

Équations discrètes de la chaleur et de Poisson avec les graphes

Sophocrates-XL

Récapitulation de l'équation de la chaleur classique

- On se souviendrait que l'équation continue de la chaleur est

$$\phi_t = -\kappa \nabla^2 \phi + f,$$

où $\phi(x, y, t)$ décrit la distribution d'un potentiel à travers l'espace bidimensionnel et le temps, κ décrit la diffusivité, et $f(x, y)$ décrit le taux de générer des potentiels nouveaux.

- On se souviendrait aussi que, chez les conditions de Dirichlet et Neumann, on obtiendrait toujours une solution unique à l'état stationnaire satisfaisant l'équation de Poisson

$$\kappa \nabla^2 \phi = f.$$

- Malgré de l'application des séries de Fourier et des fonctions de Green, résoudre ces équations en conditions compliqués ne admettrait pas des formes simples.

L'équation discrète de la chaleur à travers un graphe

- En général, résoudre numériquement l'équation de la chaleur nécessiterait l'estimation de l'opérateur de Laplace en espaces discrets. Si le système équilibre très lentement, on n'aurait pas des algorithmes efficaces pour arriver à l'état stationnaire.
- Toutefois, reformuler l'équation en langage des graphes pourrait fournir une description assez simple à permettre des solutions analytiques.
- Soit A la matrice d'adjacence d'un graphe simple non orienté, auquel l'équation de la chaleur agirait. Soit D la matrice des degrés du même graphe. On obtiendrait donc la matrice de Laplace

$$L = D - A.$$

- Toutes les discussions suivantes concerneraient les graphes simples, non orientés et connectés.

L'équation discrète de la chaleur à travers un graphe

- L'équation de la chaleur formulée de matrice de Laplace suit la forme reconnue
$$\dot{\phi} = -\kappa L\phi,$$
qui est ici homogène. ϕ devient ici un vecteur des potentiels associés par les sommets du graphe.
- On remarquerait que cette équation en a présupposé absolument la condition de Neumann. Ainsi, admettre la fonction f ferait accumuler les potentiels sans achever un état stationnaire, car les potentiels générés n'ont aucunes chances à échapper.
- Pour inclure l'effet de f , il faudrait ajouter des conditions de Dirichlet qui s'intégrerait dans le langage des graphes.

L'équation discrète de la chaleur à travers un graphe

- En ce cas, on peut contempler une matrice diagonale B avec $B_{ii} \geq 0$ et au moins un $B_{ii} > 0$, qui quantifierait sur chaque sommet son contact avec l'environnement au comparaison des contacts avec les sommets voisins. On fixerait ici que l'environnement en a toujours un potentiel de zéro, qui décrirait ainsi une condition de Dirichlet.
- Donc la nouvelle équation se reformulerait sous la forme
$$\dot{\phi} = -\kappa(L + B)\phi + f,$$
où f devient aussi une fonction vectorielle décrivant la génération de potentiel à chaque sommet.
- La forme générique de cette équation signifie qu'on peut l'appliquer librement aux graphes de plusieurs topologies et d'interactions arbitraires avec l'environnement.

L'équation discrète de la chaleur à travers un graphe

- Au contraire de l'équation classique de la chaleur non homogène, on résoudrait aisément cette nouvelle équation. On aurait d'abord la solution générale du cas homogène

$$\phi_1 = e^{-\kappa t(L+B)} a$$

avec un vecteur a constant et arbitraire.

- Si f ne change pas en t , on pourrait vérifier qu'une solution particulière du système non homogène est simplement

$$\phi_2 = \frac{1}{\kappa} (L + B)^{-1} f.$$

- Ainsi, le système non homogène admettrait la solution générale

$$\phi = \phi_1 + \phi_2 = e^{-\kappa t(L+B)} a + \frac{1}{\kappa} (L + B)^{-1} f.$$

L'équation discrète de la chaleur à travers un graphe

- Substituer la condition initiale ϕ_0 produit la solution spécifique

$$\phi = e^{-\kappa t(L+B)} \left[\phi_0 - \frac{1}{\kappa} (L+B)^{-1} f \right] + \frac{1}{\kappa} (L+B)^{-1} f.$$

- Réexprimer la solution en valeurs et vecteurs propres de $-(L+B)$ produit

$$\phi = \sum_i c_i e^{\lambda_i t} v_i + \frac{1}{\kappa} (L+B)^{-1} f, \phi_0 = \sum_i c_i v_i + \frac{1}{\kappa} (L+B)^{-1} f$$

où chaque λ_i et v_i est la valeur et le vecteur propre.

- Évidemment, concernant l'évolution du système, on obtiendrait un état stationnaire si $\max_i \{\lambda_i\} < 0$, où toutes les parties exponentielles diminueraient en t . En ce cas, l'état stationnaire deviendrait

$$\phi_\infty = \frac{1}{\kappa} (L+B)^{-1} f.$$

Conditions suffisantes d'avoir l'état stationnaire

- Parce que la matrice $-(L + B)$ est réelle et symétrique, il est préétabli que $\max_i \{\lambda_i\}$ se résoudrait comme

$$\begin{aligned}\max_i \{\lambda_i\} &= \max\{-x^T(L + B)x : x^T x = 1\} \\ &= \max\{-x^T Lx - x^T Bx : x^T x = 1\} \leq 0,\end{aligned}$$

car $x^T Lx \geq 0$ par la propriété semi définies positive de L , et $x^T Bx \geq 0$ selon la définition de B .

- Pour démontrer $\max_i \{\lambda_i\} < 0$, on remarquerait que $x^T Lx$ est une forme quadratique, où $x^T Lx = \sum_{A_{ij}=1} (x_i - x_j)^2 \geq 0$. Dans un graphe connecté, $x^T Lx = 0$ si et seulement si $x_i = x_j, \forall i, j$. Néanmoins, si $x^T x = 1, x^T Lx = 0$ nécessiterait $x^T Bx > 0$, car il y'a au moins un $B_{ii} > 0$. Ainsi, on aurait $-x^T Lx - x^T Bx < 0, x^T x = 1 \Rightarrow \max_i \{\lambda_i\} < 0$, c'est-a-dire on aurait toujours un état stationnaire.

Sommaire des propriétés comparatives aux cas continus

- Au sommaire, le système se décrirait comme

$$\begin{aligned}\dot{\phi} &= -\kappa(L + B)\phi + f, \\ \kappa(L + B)\phi_{\infty} &= f,\end{aligned}$$

qui prendraient des formes semblables aux équations classiques de la chaleur et de Poisson. Néanmoins, ils ne peuvent pas équivaloir aux formes génériques des équations discrétisées de la chaleur et de Poisson, car les coefficients de f sont $(L + B)$ au lieu d'un opérateur discret de Laplace.

- De plus, on ne parlerait plus des conditions aux limites. Plutôt, L en a déjà déterminé les sommets auxquels les potentiels se diffuseraient, qui ressemblerait donc la condition de Neumann aux dérivées de zéros. En façon similaire, B en a déjà déterminé les échanges avec l'environnement, qui ressemblerait la condition de Dirichlet aux potentiels de zéros.
- Malgré de leurs insuffisances théoriques, ces équations impropres offriraient des solutions assez simples de s'appliquer à beaucoup de contextes réels.

Application à la distribution virale dans un bâtiment

- La prévalence de covid a nous posé des risques de transmission virale dans les bâtiments publics. Évidemment, on anticiperait que telle distribution virale dans un bâtiment dépend à ses propriétés architecturales.
- Pour modeler cette distribution, l'équation de la chaleur classique et l'équation de Poisson fournissent les descriptions théoriques à la diffusion virale. Néanmoins, résoudre les équations continues par les séries de Fourier ou les fonctions de Green ne simplifierait pas les travaux de les calculer.
- Autrement, car un plan architectural est fréquemment assez régulier et discret, on pourrait le partitionner en cellules et les transformer en un graphe non orienté. On allouerait puis à chaque cellule un taux de génération virale, auquel on obtiendrait une solution analytique, ou simulerait le système à travers le temps.

Application à la distribution virale dans un bâtiment

Étapes algorithmiques de l'application

- I. Obtenez le plan du bâtiment, et partitionnez-le en cellules rectangulaires.
- II. Indiquez le type de chaque cellule. Une cellule est soit le sol, soit le mur, soit un contact à l'environnement extérieur.
- III. Traitez chaque sol comme un sommet de graphe à construire les matrices d'adjacence A et des degrés D .
- IV. De chaque sol, comptez ses contacts horizontaux et verticaux avec l'environnement à déterminer la matrice B .
- V. De chaque sol, fixez un taux f de génération virale.
- VI. Résolvez ce système selon les équations discrètes de la chaleur et de Poisson.

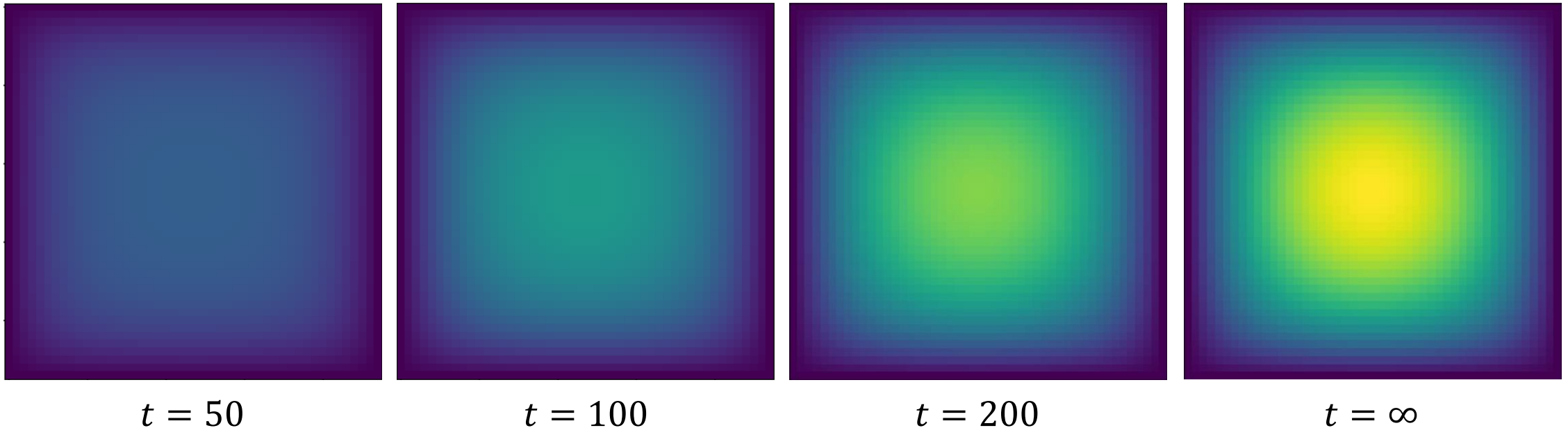
Application à la distribution virale dans un bâtiment

Détails informatiques de l'algorithme

- Si le bâtiment n'a pas une géométrie régulière, on pourrait l'assujettir dans un environnement rectangulaire.
- Cette pratique simplifierait la création des matrices associées, mais gonflerait aussi leurs ampleurs, et ferait coûteux les calculs éventuels des équations. Néanmoins, si il y'a des algorithmes à optimiser les matrices creuses, on pourrait réduire ce coût informatique des calculs.
- Si on s'intéresse seulement à l'état stationnaire, les magnitudes de κ et de f n'importeraient pas. Dans ce cas, on allouerait simplement $\kappa = 1$, et se concentrerait seulement aux rapports de f parmi les sommets.

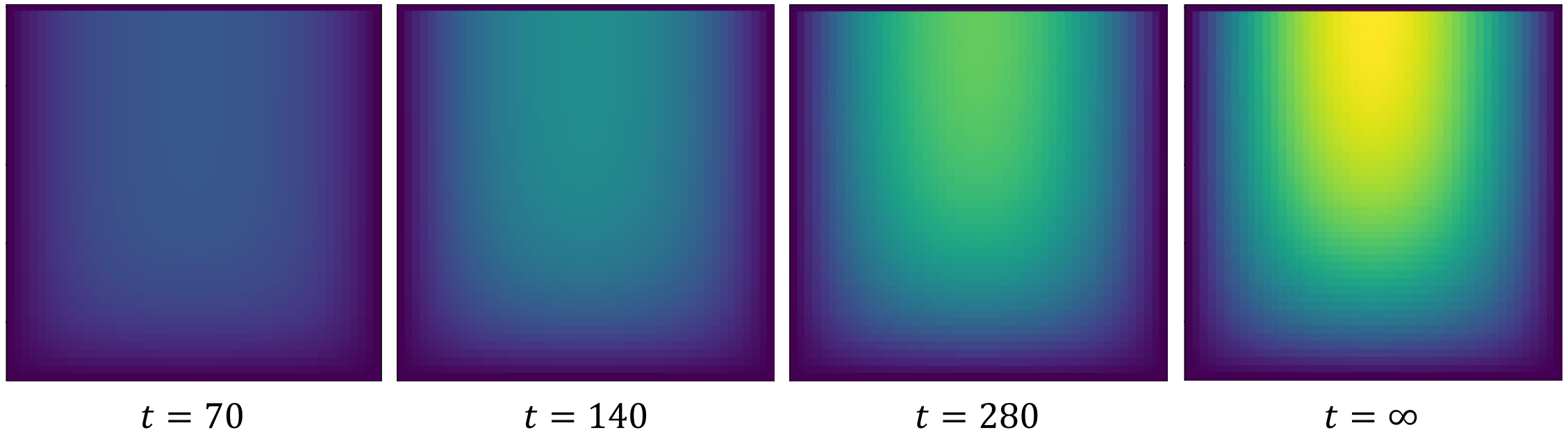
Vérification du modèle avec l'espace rectangulaire

- Avant d'appliquer le modèle discret, il faut le vérifier aux systèmes bien connues avec les équations continues de la chaleur et de Poisson, en ce cas une espace rectangulaire avec $\kappa = 1$, $f = 1$ et $\phi_0 = 0$, aux limites de Dirichlet avec potentiel de zéro. On pourrait vérifier que les nouvelles équations reproduiraient les résultats dans le cas continu autant au regard de l'évolution temporelle qu'au regard de l'état stationnaire, comme les figures suivantes.



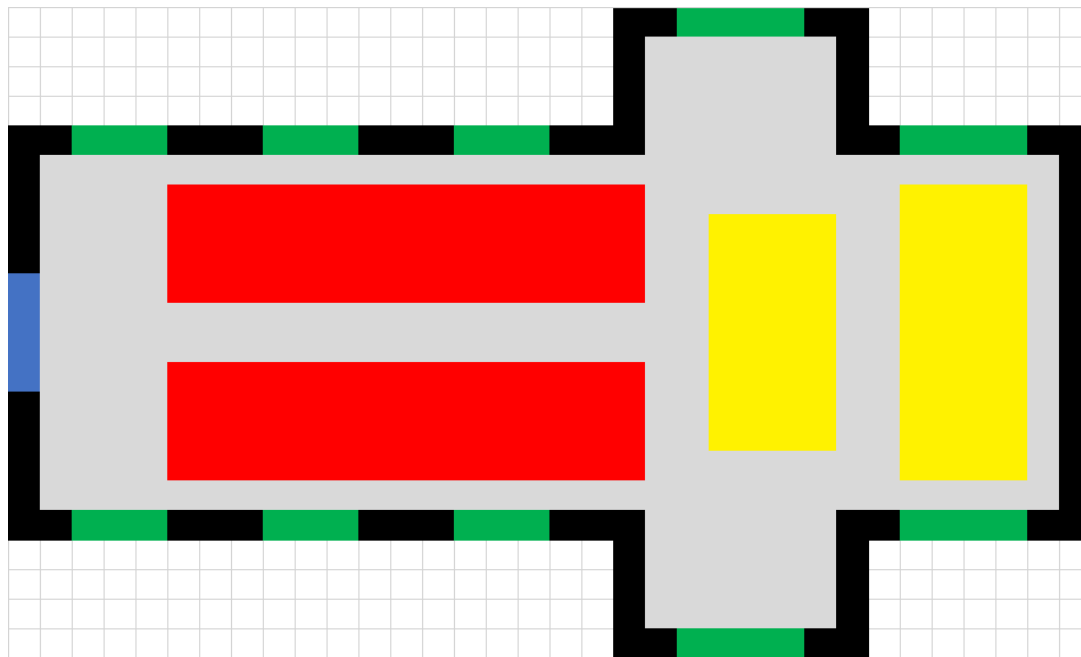
Vérification du modèle avec l'espace rectangulaire

- Ensuite, on peut faire la vérification au cas qui comprend autant des conditions de Dirichlet que des conditions de Neumann. En ce cas, la diffusion virale devient obstruée d'un mur impassable en haut de l'espace rectangulaire. On vérifierait aussi que l'évolution du système et l'état stationnaire approximerait bien les résultats continus.



Solution d'une église hypothétique

- Considérons un église hypothétique d'un plan classique. Dans les calculs, les fenêtres se traiteraient comme l'environnement, et l'entrée est fermée à travers une activité. On aurait $f = 3$ aux sols plus peuplés des audiences, $f = 1$ aux sols moins peuplés des prêtres, et $f = 0$ autrement.



Vert: Fenêtre

Noir: Mur

Gris: Sol non peuplé

Rouge: Sol plus peuplé, $f = 3$

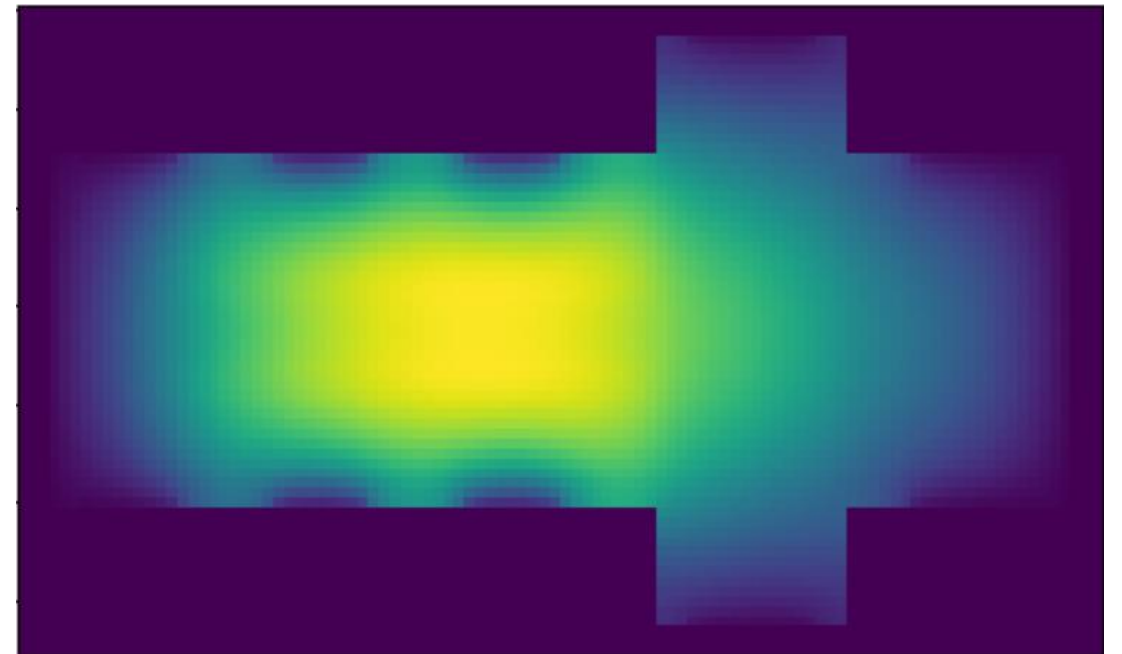
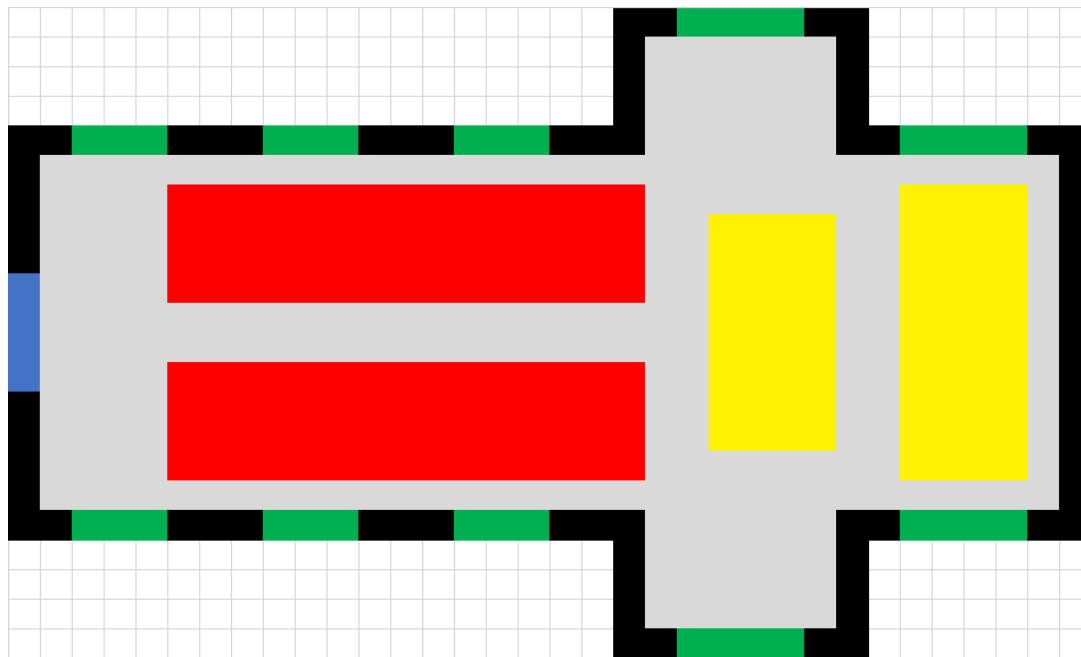
Jaune: Sol moins peuplé, $f = 1$

Bleu: Entrée fermée

Blanc: Environnement

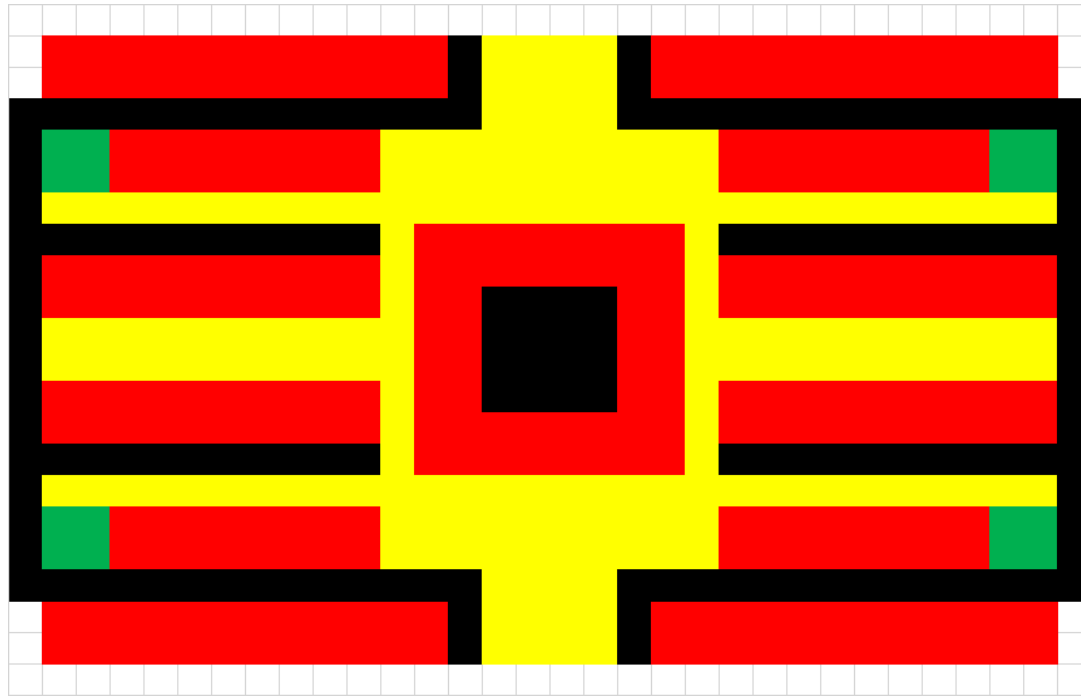
Solution d'une église hypothétique

- On obtiendrait la solution de l'état stationnaire, et l'envisagerait dans une carte de chaleur. Visuellement, la distribution virale se concentrerait plus au devant des audiences, et moins au derrière des audiences ou aux zones qui les prêtres resteraient.



Étude de l'effet des ventilations aux marchés publics

- Considérons un autre cas d'un marché public. On voudrait comprendre ensuite, si établir une ventilation centrale peut atténuer la concentration virale aux périodes très peuplées. On prédirait que les peuples se concentraient plus aux magasins, et moins aux couloirs.



Vert: Ventilation périphérique

Noir: Mur

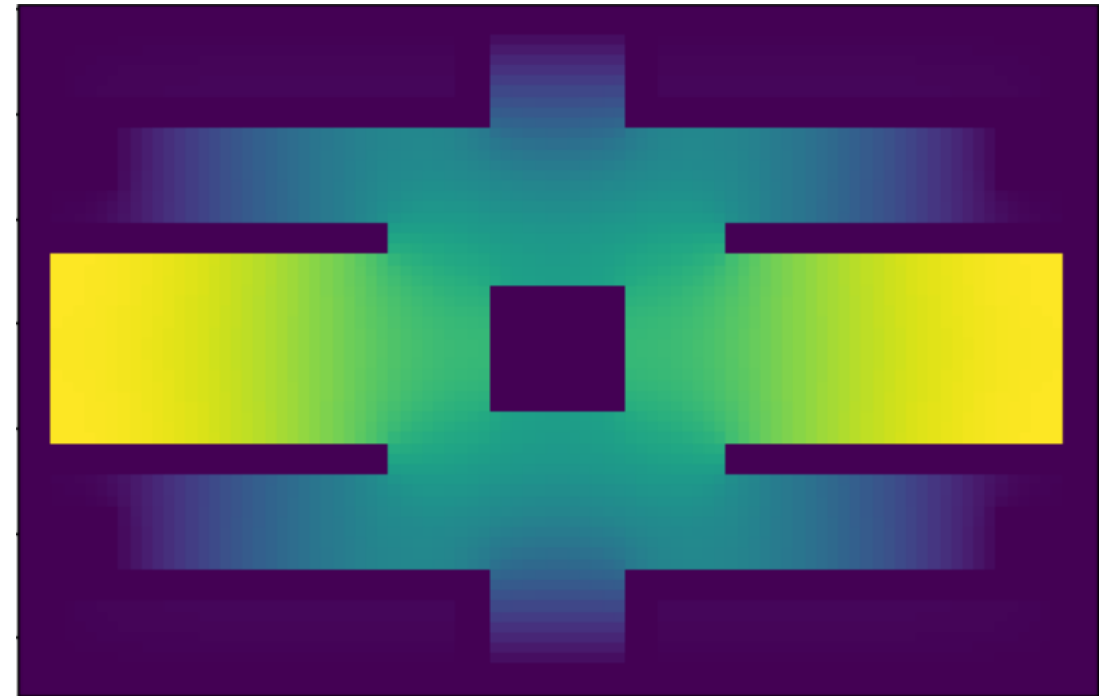
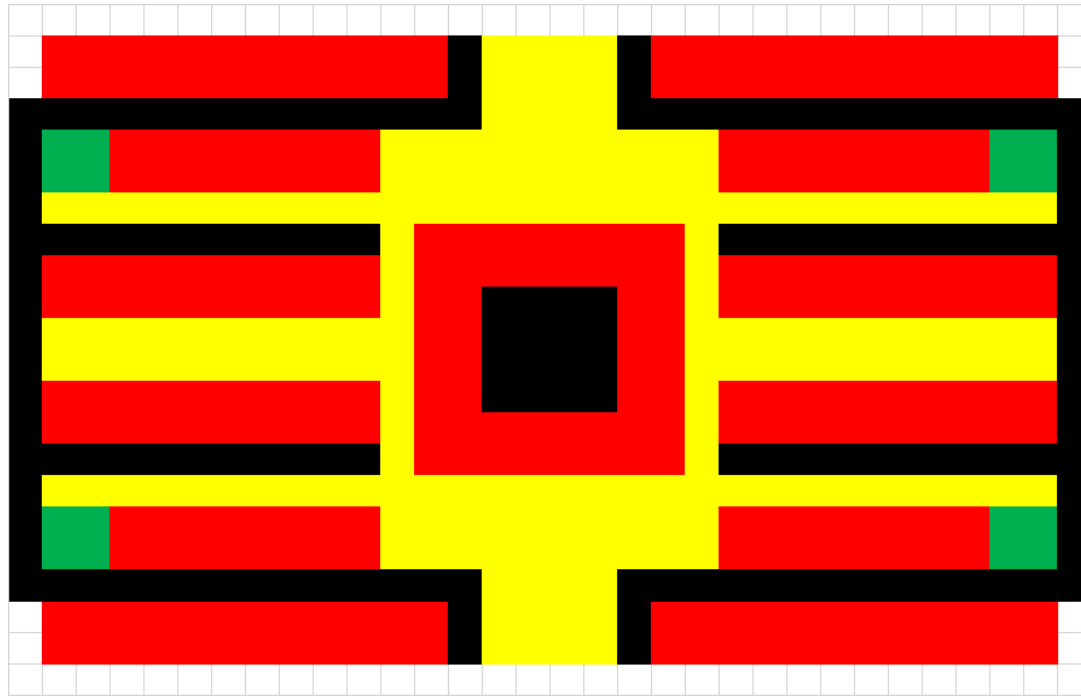
Rouge: Sol plus peuplé, $f = 3$

Jaune: Sol moins peuplé, $f = 1$

Blanc: Environnement

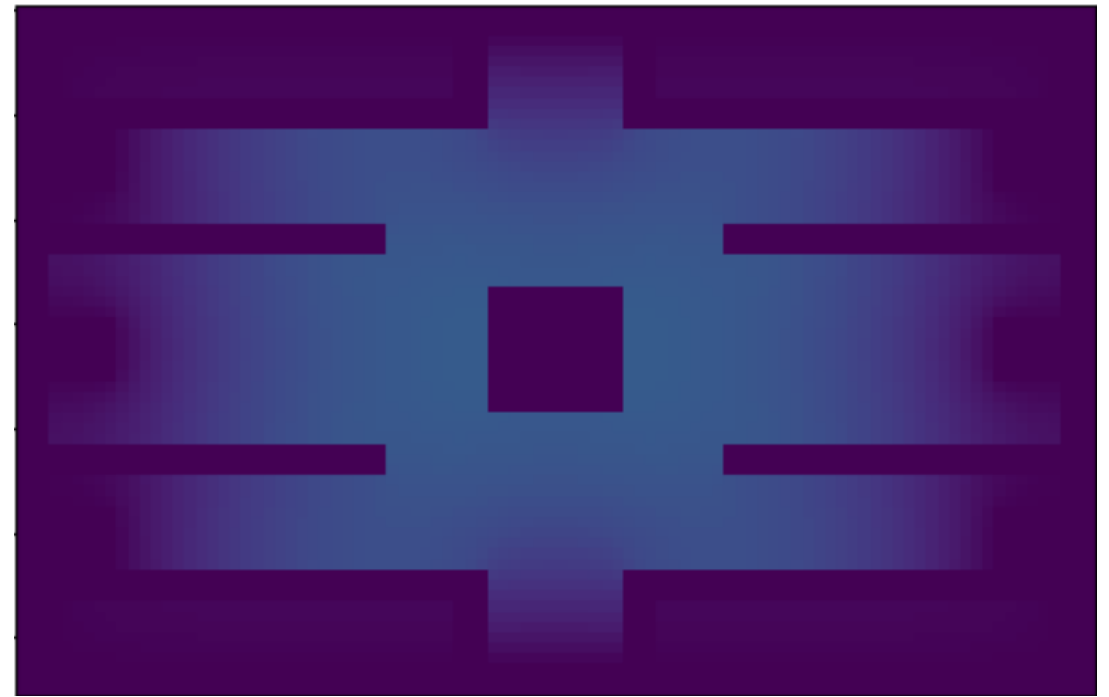
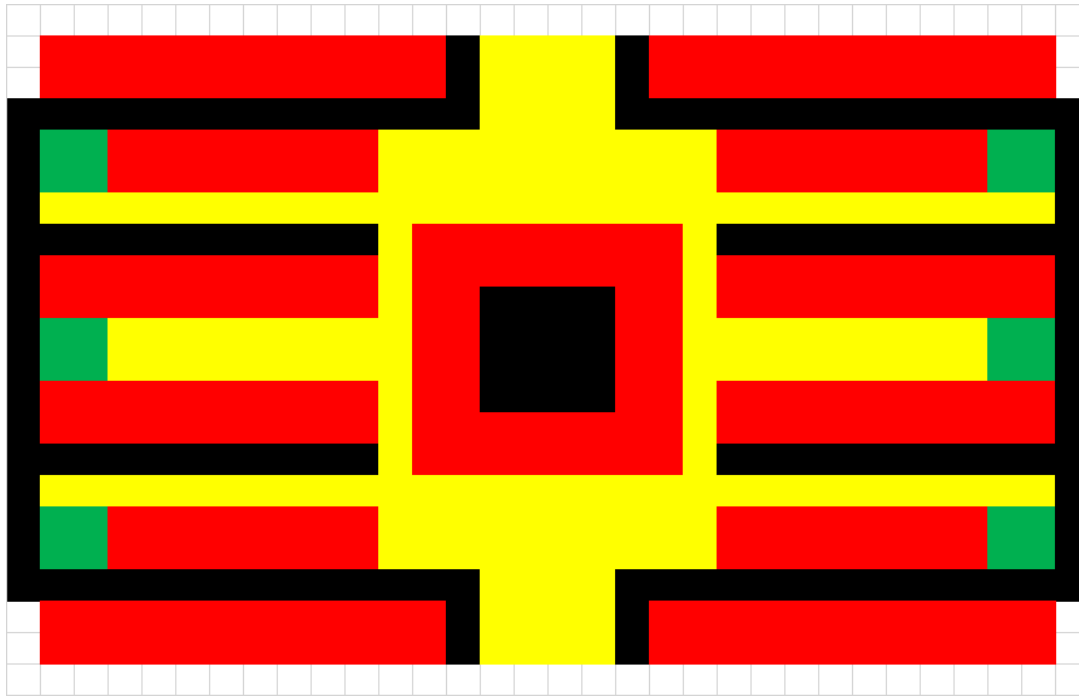
Étude de l'effet des ventilations aux marchés publics

- On verrait clairement, qu'on aurait aisément des concentration virales dans les couloirs et magasins intérieurs, s'il ne y'a pas des ventilations périphériques. Pour les surmonter, on ajouterait ou plus des ventilations petites périphériques, ou une ventilation grande centrale.



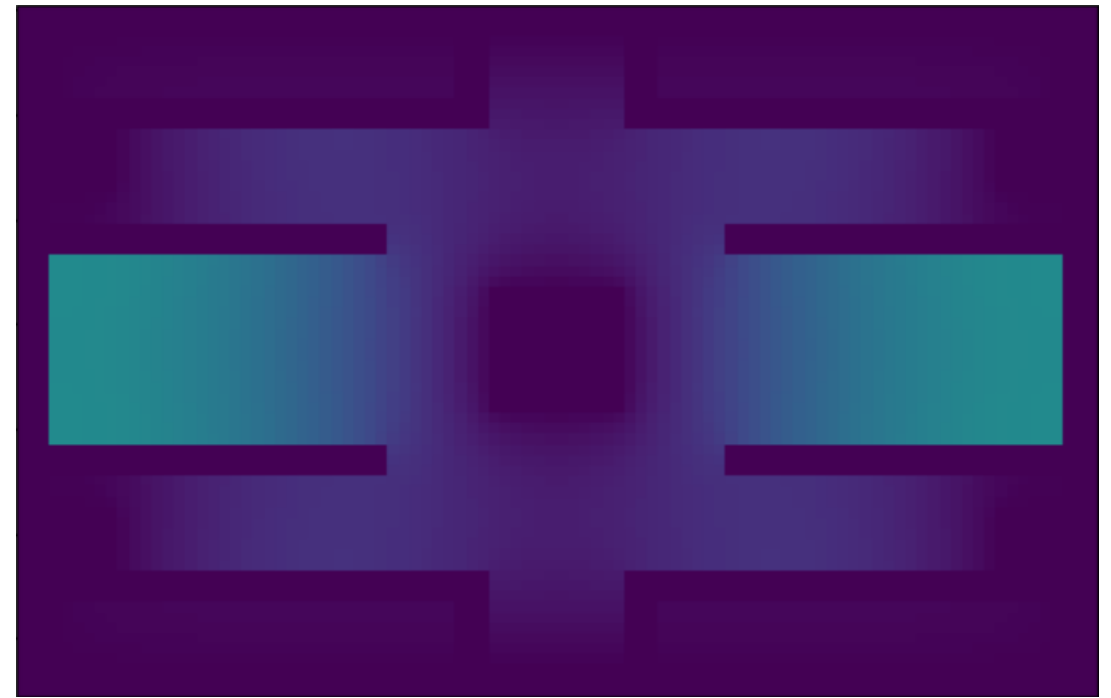
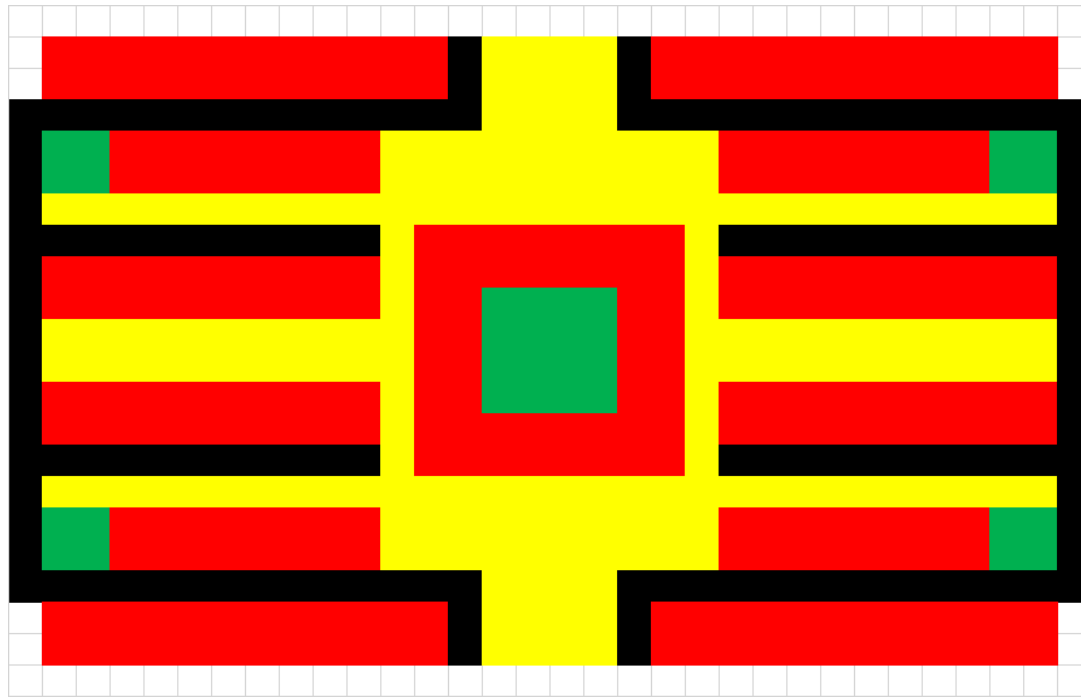
Étude de l'effet des ventilations aux marchés publics

- Étudions d'abord la solution aux nouvelles ventilations périphériques. Sans doute, augmenter les ventilations un peu fournit une réduction exceptionnelle de l'accumulation virale entre les cellules qui avaient des accumulations risquées. On voudrait ensuite les comparer à la ventilation centrale.



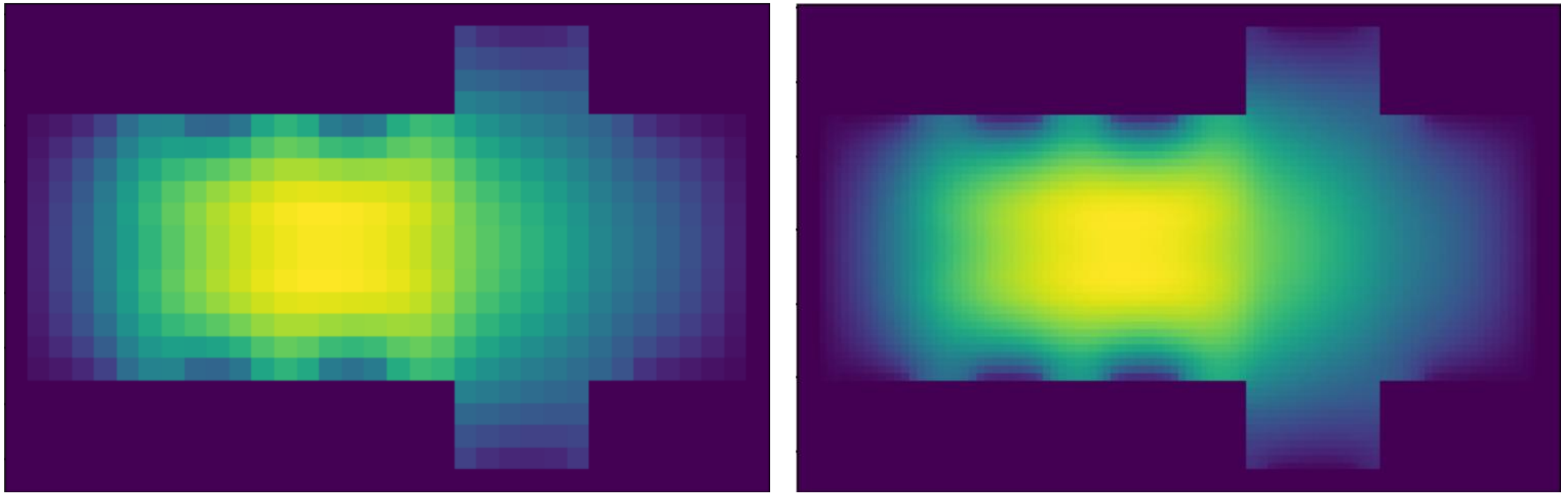
Étude de l'effet des ventilations aux marchés publics

- S'on ajoute plutôt une ventilation centrale, la distribution virale diminuerait premièrement aux cellules centrales, quand cela des cellules périphériques en aurait seulement une diminution modérée. On conclut ainsi qu'en ce plan, on préférerait introduire les ventilations périphériques.



Les effets de granularité des cartes de chaleur

- Théoriquement, augmenter la granularité de simulation se rapprocherait du cas continu. Néanmoins, car il gonflerait aussi le cout informatique, on pourrait choisir une granularité un peu réduite sans compromettre la interprétation des résultats, comme le cas de l'église se démontre ici.



Conclusion

- Cette écriture petite a dérivé et interprété l'équation de la chaleur et l'équation de Poisson dans le contexte des graphes simples, non orientés et connectés.
- En ces cas, on partitionnerait une espace continue en un graph, qui les arêtes se formeraient entres les sommets voisins qui représentent les sols. Les conditions aux limites sont soit de Neumann aux dérivées de zéros, soit de Dirichlet aux potentiels de zéros.
- Les nouvelles équations formeraient seulement des cas très restrictifs et ne pourraient pas équivaloir aux cas généraux des équations discrétisées de la chaleur et de Poisson. Néanmoins, ils ferait les moyens assez simples d'arriver aux solutions aisément.
- Une application plus simple est décrire la distribution de quelques potentiels dans un espace qui se ferme partiellement dans les murs, et s'ouvre partiellement à l'environnement.

Références

- I. EN: **Linear Nonhomogeneous Systems of Differential Equations with Constant Coefficients.** Lien externe: <https://math24.net/linear-nonhomogeneous-systems-differential-equations-constant-coefficients.html>
- II. EN: **Spectral Radius, Symmetric and Positive Matrices.** Lien externe: <https://iuuk.mff.cuni.cz/~rakdver/linalg/lesson15-9.pdf>