Licence SVT
Année 2015 - 2016

Schéma numérique d'une équation de diffusion et calcul matriciel

On considère une quantité sur un domaine $\Omega = [-L, L]$, où $L > 0$ et qui varie au cours du temps $t \in [0, T]$, où $T > 0$. La densité u est une fonction des variables t et $x \in \Omega$ qui est supposée vérifier l'équation suivante :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D(x)\frac{\partial u}{\partial x}\right) \tag{1}$$

On admet également que la condition initiale est une fonction u_0 définie sur Ω :

$$u(0, x) = u_0(x)$$

Conditions aux bords : pour l'exemple, on supposera que le domaine est fermé et que le flux de matériel aux bords est nul (condition de Neumann), ce qui se traduit par l'équation :

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, -L) = \frac{\partial u}{\partial x}(t, L) = 0 \quad \text{pour tout } t \in [0, T] \tag{2}$$

1 Discrétisation spatiale :

Nous allons considérer une grille spatiale en subdivisant le domaine Ω en sous-intervalles de taille Δx. On note N le nombre de noeuds x_i sur cette grille, avec $x_1 = -L$, $x_{i+1} = x_i + \Delta x$ et $x_N = L$. On notera également $u_i(t)$ la valeur de u en (t, x_i) : $u_i(t) = u(t, x_i)$. La fonction u à deux variables est donc remplacée par N fonctions à une variable. Nous allons donc remplacer l'équation (1) par N équations différentielles ordinaires de telle sorte que le vecteur $U(t) = (u_1(t), \ldots, u_N(t))$ soit une bonne approximation de $u(x, t)$ pour tout $x \in \Omega$ et tout $t \in [0, T]$.

Par convention, on notera u_i pour $u_i(t)$ afin d'alléger les notations. Pour déterminer une approximation de l'équation (1), on va utiliser des développements limités. Notons tout d'abord que:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(D(x)\frac{\partial u}{\partial x}\right) = D'(x)\frac{\partial u}{\partial x} + D(x)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{3}$$

où $D'(x)$ désigne la dérivée de D en x.

Un développement limité de u à l'ordre 2 en $x + \Delta x$ donne :

$$u(t, x + \Delta x) = u(t, x) + \Delta x\frac{\partial u}{\partial x}(t, x) + \frac{\Delta x^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) + O(\Delta x^3)$$

De la même manière, un développement limité de u à l'ordre 2 en $x - \Delta x$ donne :

$$u(t, x - \Delta x) = u(t, x) - \Delta x\frac{\partial u}{\partial x}(t, x) + \frac{\Delta x^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) + O(\Delta x^3)$$

Par sommation de ces deux expressions, on déduit :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) = \frac{u(t, x + \Delta x) - 2u(t, x) + u(t, x - \Delta x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x)$$

En soustrayant les deux développements limités, on trouve :

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t,x) = \frac{u(t,x+\Delta x) - u(t,x-\Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

En considérant $x = x_i$ dans les deux expressions précédentes, on obtient :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x_i) \simeq \frac{u_{i+1}(t) - 2u_i(t) + u_{i-1}(t)}{\Delta x^2} \tag{4}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t,x_i) \simeq \frac{u_{i+1}(t) - u_{i-1}(t)}{\Delta x} \tag{5}$$

En remplaçant les dérivées premières et secondes de u par rapport à x dans l'équation (3) par leurs expressions (5) et (4), on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(D(x)\frac{\partial u}{\partial x}\right) \simeq D'_i \frac{u_{i+1}(t) - u_{i-1}(t)}{\Delta x} + D_i \frac{u_{i+1}(t) - 2u_i(t) + u_{i-1}(t)}{\Delta x^2}$$

où $D'_i = D'(x_i)$ et $D_i = D(x_i)$, ou de manière équivalente :

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(D(x)\frac{\partial u}{\partial x}\right) \simeq \left(\frac{D_i}{\Delta x^2} - \frac{D'_i}{\Delta x}\right) u_{i-1}(t) - \frac{2D_i}{\Delta x^2} u_i(t) + \left(\frac{D_i}{\Delta x^2} + \frac{D'_i}{\Delta x}\right) u_{i+1}(t) \tag{6}$$

En remplaçant le terme de diffusion dans (1) par son expression (6), on obtient le système d'équations différentielles recherché :

$$\frac{du_i}{dt} = \left(\frac{D_i}{\Delta x^2} - \frac{D'_i}{\Delta x}\right) u_{i-1} - \frac{2D_i}{\Delta x^2} u_i + \left(\frac{D_i}{\Delta x^2} + \frac{D'_i}{\Delta x}\right) u_{i+1}$$

En posant M la matrice définie par :

$$m_{i,i} = -\frac{2D_i}{\Delta x^2}$$

$$m_{i-1,i} = \frac{D_i}{\Delta x^2} - \frac{D'_i}{\Delta x}$$

$$m_{i,i+1} = \frac{D_i}{\Delta x^2} + \frac{D'_i}{\Delta x}$$

et où les autres coefficients sont nuls.

Toutes les expressions précédentes fonctionnent pour tout i sauf pour $i = 1$ et $i = N$. Pour ces deux valeurs particulières de i, qui correspondent aux bords de Ω, il faut considérer les conditions aux bords. Avec l'équation (5), en posant $i = 1$ où $i = N$, et avec la condition (2), les conditions aux bords se traduisent par :$u_0 = u_2$ et $u_{N+1} = u_{N-1}$, on remplace alors u_0 et u_{N+1} par u_2 et u_{N-1} respectivement dans les équations de $\frac{du_1}{dt}$ et $\frac{du_N}{dt}$.

$$\frac{du_1}{dt} = -\frac{2D_1}{\Delta x^2} u_1 + \frac{2D_1}{\Delta x^2} u_2$$

et

$$\frac{du_N}{dt} = \frac{2D_N}{\Delta x^2} u_{N-1} - \frac{2D_N}{\Delta x^2} u_N$$

Posons $m_{1,2} = \dfrac{2D_1}{\Delta x^2}$ et $m_{N-1,N} = \dfrac{2D_N}{\Delta x^2}$.

$$M = \begin{pmatrix} -\frac{2D_1}{\Delta x^2} & \frac{2D_1}{\Delta x^2} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \frac{D_i}{\Delta x^2} - \frac{D_i'}{\Delta x} & -\frac{2D_i}{\Delta x^2} & \frac{D_i}{\Delta x^2} + \frac{D_i'}{\Delta x} & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & -\frac{2D_i}{\Delta x^2} & b & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \frac{D_{N-1}}{\Delta x^2} - \frac{D_{N-1}'}{\Delta x} & -\frac{2D_{N-1}}{\Delta x^2} & \frac{D_{N-1}}{\Delta x^2} + \frac{D_{N-1}'}{\Delta x} \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \frac{2D_N}{\Delta x^2} & -\frac{2D_N}{\Delta x^2} \end{pmatrix}$$

Avec cette matrice, l'équation (1) est approximée au moyen du système différentiel linéaire suivant :

$$\frac{dU}{dt} = MU$$