M1 - Modélisation Séance du 27/02/17

Équation de diffusion

<u>Objectifs</u> : * étudier à l'aide d'outils simples le problème de diffusion sur $\mathbb{R}$, puis sur un intervalle borné ouvert avec différentes conditions de bord
* implémentation numérique et étude des schémas associés
* introduction aux équations de réaction-diffusion

I] Modélisation :

1) Via des considérations de flux

On a vu la semaine dernière que la <u>loi de Fick</u> liant le flux de particules à travers une surface avec la concentration de particules sur cette surface.
→ adaptée à la description de phénomènes physiques : dilution de la fumée dans l'air, diffusion de la chaleur

2) Via des considérations microscopiques

⚠ les calculs suivants sont formels et il faut beaucoup plus travailler pour les rendre rigoureux

Q : sachant qu'un individu se trouve en $x_0 = 0$ au temps $t_0 = 0$, quelle est la probabilité $p(x,t)$ de le trouver en position $x \in \mathbb{R}$ au temps $t > 0$?
si un groupe de N individus est lâché en x_0 au temps t_0, quelle sera la distribution des individus ?

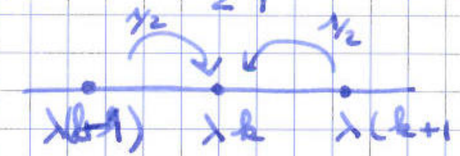
- En fait ces deux questions sont liées puisque si on considère le processus $X_k(t,x)$ qui vaut 1 si l'individu k est (t,x) et 0 sinon alors

$$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} X_k(t,x) \xrightarrow[N \to +\infty]{\text{loi}} p(t,x)$$

- Marches aléatoires : cas discret (temps et espace)

on note $p(t, \underbrace{\lambda k}_{\in \mathbb{Z}})$: proba d'être en λk

$$p(t+\tau, \lambda k) = \frac{1}{2} p(t, \lambda(k-1)) + \frac{1}{2} p(t, \lambda(k+1))$$



on introduit $q(t,x)$ densité de probabilité de trouver un individu en (t,x) qui satisfait

$$q(t+\tau, x) = \frac{1}{2} q(t, x-\lambda) + \frac{1}{2} q(t, x+\lambda)$$

$$\shortparallel$$

$$q(t,x) + \tau \frac{\partial q}{\partial t}(t,x) + o(\tau^2)$$

$$q(t, x\pm\lambda) = q(t,x) \pm \frac{\partial}{\partial x} q(t,x)\lambda + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} q(t,x)\lambda^2 + O(\lambda^3)$$

On obtient donc

$$\frac{\partial}{\partial t} q(t,x) + O(\tau) = \frac{\lambda^2}{2\tau} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2}(t,x) + O\left(\frac{\lambda^3}{\tau}\right)$$

$D := \lim\limits_{\substack{\lambda \to 0 \\ \tau \to 0}} \frac{\lambda^2}{2\tau}$ on obtient

$$\frac{\partial}{\partial t} q(t,x) = \underbrace{D}_{\text{coefficient de diffusion}} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2}(t,x) \quad t>0$$

II] Solution de l'équation de la diffusion sur $\mathbb{R}$

<u>Objectif</u> : résoudre $\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D \Delta u , & t>0, \ x \in \mathbb{R} \\ u(x,0) = u_0(x) & x \in \mathbb{R} \end{cases}$

en fonction de la condition initiale

<u>Remarque</u> : changement d'échelle en temps, on peut toujours supposer $D = 1$

1) Solution fondamentale

On commence par voir que si $u(x,t)$ est solution alors $u(\sqrt{\lambda}\, x, \lambda t)$, $\lambda>0$, est aussi solution de $\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u$.

On va chercher une solution symétrique invariante par le changement d'échelle suivant

$$u(x,t) = \lambda^{\alpha} u(\sqrt{\lambda}\, x, \lambda t)$$

en prenant $\lambda = \frac{1}{t}$ on obtient

$$u(x,t) = t^{-\alpha} u\left(\frac{x}{\sqrt{t}}, 1\right)$$

et on pose $v(s) = u(s,1)$ et donc

$$u(x,t) = t^{-\alpha} v\left(\frac{x}{\sqrt{t}}\right)$$

on obtient

$$-\alpha t^{-\alpha-1} v - \frac{1}{2} t^{-\alpha-3/2} x\, v' = t^{-\alpha-1} v''$$

avec $y = \frac{x}{\sqrt{t}}$ on a

$$\alpha v + \frac{1}{2} y v' + v'' = 0$$

en choisissant $\alpha = \frac{1}{2}$ on voit que l'on a

$$\frac{(yv)'}{2} + (v')' = 0$$

en intégrant $\frac{y}{2} v + v' = K$

mais en $y = 0$ on a $v'(0) = 0$ et donc $K = 0$

par conséquent $v(y) = b\, e^{-y^2/4}$

et donc $u(x,t) = b\, t^{-1/2} e^{-x^2/4t}$, $b \in \mathbb{R}$

est solution de $\partial_t u = \Delta u$

La <u>solution fondamentale</u> est la fonction

$$\boxed{\phi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} e^{-x^2/4t}, \quad t>0,\ x \in \mathbb{R}}$$

Lemme : $\forall t > 0, \int_{\mathbb{R}} \phi(x,t)\, dx = 1$

preuve : $\int e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$.

2) Problème de Cauchy

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} u = \Delta u \ , \ t > 0, \ x \in \mathbb{R} \\ u(x,0) = u_0(x) \ , \ x \in \mathbb{R} \end{cases}$$

Remarque : il n'y a pas forcément unicité !

c.ex : prendre $u_0(x) = 0$ sur $\mathbb{R}$

et

$$u(t,x) = \begin{cases} 0 & t \leq 0 \quad x \in \mathbb{R}, \\ \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{f^{(n)}(t)}{(2n)!} x^{2n} , & t > 0, \ x \in \mathbb{R} \end{cases}$$

où $f(t) = e^{-1/t^2}$ est solution

(tout comme $u(t,x) = 0 \ \forall t > 0$)

Thm : Soit $u_0 \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}) \cap L^\infty(\mathbb{R})$, on pose

$$u(x,t) = \phi_t * u_0(x)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{(x-y)^2}{4t}} u_0(y)\, dy$$

alors :

(I) $u \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R} \times]0; +\infty[)$

(II) u vérifie $\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = 0 \ , \ t > 0 \ , \ x \in \mathbb{R}$

(III) $\forall x_0 \in \mathbb{R}, \lim_{t \to 0} u(x_0, t) = u_0(x_0)$

(IV) $\forall t > 0 \int_{\mathbb{R}} u(x,t)\, dx = \int_{\mathbb{R}} u_0(x)\, dx$

preuve : (i) $(x,t) \longmapsto \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} e^{-x^2/4t}$ indéfiniment différentiable, avec dérivées unif. bornées sur $\mathbb{R} \times]\delta ; +\infty[$ pour $\delta > 0$.

(ii) calcul direct

(iii) $x_0 \in \mathbb{R}$, $\varepsilon > 0$ et $\delta > 0$ tq $|y - x_0| < \delta$
$\Rightarrow |u_0(y) - u_0(x_0)| < \varepsilon$

$$\left| u(x_0,t) - u_0(x_0) \right| = \left| \int_{\mathbb{R}} \phi(x_0 - y, t)\left(u_0(y) - u_0(x_0)\right) dy \right|$$

$$\leq \underbrace{\left| \int_{|x_0-y|<\delta} \right|}_{\leq \varepsilon \text{ par hyp}} + \underbrace{\left| \int_{|x_0-y|\geq\delta} \right|}_{\xrightarrow[t \to 0]{} 0}$$

donc pour t petit on a

$$| u(x_0,t) - u_0(x_0) | < 2\varepsilon$$

(iv) Fubini et $\int_{\mathbb{R}} \phi(x,t)\, dx = 1$

Remarques : * conservation de la masse
* propagation à vitesse infinie du support
* effet régularisant

III] Problème à valeur initiale dans un domaine borné

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \Delta u, \quad t > 0 \text{ et } x \in (0,1) \\ u(x,0) = u_0(x) \quad x \in (0,1) \\ + \text{ conditions de bord} \end{cases}$$

1) Conditions de bord

* condition de Dirichlet

$$u(0,t) = u(1,t) = 0 \quad \text{pour tout } t > 0$$

* condition de Neumann

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0,t) = \frac{\partial u}{\partial x}(1,t) = 0 \quad \text{pour tout } t > 0$$

2) Remarque sur l'unicité des solutions.

Supposons que l'on a 2 solutions alors

$v(x,t) = u_1(x,t) - u_2(x,t)$

$v(x,0) = u_0(x) - u_0(x) = 0$

et v satisfait les mêmes conditions initiales

enfin, posons

$$Q(t) = \frac{1}{2}\int_0^1 v(x,t)^2\,dx$$

$$\begin{aligned} Q'(t) &= \int_0^1 v(x,t)\,\partial_t v(x,t)\,dx \\ &= \int_0^1 v(x,t)\,\partial_x^2 v(x,t)\,dx \\ &= \underbrace{\Big[v(x,t)\,\partial_x v(x,t) \Big]_0^1}_{=0} - \underbrace{\int_0^1 \big(\partial_x v(x,t)\big)^2 dx}_{\leq 0} \end{aligned}$$

et donc $0 \leq Q(t) \leq Q(0) = 0 \quad \forall t > 0$

3) Existence de solutions (Dirichlet)

méthode : théorie de Fourier en remarquant que

- $e^{-k^2\pi^2 t} \sin(k\pi x)$ est solution de

$$\partial_t u = \Delta u$$
$$u(0,t) = u(1,t) = 0$$

- $(\sqrt{2}\sin(k\pi \cdot))_{k \in \mathbb{N}^*}$ base Hilbertienne sur $L^2(]0;1[)$

- si u est solution de l'EDP et que
$$\begin{cases} \partial_t u \in \mathcal{C}^0([0,1] \times]0,+\infty[) \\ \partial^2_{xx} u \in \mathcal{C}^0([0,1] \times]0,+\infty[) \end{cases}$$

alors u, $\partial_t u$ et $\partial^2_{xx} u$ sont développables sur la base Hilbertienne avec

$$u(x,t) = \sqrt{2} \sum_{k \in \mathbb{N}^*} \widehat{u(\cdot,t)}(k) \sin(k\pi x)$$

on note $\widehat{u(\cdot,t)}(k) = \hat{u}(k)(t)$

et on montre (exo) que

$$\hat{u}(k)'(t) + k^2\pi^2 \hat{u}(k)(t) = 0 \quad \forall k \in \mathbb{N}^*, \forall t$$

et donc $\hat{u}(k)(t) = \hat{u}(k)(0)\, e^{-k^2\pi^2 t}$

et on peut montrer que si $u_0 \in L^2(]0;1[)$ alors
$$\hat{u}(k)(0) = \hat{u}_0(k)$$

Thm : Soit $u_0 \in L^2(]0;1[)$ et $\left(\hat{u}_0(k)\right)_{k\in\mathbb{N}^*}$ sa suite de coeff de Fourier alors il existe une unique solution $u : (x,t) \in [0,1] \times]0,+\infty[\mapsto u(x,t)$ dérivable en t et 2 fois dérivable en x sur $[0,1] \times]0;+\infty[$ et $u(\cdot,t) \xrightarrow[t\to 0]{L^2} u_0$

avec $$u(x,t) = \sqrt{2} \sum_{k=1}^{+\infty} \hat{u}_0(k) e^{-k^2\pi^2 t} \sin(\pi k x)$$

Rq : * on a aussi que $\|u(\cdot,t)\|_{L^2(]0;1[)} \leq \|u_0\|_{L^2(]0;1[)} e^{-\pi^2 t}$

* par comparaison, pour $u_0 \in \mathcal{C} \cap L^\infty$ et ≥ 0 on a $$0 \leq u(x,t) \leq \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \int_0^1 e^{-\frac{(x-y)^2}{4t}} u_0(y)\,dy$$

* si $u_0 \in L^\infty(]0,1[)$ alors $$\|u(\cdot,t)\|_{L^\infty} \leq \|u_0\|_{L^\infty} \quad \forall t>0$$

* le problème est mal posé pour $t<0$

IV] Résolution approchée par méthode des différences finies

On note N le nombre de pas de temps entre 0 et T

$t_n = n\Delta T$ pour $n \in \{0, \dots, N\}$

$x_j = j\,\Delta x$ pour $j \in \{0, \dots, J+1\}$

on a $u(x_j, t_n)$ approchée par u_j^n où

$$u_0^n = u_{J+1}^n = 0 \quad \forall n \in [\![0, N]\!]$$

$$u_j^0 = u_0(x_j) \quad \forall j$$

on approche $\partial_{xx}^2 u(x_j, t_n) \simeq \dfrac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2}$

et $\partial_t u(x_j, t_n) \simeq \dfrac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}$ (explicite)

$\simeq \dfrac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta t}$ (implicite)

Rq : . schéma explicite convergent sous condition de CFL

. implicite inconditionnellement convergent

1) Erreur de consistance

$$R_j(t_n, u, \Delta t, \Delta x) = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}$$

où $u_j^n = u(x_j, t_n)$ et u solution du pbm

Lemme : si $u \in \mathcal{C}_b^{4,2}([0,1] \times [0,T]$ alors il existe $C > 0$ t.q

$$\max_{n \in \{0,\dots,N-1\}} \sup_{j \in \{1,\dots,J\}} |R_j(t_n, u, \Delta t, \Delta x| \leq C\left(\Delta t + \Delta x^2\right)$$

On note $e_j^n(u) = u_j^n - u(x_j, t_n)$ l'erreur commise avec le schéma alors on a si $\boxed{\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}}$

$$\| e^n(u) \|_\infty \leq C(\Delta t + \Delta x^2) \quad \forall n \in \{0,\dots,N\}$$

Il suffit de voir que :

$$e_j^{n+1}(u) = e_j^n(u) + \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\left(e_{j+1}^n(u) - 2e_j^n(u) + e_{j-1}^n\right) - \Delta t \, R_j(t_n, u, \Delta t, \Delta x)$$

$$= \left(1 - 2\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right) e_j^n(u) + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} e_{j+1}^n(u) + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} e_{j-1}^n(u) - \Delta t \, R_j(t_n, u, \Delta t, \Delta x)$$

et avec $0 \leq 2\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq 1$

on obtient $|e_j^{n+1}(u)| \leq \|e^n(u)\|_\infty + \Delta t \, \|R(t_n, u, \Delta t, \Delta x)\|_\infty$

et donc $\|e^{n+1}(u)\|_\infty \leq CT(\Delta T + \Delta x^2)$

<u>Remarque</u> : pour l'équation $\partial_t u = \kappa \Delta u$

la condition de CFL devient

$$\kappa \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$$