) = \sum_{k \geq 1}^{\infty} u_k e^{-\lambda(k\pi)^2 t} y_k(x).$$

Montrer que pour tout $t \geq 0$, la formule ci-dessus définit bien un élément $x \mapsto u(t, x)$ de $L^2(\Omega)$. Montrer ensuite que $t \mapsto u(t, \cdot)$ est une application continue de $[0, +\infty[$ dans $L^2(\Omega)$ qui vérifie $u(0, \cdot) = u_0$.

2. Montrer que pour tout $t > 0$, $x \mapsto u(t, x)$ est dans $H_0^1(\Omega)$.
3. En supposant que toutes les interversions de dérivation et de sommation sont justifiées, vérifier que la fonction u ainsi définie, est bien solution de l'équation de la chaleur.

On peut démontrer que cette solution est unique et que si u_0 est régulière, u est également régulière.

II.3 Approximation numérique

On s'intéresse ici à l'approximation numérique du problème (6). On se donne un maillage uniforme $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_N < x_{N+1} = 1$, $x_i = i\Delta x$ de l'intervalle Ω et un pas de temps $\Delta t = T/M$. On introduit la matrice du Laplacien (de taille $N \times N$) étudiée en cours

$$A = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

On notera (\cdot, \cdot) et $\|\cdot\|$ le produit scalaire et la norme sur \mathbb{R}^N hérités de ceux de $L^2(\Omega)$, c'est-à-dire définis par

$$(U, V) = \sum_{i=1}^N \Delta x u_i v_i, \quad \|U\| = \left(\sum_{i=1}^N \Delta x |u_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

On définit une approximation de la donnée initiale associée à ce maillage par

$$U^0 = (u_0(x_i))_{1 \leq i \leq N}.$$

On se donne un paramètre $\theta \in [0, 1]$ et on considère la suite $(U^n)_n$ de vecteurs de \mathbb{R}^N définie par :

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} + \lambda A(\theta U^{n+1} + (1 - \theta)U^n) = 0, \quad \forall 0 \leq n \leq N - 1. \quad (7)$$

⁴ En unités S.I. la conductivité du bois est de l'ordre de 0.2, celle de la fonte de l'ordre de 100 : c'est sans doute pour cette raison qu'on fabrique des marmites en fonte et pas en bois ...

- Démontrer que la matrice $\text{Id} + \Delta t \theta \lambda A$ est symétrique définie positive. En déduire que la suite $(U^n)_n$ est bien définie.
- Démontrer la relation suivante :

$$\frac{1}{2} \|U^{n+1}\|^2 - \frac{1}{2} \|U^n\|^2 + \left(\theta - \frac{1}{2}\right) \|U^{n+1} - U^n\|^2 + \Delta t \lambda \left(A(\theta U^{n+1} + (1-\theta)U^n), \theta U^{n+1} + (1-\theta)U^n \right) = 0, \quad \forall n \geq 0.$$

- En déduire que si $\theta \geq \frac{1}{2}$, on a la propriété de stabilité suivante pour toute valeur du pas de temps $\Delta t > 0$:

$$\|U^n\| \leq \|U^0\|, \quad \forall 0 \leq n \leq M. \quad (8)$$

- On suppose maintenant que $\theta \in [0, \frac{1}{2}[$. On note $\rho(A)$ le rayon spectral de A (c'est-à-dire sa plus grande valeur propre, car A est sym. définie positive).

(a) Démontrer que

$$\|AV\|^2 \leq \rho(A)(AV, V), \quad \forall V \in \mathbb{R}^N.$$

(b) En déduire que la propriété de stabilité (8) est encore vérifiée sous la condition

$$\Delta t \leq \frac{1}{(1/2 - \theta)\lambda\rho(A)}. \quad (9)$$

- Démontrer que

$$(AU, U) \leq \frac{4}{\Delta x^2} \|U\|^2, \quad \forall U \in \mathbb{R}^N,$$

et en déduire que

$$\rho(A) \leq \frac{4}{\Delta x^2}.$$

En déduire, à partir de (9), une condition de stabilité suffisante de stabilité liant Δt et Δx et λ . Commentez la condition ainsi obtenue.

- Définir l'erreur de consistance R_i^n associé à ce schéma et à la solution u de l'équation de la chaleur (6). En supposant u aussi régulière que nécessaire, démontrer qu'il existe une constante $C > 0$ indépendante de Δt et Δx telle que

$$\sup_{n \leq T/\Delta t} \|R^n\| \leq C(\Delta t + \Delta x^2).$$

– Si $\theta \neq 1/2$, alors

$$\sup_{n \leq T/\Delta t} \|R^n\| \leq C(\Delta t^2 + \Delta x^2).$$

Qu'en concluez-vous sur le choix du paramètre θ ?

- Programmez en Scilab le schéma (7).

(a) En prenant des vecteurs initiaux U^0 aléatoires, illustrer les propriétés de stabilité et d'instabilité obtenues ci-dessus en fonction de Δt , Δx , θ et λ . Dans les cas où le schéma est stable, qu'observez-vous sur la solution obtenue ?

(b) Illustrer ensuite le comportement en temps de la solution de l'équation pour $T = 1$, $\lambda = 0.01$ et pour différentes données initiales, par exemple $u_0(x) = \sin(\pi x^2)^3$ ou $u_0(x) = \mathbf{1}_{[0.5, 0.8]}(x)$.

(c) Choisir une donnée initiale u_0 (non identiquement nulle ...) pour laquelle on sait calculer la solution exacte de l'équation de la chaleur (voir la première partie) puis afficher l'erreur d'approximation entre la solution exacte à l'instant final T et la solution approchée calculée par le schéma. En faisant varier Δt et Δx , vérifier que l'on obtient bien le comportement attendu.