

SUR LE PROBLÈME PARABOLIQUE DE DIFFUSION DE LA CHALEUR SANS TERME SOURCE 1D: ÉTUDE DES SOLUTIONS NUMÉRIQUES ET SIMULATIONS

ANDRÉ THÉO

Turing Centre for Living Systems & Aix-Marseille Université

TABLE DES MATIÈRES

1. Définitions, calculs préliminaires et premier résultat	1
1.1. Définition du problème	2
1.2. Vers une discrétisation du problème	2
2. Étude de cas : problème à condition initiale continue	3
2.1. Solution exacte et premières simulations	3
2.2. Importance des coefficients	3
2.3. Comparaison de performances	4
2.4. Décroissance de l'énergie du système	5
3. Étude de cas : problème à condition initiale discontinue (de carré intégrable)	5
3.1. Phénomène de propagation à vitesse infinie	6
3.2. Décroissance en temps de l'énergie du système	6
Annexe A. Convolution de la solution initiale par le noyau de la chaleur	8
Annexe B. Calcul de l'énergie du système à condition initiale continue	8
Annexe C. Codes Pythons utilisés pour la création des figures	8

1. DÉFINITIONS, CALCULS PRÉLIMINAIRES ET PREMIER RÉSULTAT

Les équations aux dérivées partielles (EDP) sont omniprésentes dans les domaines scientifiques. En physique avec les équations de la relativité d'**Einstein**, en mécanique quantique, en thermodynamique, en mécanique et dynamique des fluides ou encore pour l'étude des plasmas. En finance, avec les équation de **Black-Scholes**. En chimie ou neurosciences ; elles sont partout ! Un seul hic : résoudre des EDP représente une tâche difficile... (voire impossible selon les cas). Tout n'est cependant pas perdu, l'arrivée des ordinateurs et machines à calculer au beau milieu du XX^e siècle ont grandement facilité l'étude des EDP ainsi que leur compréhension notamment *via* des simulations numériques, calculs autrefois bien trop fastidieux à réaliser à la main. Il sera question, dans ce rapport, de traiter un problème aux limites de diffusion de la chaleur unidimensionnelle, sans terme source à condition initiale donnée. Notre étude se déroulera en deux parties : une première dans laquelle nous nous placerons dans des conditions où nous savons résoudre le problème considéré (qui nous servira à étalonner la méthode de résolution ainsi que vérifier sa bonne implémentation). Avant, dans un second temps, de nous appuyer sur notre modèle pour résoudre un problème dont nous ne pouvons pas simplement calculer les solutions à la main. En espérant que la lecture de ce compte rendu soit agréable, je vous souhaite une bonne lecture.

Finalement, nous avons mis le schéma numérique sous la forme $\mathbf{B}_h \mathbf{u}_h^{n+1} = \mathbf{C}_h \mathbf{u}_h^n$. La matrice \mathbf{B}_h s'écrivant comme la somme de l'identité de $\mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ et de la matrice **SDP**¹ $\theta\nu\mathbf{Tridiag}(-1, 2, -1)$. On en déduit que \mathbf{B}_h est une matrice inversible d'inverse \mathbf{B}_h^{-1} . En conclusion de cette première section, nous avons que le système admet, par récurrence immédiate sur n , une unique solution à chaque étape de temps donnée par $\mathbf{u}_h^n = (\mathbf{B}_h^{-1} \mathbf{C}_h)^n \mathbf{u}_h^0$.

2. ÉTUDE DE CAS : PROBLÈME À CONDITION INITIALE CONTINUE

Remarque. À partir de cette section, nous supposerons sans perte de généralité, que le coefficient de diffusion est égal à 1.

2.1. Solution exacte et premières simulations. On considère la condition initiale $\mathbf{u}_0 : x \mapsto \sin(k\pi x)$ pour un certain entier $k \in \mathbb{N}$ que l'on fixera dans notre programme. Naturellement, on peut vérifier que la fonction $\mathbf{u}_{\text{ex}} : (t, x) \mapsto e^{-k^2\pi^2 t} \sin(k\pi x)$ est une solution du problème en utilisant le fait que \mathbf{u} est différentiable selon les deux axes et que $\partial_x^2 \mathbf{u}_{\text{ex}} = \partial_t \mathbf{u}_{\text{ex}} = -k^2\pi^2 e^{-k^2\pi^2 t} \sin(k\pi x)$ qui, une fois injecté dans (1), donne

$$\partial_t \mathbf{u}_{\text{ex}} - a \partial_x^2 \mathbf{u}_{\text{ex}} = 0$$

Il suffit enfin de remarquer que $\mathbf{u}_{\text{ex}}|_{\partial\Omega} = 0$ à chaque instant $t > 0$ pour conclure. D'autres calculs permettent aussi de vérifier que \mathbf{u}_{ex} est bien une solution du problème. L'avantage de démarrer notre étude par un cas de figure simple, réside dans le fait qu'il est possible de calculer la solution du problème, et donc de la tracer sur un graphique. De fait, nous pouvons alors vérifier la bonne implémentation de notre schéma avant de généraliser à des cas moins évidents.

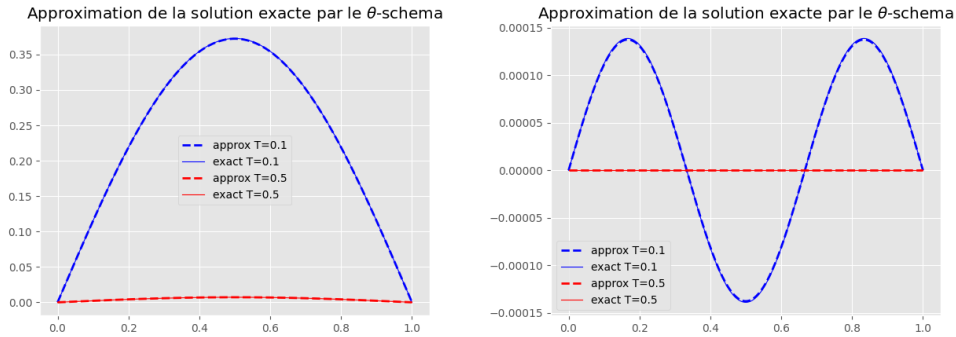


FIGURE 1 – deux tracés de la solution exacte aux temps $T_1 = 0.1$ et $T_2 = 0.5$ ainsi que son approximation par le θ -schéma, $\theta = 0.5$, $\delta t = 1\text{e-}5$, $\delta x = 1\text{e-}4$, $\nu = 100$. **À gauche :** pour le choix $k = 1$ **À droite :** pour le choix $k = 3$

2.2. Importance des coefficients. Les deux dernières simulations nous permettent de confirmer la bonne implémentation numérique du schéma. De plus, on remarque que la solution décroît très vite ; l'exponentielle négative $\exp(-k^2\pi^2 t)$ (moralement une gaussienne) devant le sinus écrase fortement la solution u vers la fonction nulle sur $[0, 1]$, ce qui est très justement illustré par les courbes rouges sur les deux schémas. Il faut, toutefois, être vigilant sur le choix de δx et δt . En effet, là où le schéma de **Crank-Nicolson** et **Implicite Pur** fonctionnent pour tout choix de ν , il n'en est pas de même pour le schéma **Explicite**, comme l'illustre le schéma en figure [2] qui illustre l'explosion en magnitude ($2 \cdot 1\text{e}116$) de l'approximation :

1. **SDP** = Symétrique Définie Positive. Remarquez qu'il s'agit de la matrice A_h vue en cours à une constante multiplicative positive près.

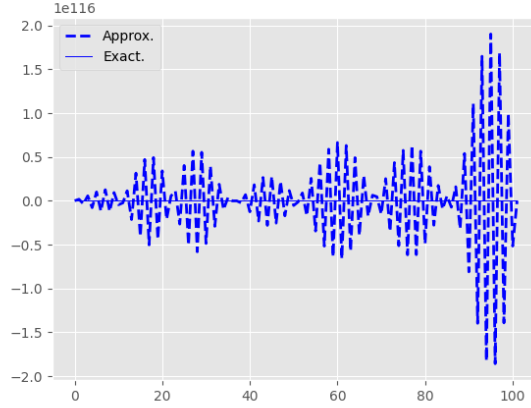


FIGURE 2 – Non convergence du schéma explicite pour un choix de $\nu = 100$, $\delta x = 1\text{e-}2$

2.3. Comparaison de performances. Ayant connaissance de ces cas limites qui mettent en échec le θ -schéma, positionnons-nous en situation de convergence et regardons l'efficacité des trois schémas principaux (à savoir pour les choix $\theta = 0, \theta = 1, \theta = 0.5$). Pour cela, on procède en définissant l'erreur en chaque points de la maille en espace comme $(e_h^n)_j = u(t_n, x_j) - u_j^n$, $j = 1, \dots, N$. La manière la plus naturelle d'estimer l'erreur totale du schéma revient à regarder la norme de e_h^n . Là, plusieurs choix s'offrent à nous, ou bien la norme $\|\cdot\|_{p,\delta x}$, $p > 1$ discrète, ou bien la norme $\|\cdot\|_\infty$, toutes deux définies comme suit

$$\|u\|_{p,\delta x} = (\delta x)^{1/p} \sum_{j=1}^N |u_j|^p, \quad \|\cdot\|_\infty = \max_{j=1,\dots,N} |u_j|$$

Par la suite, nous implémenterons les normes $\|\cdot\|_{2,\delta x}$ et $\|\cdot\|_\infty$. Durant le cours, nous avons prouvé que le θ -schéma était d'ordre 2 en espace et 1 en temps (sous réserve que $\nu \leq 0.5$ pour le choix $\theta = 0$). Ce résultat peut être mis en évidence en calculant, pour des valeurs de δx de plus en plus petites, la norme de l'erreur en échelle logarithmique.

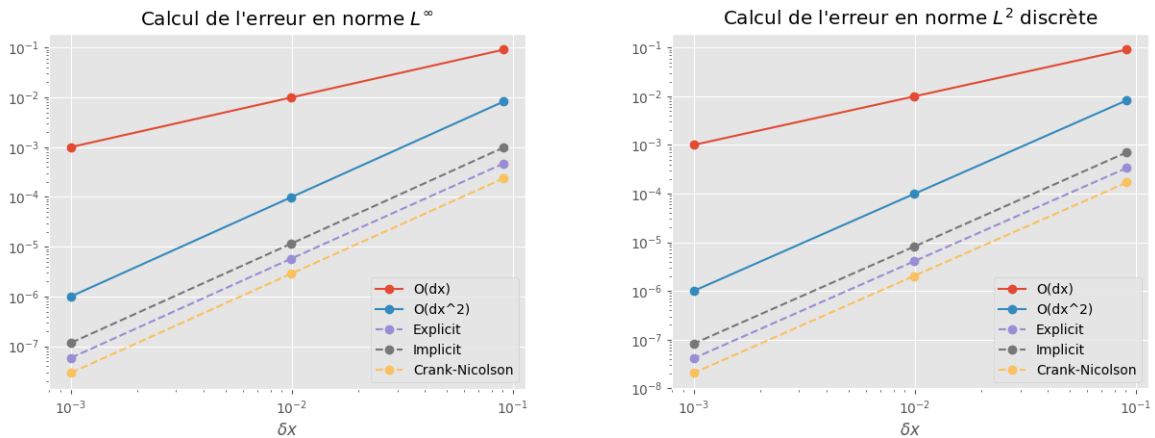


FIGURE 3 – Comparaison des erreurs, **à gauche** : en norme L^∞ , **à droite** : en norme L^2 discrète. Les graphiques sont en échelle log – log ; en chaque point est calculée l'erreur du schéma pour δx variant entre $1\text{e-}1$ et $1\text{e-}3$.

La figure [3] illustre bien le comportement en $\mathcal{O}(\delta x^2)$, qui est traduit par le parallélisme entre les courbes des erreurs pour chaque schéma, et la courbe $\log \delta x \mapsto 2 \log \delta x$.

2.4. Décroissance de l'énergie du système. On rappelle que dans le cas continu, l'énergie totale du système est donnée par la fonction $E : t \mapsto \int_{\Omega} |u(t, y)|^2 dy$ par opposition au cas discret, où l'énergie est définie comme $\mathcal{E}^n : n \mapsto \|u_h^n\|_{2, \delta x}^2$ qui n'est rien de moins que l'approximation $\mathcal{E}^n \approx E(t_n)$. On peut montrer que l'énergie continue associée à la solution u est donnée à chaque instant $t > 0$ par

$$E(t) = \frac{1}{2} e^{-2k^2 \pi^2 t}$$

L'énergie décroît effectivement très rapidement vers 0 en vertu de l'exponentielle négative. Pareillement, on peut observer du côté numérique ; une décroissance de l'énergie en fonction du temps. Pour cela, on choisit le schéma de **Crank-Nicolson** ($\theta = 0.5$) et l'on calcule à chaque itération n , le carré de la norme L^2 discrète $\|u_h^n\|_{2, \delta x}^2$. La résultante en est un graphique de la sorte.

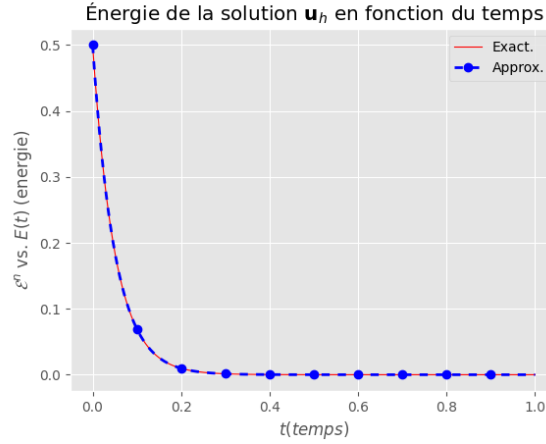


FIGURE 4 – Illustration de la décroissance de l'énergie en fonction du temps. La courbe rouge est le graphe de $E(t)$ tandis que la bleue représente l'énergie discrète calculée à chaque temps t_n , $n \in \{0, \dots, \lfloor T/\delta t \rfloor\}$ pour $T = 1$ agrémentée de quelques points significatifs.

Ce graphique est cohérent avec le fait que pour t grandissant, la solution u tend vers la fonction identiquement nulle sur $[0, 1]$.

3. ÉTUDE DE CAS : PROBLÈME À CONDITION INITIALE DISCONTINUE (DE CARRÉ INTÉGRABLE)

Maintenant que nous sommes assurés du bon fonctionnement de notre programme, basculons vers un problème similaire où la condition initiale $u_0 \in \mathcal{L}^2$, est la fonction porte définie par $u_0 : x \mapsto \mathbf{1}_{[1/4, 3/4]}(x)$. L'unique solution du nouveau problème est alors donné par la formule $(u_0 \star G(t, \cdot))(t, x)$ qui, en développant, donne

$$\begin{aligned} u(t, x) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \int_{\mathbb{R}} \mathbf{1}_{[1/4, 3/4]}(x-y) e^{-\frac{y^2}{4t}} dy \\ &= \frac{1}{2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(x-3/4)/2\sqrt{t}}^{(x-1/4)/2\sqrt{t}} e^{-z^2} dz \\ &= \frac{1}{2} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{x-1/4}{2\sqrt{t}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{x-3/4}{2\sqrt{t}} \right) \right] \end{aligned}$$

Où l'on a invoqué la fonction $\operatorname{erf} : z \mapsto \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-x^2} dx$. On montre que erf est développable en série entière sur \mathbb{R} tout entier en intégrant terme à terme par convergence dominée sur les compacts. Ceci mène donc à la relation pour tout $z \in \mathbb{R}$ $\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{k \geq 0} \frac{(-1)^k z^{2k+1}}{n!(2n+1)}$. On trouve finalement

$$u(t, x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{4^n t^n n! (2n+1)} \left(\left(x - \frac{1}{4}\right)^{2n+1} - \left(x - \frac{3}{4}\right)^{2n+1} \right)$$

Remarque. comme le souligne justement l'énoncé, la solution analytique trouvée n'est pas simple. Elle présente toutefois l'avantage d'être implementable en Python (avec une boucle `for`) et donc potentiellement être utilisée pour comparer la justesse de notre schéma avec la véritable solution (à résidu d'une série convergente près).

Les calculs nous montrent que chercher une solution à la main n'est pas vraiment un choix optimal. Utilisons plutôt notre script Python en modifiant la condition initiale en faisant tourner les trois schémas afin d'assurer les résultats obtenus.

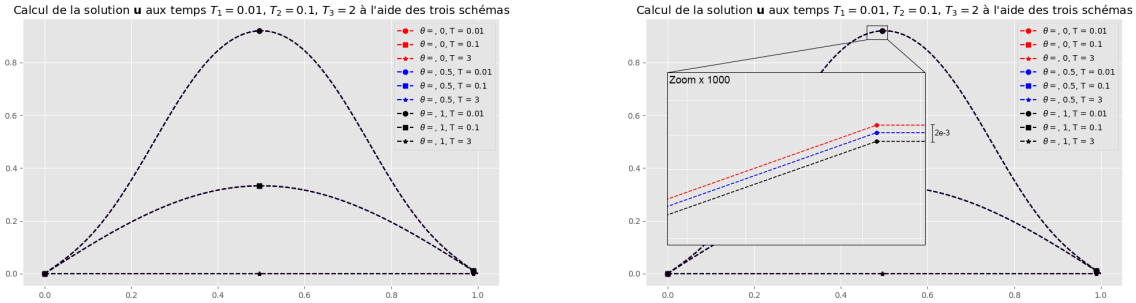


FIGURE 5 – **À gauche :** Calcul de la solution u_h après différents temps avec les trois schémas numériques vus précédemment. **À droite :** C'est une copie du graphique de gauche où l'on a zoomé pour faire apparaître les différents tracés des schémas.

3.1. Phénomène de propagation à vitesse infinie. La propagation à vitesse infinie est un phénomène propre à la famille des équations paraboliques. Ce phénomène est caractérisé par le fait que toute solution u du problème parabolique, qu'importe le support de $\text{supp}(u_0)$ et aussi petit que soit $t > 0$, $\text{supp}(u(t, \cdot))$ n'est pas contenu dans un compact. Du point de vue théorique, on peut prouver ce résultat en montrant que $u_0 \star G(t, \cdot)$ est non-nulle pour une infinité de x suffisamment grands. En pratique le résultat se montre très bien en calculant les premières itérations de la méthode pour un choix de δt très petit et en voyant la condition initiale s' "étaier" dès les premières itérations comme le montre si bien la figure [6]. En effet, on remarque sur le graphique que le support $\text{supp}(u)$ subit un clair changement de nature, après convolution, par le noyau de la chaleur G .

3.2. Décroissance en temps de l'énergie du système. Finalement, on utilise le même script que précédemment pour calculer l'énergie du système. Une fois de plus, on observe une forte décroissance de l'énergie du système.

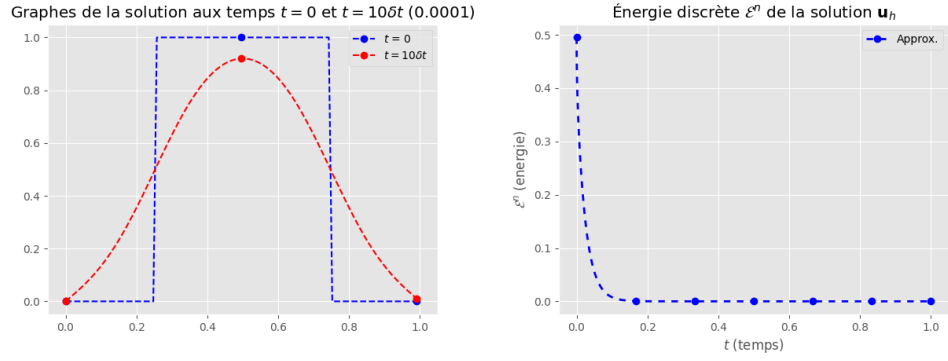


FIGURE 6 – **À gauche** : Illustration du phénomène de propagation à vitesse infinie en traçant deux courbes de la solution \mathbf{u}_h aux temps $t_0 = 0$ et $t_1 > 0$ très petit ($1e-3$) et en remarquant que $\text{supp}(\mathbf{u})$ n'est déjà plus inclus dans un compact dès t_1 . **À droite** : Graphe de l'énergie discrète $\mathcal{E}^n = \|\mathbf{u}\|_{2,\delta x}^2$ par rapport à un temps t variant entre 0 et 1.

Et c'est sur cette dernière figure que nous concluons ce rapport, merci de l'avoir lu. (Et n'oubliez pas les annexes!)

ANNEXE A. CONVOLUTION DE LA SOLUTION INITIALE PAR LE NOYAU DE LA CHALEUR

Il était possible de montrer $\mathbf{u}_{\text{ex}} = (u_0 \star \mathbf{G}(t, \cdot))(t, x)$ en procédant ainsi

$$\begin{aligned}
(u_0 \star \mathbf{G}(t, \cdot))(t, x) &= \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \sin[k\pi(x-y)] e^{-\frac{y^2}{4t}} dy \\
&= \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \Im \left\{ \int_{\mathbb{R}} e^{ik\pi(x-y) - \frac{y^2}{4t}} dy \right\} \\
&= \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \Im \left\{ e^{ik\pi x} \int_{\mathbb{R}} e^{-\left(\frac{y}{\sqrt{4t}} + ik\pi t\right)^2 - k^2\pi^2 t} dy \right\} \\
&= \frac{e^{-k^2\pi^2 t}}{\sqrt{4\pi t}} \Im \left\{ e^{ik\pi x} \int_{\mathbb{R}} e^{-\left(\frac{y}{\sqrt{4t}} + ik\pi t\right)^2} dy \right\} \\
(\text{Théorème de Cauchy}) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-k^2\pi^2 t} \Im \left\{ e^{ik\pi x} \int_{\mathbb{R}} e^{-z^2} dz \right\} \\
&= e^{-k^2\pi^2 t} \sin(k\pi x)
\end{aligned}$$

ne reste plus qu'à conclure en remarquant que l'on a appliqué le théorème (4.2) du cours au problème (1).

Remarque. Par souci de l'esthétique des calculs, on pouvait aussi remarquer que $(u_0 \star \mathbf{G}(t, \cdot))(t, x)$ n'est rien d'autre que $\Im \{ \exp(ik\pi x) \hat{f}_{\mathbf{X},t}(-k\pi) \}$ où $\hat{f}_{\mathbf{X},t}$ représente la transformée de **Fourier** d'une variable aléatoire \mathbf{X} suivant une loi normale $\mathcal{N}(0, \sqrt{2t})$, d'où $\hat{f}_{\mathbf{X},t}(-k\pi) = \exp(-k^2\pi^2 t)$ que l'on peut sortir de la partie imaginaire pour obtenir le résultat voulu. Simple et élégant.

[Retour à la lecture.](#)

ANNEXE B. CALCUL DE L'ÉNERGIE DU SYSTÈME À CONDITION INITIALE CONTINUE

Il s'agit d'un calcul court, sans piège, et très linéaire. On se fixe un $t > 0$ et l'on calcule

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}(t) &= \int_0^1 |u(t, y)|^2 dy = \int_0^1 \left| \sin(k\pi y) e^{-k^2\pi^2 t} \right|^2 dy \\
&= e^{-2k^2\pi^2 t} \int_0^1 \sin^2(k\pi y) dy \\
&\stackrel{\text{on opère une I.P.P.}}{\text{(sin}^2 = \sin \cdot \sin \text{)}} = e^{-2k^2\pi^2 t} \left[\frac{y}{2} - \frac{\sin(2k\pi y)}{4k\pi} \right]_0^1
\end{aligned}$$

Qui, après substitution des valeurs aux bords, fournit le résultat souhaité $\mathbf{E}(t) = \frac{1}{2} \exp(-2k^2\pi^2 t)$

[Retour à la lecture.](#)

ANNEXE C. CODES PYTHONS UTILISÉS POUR LA CRÉATION DES FIGURES

Vous pourrez trouver mes codes Python sur le repository Github associé situé à l'adresse suivante :

https://github.com/theoanalyse/TP_CHALEUR_EDP.git