

ÉQUATION DE DIFFUSION (CENTRALE PC 2018)

Durée : 4 heures

Objectifs et notations

Ce problème étudie quelques aspects de l'équation de diffusion (1) : $\frac{\partial f}{\partial t}(t, x) = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(t, x)$.

Cette équation modélise l'évolution au cours du temps de la température le long d'une barre métallique unidimensionnelle, ou encore l'évolution au cours du temps de la concentration d'une espèce chimique (par exemple un polluant dans une rivière assimilée à l'axe des x).

Le problème est constitué de quatre parties.

- La partie I permet de démontrer quelques résultats sur la transformée de Fourier d'une fonction continue et intégrable sur \mathbb{R} . Ces résultats sont utilisés dans la partie II.
- La partie II aboutit à la résolution de l'équation (1) lorsqu'on impose à la solution f d'être de classe \mathcal{C}^2 et de vérifier certaines conditions.
- La partie III étudie la stabilité du schéma numérique correspondant à la discrétisation de t et de x .
- La partie IV fournit une interprétation probabiliste du paramètre qui détermine la stabilité étudiée dans la partie III.

Les parties III et IV sont indépendantes des parties I et II et largement indépendantes entre elles.

On désigne par $\mathcal{C}^2(\mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}, \mathbb{R})$ l'ensemble des fonctions de $\mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}$ dans \mathbb{R} , de classe \mathcal{C}^2 .

Pour toute fonction h définie sur $\mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}$, pour tout réel $t_0 > 0$, on note $h(t_0, \cdot)$ la fonction partielle $x \mapsto h(t_0, x)$ définie sur \mathbb{R} ; de même, pour tout réel x_0 , on note $h(\cdot, x_0)$ la fonction partielle $t \mapsto h(t, x_0)$ définie sur \mathbb{R}_+^* .

Si a et b sont deux entiers tels que $a \leq b$, on note $\llbracket a, b \rrbracket$ l'ensemble des entiers k vérifiant $a \leq k \leq b$.

Pour tout réel $\sigma > 0$, g_σ désigne la fonction $g_\sigma : \begin{cases} \mathbb{R} & \rightarrow \mathbb{R} \\ x & \mapsto \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \end{cases}$.

I Préliminaires

Dans cette partie, on fixe un réel strictement positif σ .

I.A – Quelques propriétés de g_σ

Q 1. Montrer que g_σ est intégrable sur \mathbb{R} .

Q 2. En admettant que $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}$, donner la valeur de $\int_{-\infty}^{+\infty} g_\sigma(x) dx$.

Q 3. Étudier les variations de g_σ . Montrer que la dérivée seconde de g_σ s'annule en changeant de signe en exactement deux points. Donner l'allure de la courbe représentative de g_σ et placer les deux points précédents.

I.B – Soit f une fonction de \mathbb{R} dans \mathbb{C} , continue et intégrable sur \mathbb{R} .

Q 4. Montrer que, pour tout réel ξ , la fonction $\begin{cases} \mathbb{R} & \rightarrow \mathbb{C} \\ x & \mapsto f(x) \exp(-2i\pi\xi x) \end{cases}$ est intégrable sur \mathbb{R} .

On définit alors la fonction $\mathcal{F}(f) : \begin{cases} \mathbb{R} & \rightarrow \mathbb{C} \\ \xi & \mapsto \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \exp(-2i\pi\xi x) dx \end{cases}$.

On dit que $\mathcal{F}(f)$ est la transformée de Fourier de f .

Q 5. Montrer que $\mathcal{F}(f)$ est continue sur \mathbb{R} .

I.C – Soit f une fonction de \mathbb{R} dans \mathbb{C} , de classe \mathcal{C}^1 . On suppose que f et sa dérivée f' sont intégrables sur \mathbb{R} .

Q 6. Montrer que f tend vers zéro en $+\infty$ et en $-\infty$.

Q 7. Montrer que, pour tout réel ξ , $\mathcal{F}(f')(\xi) = 2i\pi\xi\mathcal{F}(f)(\xi)$.

I.D –

Q 8. Montrer que, pour tout entier naturel p , la fonction $x \mapsto x^{2p} \exp(-x^2)$ est intégrable sur \mathbb{R} .

On note $M_p = \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2p} \exp(-x^2) dx$.

Q 9. Pour p entier naturel, donner une relation entre M_{p+1} et M_p et en déduire que, pour tout $p \in \mathbb{N}$,

$$M_p = \frac{\sqrt{\pi}(2p)!}{2^{2p} p!}$$

Q 10. Montrer que, pour tout réel ξ , il existe une suite réelle $(c_p(\xi))_{p \in \mathbb{N}}$ telle que

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad \exp(-x^2) \cos(2\pi\xi x) = \sum_{p=0}^{+\infty} c_p(\xi) \exp(-x^2) x^{2p}$$

Q 11. En déduire que, pour tout réel ξ , $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-x^2) \exp(-2i\pi\xi x) dx = \sqrt{\pi} \exp(-\pi^2 \xi^2)$.

Q 12. On pose $\sigma' = \frac{1}{2\pi\sigma}$. Montrer qu'il existe un réel μ tel que $\mathcal{F}(g_\sigma) = \mu g_{\sigma'}$. La valeur de μ n'est pas à expliciter.

II équation de diffusion avec une condition initiale gaussienne

Dans cette partie, σ désigne un réel strictement positif. On cherche les éléments f de $\mathcal{C}^2(\mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}, \mathbb{R})$ vérifiant

i. l'équation de diffusion : $\forall (t, x) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}, \frac{\partial f}{\partial t}(t, x) = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(t, x)$;

ii. les trois conditions de domination : pour tout réel $T > 0$, il existe des fonctions ϕ_T, χ_T et ψ_T de \mathbb{R} dans \mathbb{R} , continues et intégrables sur \mathbb{R} , telles que

$$\forall t \in]0, T[, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad \begin{cases} |f(t, x)| \leq \phi_T(x) \\ \left| \frac{\partial f}{\partial x}(t, x) \right| \leq \chi_T(x) \\ \left| \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(t, x) \right| \leq \psi_T(x) \end{cases}$$

iii. la condition aux limites : $\forall x \in \mathbb{R}, \lim_{t \rightarrow 0^+} f(t, x) = g_\sigma(x)$.

Q 13. Montrer que la fonction $\begin{cases} \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R} & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ (t, x) & \longmapsto & g_{\sqrt{\sigma^2 + 2t}}(x) \end{cases}$ vérifie les conditions i et iii.

On admet que cette fonction vérifie également les trois conditions de domination ii.

L'objectif est de démontrer que c'est la seule fonction de classe \mathcal{C}^2 sur $\mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}$ vérifiant i, ii et iii.

Pour cela, on note f une fonction qui vérifie i, ii et iii.

II.A –

Q 14. Justifier que, pour tout réel $t > 0$ et tout réel ξ , la fonction $x \mapsto f(t, x) \exp(-2i\pi\xi x)$ est intégrable sur \mathbb{R} .

On définit alors la fonction \widehat{f} sur $\mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}$ par : $\forall (t, \xi) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}, \widehat{f}(t, \xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t, x) \exp(-2i\pi\xi x) dx$.

Avec les notations de la partie I, on a ainsi, pour tout réel $t > 0, \widehat{f}(t, \cdot) = \mathcal{F}(f(t, \cdot))$.

Q 15. Montrer que, pour tout nombre réel $\xi, \lim_{t \rightarrow 0^+} \widehat{f}(t, \xi) = \widehat{g}_\sigma(\xi)$.

On pourra utiliser une suite quelconque $(t_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de réels strictement positifs convergant vers zéro.

Q 16. Montrer que, pour tout réel ξ et tout réel $t > 0, \frac{\partial \widehat{f}}{\partial t}(t, \xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial f}{\partial t}(t, x) \exp(-2i\pi\xi x) dx$.

Q 17. En remarquant que $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial f}{\partial t}(t, x) \exp(-2i\pi\xi x) dx = \mathcal{F}\left(\frac{\partial f}{\partial t}(t, \cdot)\right)(\xi)$ et en utilisant la question 7, montrer que, pour tout réel ξ et tout réel $t > 0, \frac{\partial \widehat{f}}{\partial t}(t, \xi) = -4\pi^2 \xi^2 \widehat{f}(t, \xi)$.

II. B –

Q 18. Montrer que, pour tout $\xi \in \mathbb{R}$, il existe un réel $K(\xi)$ tel que pour tout $t \in \mathbb{R}_+^*$, $\widehat{f}(t, \xi) = K(\xi) \exp(-4\pi^2 \xi^2 t)$.

Q 19. En utilisant la question 15, déterminer, pour tout réel ξ , la valeur de $K(\xi)$.

II. C –

Q 20. En déduire l'existence d'un réel v_σ tel que, pour tout réel ξ et tout réel $t > 0$,

$$\widehat{f}(t, \xi) = v_\sigma \exp(-2\pi^2(\sigma^2 + 2t)\xi^2)$$

Q 21. Donner la valeur de v_σ .

On admet le résultat suivant :

si u et v sont des fonctions de \mathbb{R} dans \mathbb{R} , continues et intégrables sur \mathbb{R} et vérifiant $\mathcal{F}(u) = \mathcal{F}(v)$, alors $u = v$.

Q 22. Soit t un réel strictement positif. Déduire des questions 20 et 12 l'existence d'un réel $\lambda_{t,\sigma}$ tel que

$$f(t, \cdot) = \lambda_{t,\sigma} g_{\sqrt{\sigma^2 + 2t}}$$

Q 23. Montrer que la fonction $I : \begin{cases} \mathbb{R}_+^* & \rightarrow \mathbb{R} \\ t & \mapsto \int_{-\infty}^{+\infty} f(t, x) dx \end{cases}$ est constante.

On pourra utiliser le résultat de la question 17.

Q 24. En déduire que, pour tout réel t strictement positif, $f(t, \cdot) = g_{\sqrt{\sigma^2 + 2t}}$.

III Étude numérique

Dans cette partie, on étudie, du point de vue numérique, un certain problème de diffusion.

On fixe une fonction f , continue sur $\mathbb{R}_+ \times]0, 1[$ et de classe \mathcal{C}^2 sur $\mathbb{R}_+^* \times]0, 1[$, vérifiant l'équation de diffusion

$$\forall (t, x) \in \mathbb{R}_+^* \times]0, 1[, \quad \frac{\partial f}{\partial t}(t, x) = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(t, x)$$

ainsi que les conditions aux limites

$$\forall t \in \mathbb{R}_+^*, \quad f(t, 0) = f(t, 1) = 0.$$

On suppose connue la fonction $f(0, \cdot)$ et on se propose d'étudier une méthode de calcul numérique de f .

III. A –

Q 25. Soit $t \in \mathbb{R}_+^*$ et $x \in]0, 1[$. Donner la limite, quand θ tend vers zéro, de $\frac{f(t + \theta, x) - f(t, x)}{\theta}$.

Q 26. Soit $t \in \mathbb{R}_+^*$ et $x \in]0, 1[$. Montrer que $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(t, x + h) - 2f(t, x) + f(t, x - h)}{h^2} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(t, x)$.

III. B – Soit τ un réel strictement positif et q un entier naturel supérieur ou égal à 2.

On pose $\delta = \frac{1}{q+1}$ et $r = \frac{\tau}{\delta^2}$.

La méthode numérique retenue consiste à discrétiser t selon le pas τ et x selon le pas δ , ce qui amène à chercher une valeur approchée de $f(n\tau, k\delta)$, notée $f_n(k)$, pour $n \in \mathbb{N}$ et $k \in \llbracket 0, q+1 \rrbracket$.

Compte tenu des questions 25 et 26, l'équation de diffusion et les conditions aux limites conduisent à imposer, pour tout entier naturel n et tout $k \in \llbracket 1, q \rrbracket$, $\frac{f_{n+1}(k) - f_n(k)}{\tau} = \frac{f_n(k+1) - 2f_n(k) + f_n(k-1)}{\delta^2}$ ainsi que $f_n(0) = f_n(q+1) = 0$ et $f_0(k) = f(0, k\delta)$ (on rappelle que la fonction $f(0, \cdot)$ est supposée connue).

Pour $n \in \mathbb{N}$, on pose $F_n = \begin{pmatrix} f_n(1) \\ \vdots \\ f_n(q) \end{pmatrix}$.

On note I_q la matrice identité d'ordre q , et on définit la matrice B carrée d'ordre q par

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & & \vdots \\ 0 & 1 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 & 0 \\ \vdots & & \ddots & 1 & 0 & 1 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Ainsi, pour tous i, j dans $\llbracket 1, q \rrbracket$, le coefficient de place (i, j) de B est égal à 1 si $|i - j| = 1$ et à 0 sinon. Enfin, on pose $A = (1 - 2r)I_q + rB$.

Q 27. Montrer que, pour tout $n \in \mathbb{N}$, $F_{n+1} = AF_n$.

Q 28. Justifier que les matrices A et B sont diagonalisables sur \mathbb{R} et que, pour tout $n \in \mathbb{N}$, $F_n = A^n F_0$.

Q 29. Montrer que la suite $(F_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est bornée quel que soit le choix de F_0 si et seulement si les valeurs propres de A appartiennent à $[-1, 1]$.

Soit λ une valeur propre de B et soit $Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_q \end{pmatrix}$ un vecteur propre associé.

Q 30. En considérant un coefficient de Y dont la valeur absolue est maximale, montrer que $\lambda \in [-2, 2]$ et justifier l'existence d'un élément θ de $[0, \pi]$, tel que $\lambda = 2 \cos \theta$.

Q 31. Montrer que, si on impose $y_0 = y_{q+1} = 0$, alors, pour tout $k \in \llbracket 1, q \rrbracket$, $y_{k-1} - \lambda y_k + y_{k+1} = 0$.

Q 32. En déduire qu'il existe $j \in \llbracket 1, q \rrbracket$ tel que $\lambda = 2 \cos \frac{j\pi}{q+1}$.

Q 33. Déterminer le spectre de B et une base de vecteurs propres de B .

Q 34. Donner une condition nécessaire et suffisante portant sur r pour que la suite $(F_n)_{n \in \mathbb{N}}$ soit bornée quels que soient les choix de q et de F_0 .

On dit alors que le schéma numérique retenu est stable.

IV Équation de diffusion et marche aléatoire

Le déplacement d'une particule dans une direction donnée sous l'action des chocs avec les particules voisines peut se modéliser par des déplacements successifs à droite ou à gauche équiprobables, d'une quantité strictement positive δ , qui interviennent à intervalles de temps réguliers, le temps entre deux chocs étant égal à $\tau > 0$.

Une variable aléatoire est dite de Rademacher si elle est à valeurs dans $\{1, -1\}$ et si elle prend les valeurs 1 et -1 avec la même probabilité $1/2$.

Soit $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite de variables de Rademacher mutuellement indépendantes, définies sur un espace probabilisé $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$.

On note, pour tout entier $n \geq 1$, $S_n = \sum_{j=1}^n X_j$.

Ainsi, la variable aléatoire δS_n modélise la position de la particule au temps $n\tau$.

IV.A – Pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, on pose $Y_n = \frac{1}{2}(X_n + 1)$ et $Z_n = \sum_{j=1}^n Y_j$.

Soit $n \in \mathbb{N}^*$.

Q 35. Déterminer la loi de la variable aléatoire Y_n et celle de la variable aléatoire Z_n .

Soit k un entier tel que $-n \leq k \leq n$.

Q 36. Montrer que, si n et k ne sont pas de même parité, alors $\mathbb{P}(S_n = k) = 0$.

On rappelle que $\binom{n}{j}$ désigne le coefficient binomial « j parmi n ».

Q 37. Montrer que, si n et k sont de même parité, $\mathbb{P}(S_n = k) = \binom{n}{(k+n)/2} \frac{1}{2^n}$.

IV. B – Pour x réel, on note $\lfloor x \rfloor$ la partie entière de x .

Q 38. Pour tous réels $\delta > 0$ et $\tau > 0$, calculer $\mathbb{V}(\delta S_{\lfloor 1/\tau \rfloor})$, variance de la variable aléatoire $\delta S_{\lfloor 1/\tau \rfloor}$.

Q 39. Montrer que, pour tout réel δ , $\mathbb{V}(\delta S_{\lfloor 1/\tau \rfloor})$ est équivalent à $\frac{\delta^2}{\tau}$, lorsque τ tend vers 0 par valeurs supérieures.

Q 40. Pour tout $n \in \mathbb{N}^*$ et tout $k \in \mathbb{N}$, en posant $p_n(k) = \mathbb{P}(S_n = k)$, montrer que

$$\frac{p_{n+1}(k) - p_n(k)}{\tau} = \frac{\delta^2}{2\tau} \frac{p_n(k+1) - 2p_n(k) + p_n(k-1)}{\delta^2}$$

Q 41. En déduire une interprétation probabiliste de la condition de stabilité étudiée à la III.