

Principes de modélisation
Cours du bloc 1, mi-sept. à mi-nov. 2025
F. Legoll et L. Almeida

Frédéric Legoll
École Nationale des Ponts et Chaussées et Inria Paris,
6 et 8 avenue Blaise Pascal, 77455 Marne-La-Vallée Cedex 2, France
`frederic.legoll@enpc.fr`

Pages web du cours :
<https://www.ljll.fr/MathModel/enseignement/cours/101.html>
et
http://cermics.enpc.fr/~legoll/principes_modelisation.html

15 septembre 2025

L'objectif de ce cours est de passer en revue un certain nombre de modèles issus de divers domaines appliqués (sciences de l'ingénieur, biologie, écologie, ...) et de comprendre comment modéliser ces phénomènes grâce à des EDP. Il s'agit donc de faire le lien entre des phénomènes physiques fréquents dans les applications (diffusion, transport, croissance, ...) et la manière dont ceux-ci sont pris en compte dans un modèle mathématique. Nous présenterons les grandes classes de modèles en se concentrant sur des exemples simples et concrets.

Le cours se compose de quatre grandes parties d'importance similaire :

- La première partie (cf. le chapitre 1) est consacrée aux problèmes de diffusion, transport et réaction. Nous commencerons par l'origine microscopique (via le mouvement brownien) des phénomènes de diffusion (cf. la section 1.1). Ceci permettra d'obtenir l'équation de la chaleur, que nous étudierons en Section 1.2. Ecrire le noyau de Green de cette équation permettra de comprendre ses effets dissipatifs, régularisants, et l'existence d'une "flèche du temps". Nous verrons ensuite des problèmes de transport (ou d'advection, cf. la section 1.3). Cette première partie se terminera avec des exemples d'équations des ondes (en Section 1.4), et la mise en exergue des différences qualitatives entre ces modèles et les équations paraboliques telles que l'équation de la chaleur.
- La seconde partie est consacrée à des modèles pertinents pour des applications en biologie, écologie et épidémiologie. Nous commencerons par considérer des modèles simples de dynamique des populations (sous forme d'équations différentielles ordinaires) et construirons successivement des modèles plus complexes pour pouvoir prendre en compte des façons d'intervenir sur les systèmes considérés (thérapies, vaccination, introduction de prédateurs auxiliaires ou libération d'insectes stériles, ...). Cette partie est couverte par d'autres notes de cours.
- La troisième partie du cours est consacrée à la physique du continuum (cf. le chapitre 3), en commençant par la notion de bilan physique (lois de conservation, dans le chapitre 2). On discutera en particulier la conservation de quantités physiques telles que la masse, la quantité de mouvement ou l'énergie (Section 3.2). On s'intéressera ensuite à divers éléments de mécanique des fluides : lois constitutives (avec en particulier l'exemple des fluides Newtoniens en Section 3.4), adimensionalisation, régimes (nombre de Mach, nombre de Reynolds, système de Stokes), et éventuellement conditions aux limites (lois de paroi, ...). Dans cette partie du cours, on étudiera aussi divers éléments de mécanique des solides (en Section 3.5) : tenseur des déformations et des contraintes, élasticité, modèles avec coefficients aléatoires (pourquoi, comment?).
- Dans la quatrième partie (cf. le chapitre 4), on abordera les modèles à l'échelle atomique, qui s'écrivent, dans un premier temps, sous la forme d'équations différentielles ordinaires, les équations de Newton. Nous verrons plusieurs formalismes (lagrangien, hamiltonien, ...) pour décrire ces équations. Nous montrerons comment l'introduction du formalisme de Liouville permet de prendre en compte les effets extérieurs, ce qui nous

permettra d'aller vers les équations différentielles stochastiques (équations de Langevin) et les modèles cinétiques.

Plusieurs aspects de modélisation seront discutés tout au long du cours :

- signification (en terme de modélisation) des différents termes des équations et des conditions aux limites ;
- réduction de modèles, passage d'un modèle à un autre dans certains régimes : en mécanique des fluides (équations de Saint-Venant, du système de Stokes à l'équation de Darcy – en Section 3.4.2 –, lois de paroi effectives, ...), en mécanique des solides (passage d'une modélisation atomistique à une modélisation de continuum), ... ;
- modélisation multi-physique, couplant différents modèles pouvant éventuellement être écrits dans des langages différents (interaction fluide-structure, ...).

Les séances de cours du matin seront complétées, l'après-midi, par des séances plus applicatives, incluant exercices, études de schémas numériques ayant des propriétés qualitatives proches de celles des équations exactes, et illustrations numériques. En fonction de l'avancée du cours, les séances pourront être complétées par des interventions extérieurs, au cours desquelles des spécialistes de domaines particuliers non abordés dans le coeur du cours (mécanique quantique, modélisation du sous-sol, modèles cinétiques et application à la fusion nucléaire, ...) viendront présenter les aspects modélisation pertinents de leur discipline.

Sur le plan mathématique, on supposera que le lecteur connaît la théorie de base des EDP linéaires : espaces de Lebesgue, espaces de Sobolev, inégalités de Poincaré, écriture de la formulation variationnelle d'une EDP, théorème de Lax-Milgram. On pourra par exemple consulter [4] pour quelques rappels à ce sujet.

Pour toute la suite, d désigne la dimension d'espace. Dans la plupart des problèmes issus des sciences de l'ingénieur, notamment en mécanique et en thermique, le cas pertinent est $d = 3$ (ou $d = 2$ ou $d = 1$ si le modèle suppose certaines simplifications géométriques), mais on rencontre également des problèmes formulés en grande dimension, par exemple en mécanique quantique, en physique statistique ou en finance. Ces domaines ne seront pas abordés ici.

Ces notes de cours sont inspirées de diverses notes de cours écrites par plusieurs collègues, Eric Cancès, Virginie Ehrlacher, Alexandre Ern et Mathieu Lewin. Je leur dois beaucoup. Je remercie aussi Simon Ruget pour sa relecture attentive de ces notes.

Table des matières

1	Phénomènes de diffusion	7
1.1	Origine de la diffusion - Mouvement brownien	7
1.1.1	Marche aléatoire en 1D	7
1.1.2	Passage à la limite	8
1.1.3	Expressions exactes	10
1.1.4	Propagation à vitesse infinie	12
1.1.5	Le cas multi-dimensionnel	12
1.2	Equation de la chaleur	14
1.2.1	Equation de la chaleur dans tout l'espace	15
1.2.1.1	Solution fondamentale	16
1.2.1.2	Solution homogène	19
1.2.1.3	Solution avec second membre	21
1.2.2	Equation de la chaleur en domaine borné	22
1.2.2.1	Modélisation pour la condition aux limites	22
1.2.2.2	Propriétés qualitatives	23
1.2.2.3	Approche spectrale	26
1.2.2.4	Schémas numériques	28
1.3	Equation de transport	32
1.3.1	Problème continu	33
1.3.2	Schémas numériques	34
1.4	Equation des ondes	37
1.4.1	Equation des ondes dans tout l'espace	38
1.4.1.1	Le cas mono-dimensionnel	38
1.4.1.2	Le cas multi-dimensionnel	42
1.4.2	L'équation des ondes dans un ouvert borné	42
1.4.2.1	Approche spectrale	43
1.4.2.2	Propriétés qualitatives	44
1.4.2.3	Illustration numérique	45
2	Lois de conservation	47
2.1	Lois de conservation scalaires	47
2.1.1	Transport de soluté	48
2.1.2	Trafic routier	50
2.2	Systèmes de lois de conservation	52

3	Mécanique des milieux continus	53
3.1	Formalismes lagrangien et eulérien	53
3.2	Conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie	54
3.2.1	Formalisme lagrangien	54
3.2.2	Formalisme eulérien	54
3.2.2.1	Conservation de la masse	54
3.2.2.2	Conservation de la quantité de mouvement	55
3.2.2.3	Conservation de l'énergie	58
3.2.2.4	Récapitulatif	59
3.3	Lois constitutives	60
3.4	Fluides newtoniens	61
3.4.1	Fluides newtoniens incompressibles	62
3.4.2	De Stokes à Darcy	64
3.4.3	Fluides parfaits compressibles	67
3.5	Elasticité linéaire	68
3.5.1	Elastodynamique	68
3.5.2	Equilibre élastique	70
3.5.3	Module d'Young et coefficient de Poisson (et leur interprétation)	73
4	Système de particules en interaction	75
4.1	Principe de moindre action	75
4.2	Formulation hamiltonienne	77
4.3	Formulation liouvillienne	78
4.4	Système de particules	79
5	Compléments mathématiques	81
5.1	Equation de transport	81
5.1.1	Problème homogène (condition initiale non régulière)	81
5.1.2	Problème non homogène (condition initiale régulière)	84
6	Rappels	87
6.1	Transformée de Fourier	87
6.2	Diagonalisation des opérateurs auto-adjoints compacts	87
6.2.1	Résultats généraux	87
6.2.2	Application au laplacien	88
7	Pour aller plus loin	91

Chapitre 1

Phénomènes de diffusion

Les phénomènes de diffusion présentent une importance considérable dans de nombreuses applications des sciences de l'ingénieur. L'objectif de ce chapitre est d'une part d'éclairer l'origine microscopique de la diffusion à travers la notion de mouvement brownien et d'autre part de présenter deux exemples prototypes d'équations aux dérivées partielles où interviennent les phénomènes de diffusion : l'équation de la chaleur et l'équation d'advection–diffusion.

1.1 Origine de la diffusion - Mouvement brownien

1.1.1 Marche aléatoire en 1D

Considérons pour commencer un exemple simple. Fixons deux réels strictement positifs Δt et Δx et considérons une particule évoluant sur la droite réelle selon la règle suivante : à $t = 0$, la particule est en $x = 0$, et à chaque instant $(n + 1/2) \Delta t$ la particule fait un saut de Δx à gauche ou à droite, avec probabilité $1/2$ d'aller à gauche et $1/2$ d'aller à droite. Dans le langage des probabilités, une telle dynamique est appelée une chaîne de Markov.

On note X_n la position au temps $n \Delta t$ de la particule (pour les paramètres Δt et Δx choisis). On a donc

$$X_{n+1} = X_n + \xi_n \Delta x, \quad X_0 = 0, \quad (1.1)$$

où ξ_n est une variable aléatoire prenant les valeurs ± 1 avec la même probabilité $1/2$: les variables aléatoires ξ_n sont indépendantes, identiquement distribuées et $\mathbb{P}(\xi_n = 1) = \mathbb{P}(\xi_n = -1) = 1/2$.

Il est facile de calculer l'espérance de X_n : en utilisant que $\mathbb{E}[\xi_n] = 0$, on a

$$\mathbb{E}[X_{n+1}] = \mathbb{E}[X_n] + \mathbb{E}[\xi_n] \Delta x = \mathbb{E}[X_n].$$

Par ailleurs, on a bien sûr $\mathbb{E}[X_0] = 0$. On obtient donc que $\mathbb{E}[X_n] = 0$: en moyenne, à tous les instants, la particule est à l'origine.

On peut aussi facilement calculer la variance de X_n :

$$\begin{aligned} \mathbb{V}[X_{n+1}] &= \mathbb{E}[(X_{n+1} - \mathbb{E}[X_{n+1}])^2] = \mathbb{E}[X_{n+1}^2] = \mathbb{E}[(X_n + \xi_n \Delta x)^2] \\ &= \mathbb{E}[(X_n)^2] + 2 \Delta x \mathbb{E}[X_n \xi_n] + (\Delta x)^2 \mathbb{E}[\xi_n^2], \end{aligned}$$

où on a utilisé à la deuxième égalité le résultat précédent, à savoir que $\mathbb{E}[X_{n+1}] = 0$. On a systématiquement $\xi_n^2 = 1$, donc

$$\mathbb{V}[X_{n+1}] = \mathbb{V}[X_n] + 2 \Delta x \mathbb{E}[X_n \xi_n] + (\Delta x)^2.$$

Par ailleurs, la variable aléatoire ξ_n , utilisée dans (1.1) pour passer de l'itération n à l'itération $n+1$, est indépendante de X_n . Donc $\mathbb{E}[X_n \xi_n] = \mathbb{E}[X_n] \mathbb{E}[\xi_n] = 0$, et donc

$$\mathbb{V}[X_{n+1}] = \mathbb{V}[X_n] + (\Delta x)^2,$$

ce qui donne

$$\mathbb{V}[X_n] = n (\Delta x)^2. \quad (1.2)$$

Au bout de n itérations (i.e. au temps $n \Delta t$), en moyenne, la particule s'est donc écartée de sa position initiale de la distance $\sqrt{n} \Delta x$. C'est un comportement complètement différent de celui d'une particule se déplaçant à vitesse constante : dans cette situation, au bout de n itérations, la particule s'est écartée de sa position initiale d'une distance proportionnelle à n , et non pas à \sqrt{n} .

1.1.2 Passage à la limite

Dans la suite, on va considérer la limite où les paramètres Δt et Δx tendent vers 0. Considérons un temps t fixé : à cet instant, au vu de (1.2), l'excursion moyenne de la particule est

$$\sqrt{\mathbb{V}[X_{t/\Delta t}]} = \Delta x \sqrt{\frac{t}{\Delta t}}. \quad (1.3)$$

Pour obtenir une limite non triviale, il va donc être nécessaire d'imposer que le rapport $(\Delta x)^2/\Delta t$ garde une valeur constante (on pourrait bien sûr se contenter de faire tendre ce rapport vers une certaine limite non nulle, mais on se place délibérément ici dans le cas le plus simple). On choisira donc dans la suite de travailler sous l'hypothèse que Δx et Δt sont reliés par

$$\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} = \alpha \quad (1.4)$$

pour une certaine constante $\alpha > 0$.

Remarque 1. *Ce scaling est dit scaling diffusif. On pourra remarquer qu'il est fondamentalement différent du scaling dit hyperbolique, qui consiste à prendre*

Δt et Δx proportionnels (et qui est motivé par l'idée que, pendant le temps Δt , la particule parcourt une distance proportionnelle à Δt).

Ici, Δx est proportionnel à $\sqrt{\Delta t} \gg \Delta t$. Pendant le temps Δt , et sous l'hypothèse que la particule aille à droite, la particule parcourt une grande distance. Ceci s'explique par le fait que la particule peut aller à droite ou à gauche : dans chaque direction, il faut que le déplacement soit relativement important pour aboutir, en moyenne, à un déplacement non nul.

Pour la suite, notons $P(n, k)$ la probabilité de présence de la particule à l'instant $n \Delta t$ au point $k \Delta x$ (cette fonction P est bien sûr paramétrée par Δt et Δx , paramétrisation que nous ne notons pas explicitement pour ne pas alourdir les notations). Il est facile de voir que

$$P(n+1, k) = \frac{1}{2}(P(n, k-1) + P(n, k+1)), \quad (1.5)$$

puisque la particule ne peut être en $k \Delta x$ à l'instant $(n+1)\Delta t$ que

- si elle était en $(k-1) \Delta x$ à l'instant $n \Delta t$ (ce qui arrive avec la probabilité $P(n, k-1)$) et qu'elle a fait un saut à droite (ce qui arrive avec une probabilité $1/2$),
- ou bien qu'elle était en $(k+1) \Delta x$ à l'instant $n \Delta t$ (événement de probabilité $P(n, k+1)$) et qu'elle a fait un saut à gauche (ce qui arrive aussi avec une probabilité $1/2$).

On a donc

$$\begin{aligned} \frac{P(n+1, k) - P(n, k)}{\Delta t} &= \frac{1}{2} \frac{P(n, k-1) + P(n, k+1) - 2P(n, k)}{\Delta t} \\ &= \frac{\alpha}{2} \frac{P(n, k-1) + P(n, k+1) - 2P(n, k)}{(\Delta x)^2}, \end{aligned} \quad (1.6)$$

où la dernière égalité est obtenue en utilisant le scaling diffusif (1.4).

On souhaite maintenant introduire la notion de densité de probabilité $u(t, x)$ de présence de la particule. On rappelle que, par définition, la probabilité de trouver à l'instant t la particule dans l'ouvert B est $\int_B u(t, x) dx$ (pour tout instant t et pour tout ouvert B de \mathbb{R}). Pour le modèle discret en temps et en espace qu'on vient de présenter, on choisit de définir, à l'instant $t = n \Delta t$, la fonction $u(t, \cdot)$ comme une fonction constante par morceaux sur les intervalles $((k-1/2) \Delta x, (k+1/2) \Delta x)$, avec

$$\forall x \in ((k-1/2) \Delta x, (k+1/2) \Delta x), \quad \Delta x u(t, x) = P\left(\frac{t}{\Delta t}, k\right) = P(n, k). \quad (1.7)$$

On peut donc écrire de manière approchée

$$\Delta x u(t, x) \approx P\left(\frac{t}{\Delta t}, \frac{x}{\Delta x}\right).$$

La fonction u , comme la fonction P , est paramétrée par Δt et Δx , paramétrisation que nous ne notons pas explicitement pour ne pas alourdir les notations.

On déduit de (1.6) et de (1.7) que

$$\begin{aligned} \frac{u(t + \Delta t, x) - u(t, x)}{\Delta t} &= \frac{P\left(\frac{t}{\Delta t} + 1, \frac{x}{\Delta x}\right) - P\left(\frac{t}{\Delta t}, \frac{x}{\Delta x}\right)}{\Delta t \Delta x} \\ &= \frac{\alpha}{2} \frac{P\left(\frac{t}{\Delta t}, \frac{x}{\Delta x} - 1\right) + P\left(\frac{t}{\Delta t}, \frac{x}{\Delta x} + 1\right) - 2P\left(\frac{t}{\Delta t}, \frac{x}{\Delta x}\right)}{(\Delta x)^2 \Delta x} \\ &= \frac{\alpha}{2} \frac{u(t, x - \Delta x) + u(t, x + \Delta x) - 2u(t, x)}{(\Delta x)^2}. \end{aligned} \quad (1.8)$$

On peut maintenant (formellement) passer à la limite Δt et Δx vers 0 dans le schéma aux différences finies (1.8), et on obtient que u (ou plus précisément la limite de la fonction $u_{\Delta t, \Delta x}$ lorsque Δt et Δx tendent vers 0 en satisfaisant (1.4)) satisfait l'équation

$$\partial_t u = \frac{\alpha}{2} \partial_{xx} u, \quad (1.9)$$

qui est la version mono-dimensionnelle de l'équation de la chaleur.

1.1.3 Expressions exactes

Il est en fait possible¹ d'obtenir (par dénombrement) une expression exacte pour $P(n, k)$. On se donne ensuite un maillage $\{k \Delta x, k \in \mathbb{Z}\}$ de la droite réelle, auquel est associé un pas de temps Δt par (1.4). On note P la fonction associée à ces paramètres Δt et Δx , et on introduit la fonction $u_{\Delta x}$, définie pour tout $(t, x) \in (0, \infty) \times \mathbb{R}$ de la manière suivante :

— $u_{\Delta x}(t, x)$ est une fonction constante par morceaux, sur les pavés

$$((n - 1/2) \Delta t, (n + 1/2) \Delta t) \times ((k - 1/2) \Delta x, (k + 1/2) \Delta x)$$

centrés en $(n \Delta t, k \Delta x)$

— guidé par (1.7), on pose $\Delta x u_{\Delta x}(n \Delta t, k \Delta x) = P(n, k)$.

On a alors le résultat suivant, qu'on admet :

Lemme 2. *La fonction $u_{\Delta x}(t, \cdot)$ converge (lorsque $\Delta x \rightarrow 0$, et au sens des distributions) vers la fonction u définie par*

$$u(t, x) = p_{\alpha t}(x), \quad (1.10)$$

où on rappelle que $p_{\sigma^2}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$ est la densité de probabilité d'une variable aléatoire gaussienne centrée et de variance σ^2 .

Ce résultat est consistant avec les résultats précédents. En effet :

1. travail laissé en exercice

Lemme 3. *La fonction u définie par (1.10) est bien solution de (1.9).*

Démonstration. On remarque déjà que u définie par (1.10) est $C^\infty(]0, \infty[\times \mathbb{R}^d)$, donc on peut dériver au sens des distributions en dérivant simplement de manière usuelle. On calcule donc

$$\begin{aligned} \partial_t u &= -\frac{1}{2t^{3/2}} \sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\alpha t}\right) + \sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha t}} \frac{x^2}{2\alpha t^2} \exp\left(-\frac{x^2}{2\alpha t}\right) \\ &= \sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha t}} \left(\frac{x^2}{2\alpha t^2} - \frac{1}{2t}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2\alpha t}\right). \end{aligned}$$

Par ailleurs, on calcule

$$\partial_x u = -\sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha t}} \frac{x}{\alpha t} \exp\left(-\frac{x^2}{2\alpha t}\right),$$

et donc

$$\partial_{xx} u = \sqrt{\frac{1}{2\pi\alpha t}} \left(\frac{x^2}{\alpha^2 t^2} - \frac{1}{\alpha t}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2\alpha t}\right),$$

ce qui montre bien que (1.9) est satisfaite. \square

On peut aussi vérifier la consistance avec les premiers calculs. Par définition de P , on a

$$\mathbb{E}[X_n] = \sum_{k=-n}^n (k\Delta x) P(n, k) = 0,$$

où la dernière relation vient de la parité de $P(n, \cdot)$. Ceci est consistant avec le résultat obtenu plus haut. De même,

$$\mathbb{V}[X_n] = \mathbb{E}[X_n^2] = \sum_{k=-n}^n (k\Delta x)^2 P(n, k) = \Delta x \sum_{k=-n}^n (k\Delta x)^2 u(n\Delta t, k\Delta x)$$

et par conséquent

$$\mathbb{V}[X_{t/\Delta t}] \approx \int_{\mathbb{R}} x^2 u(t, x) dx = \int_{\mathbb{R}} x^2 p_{\alpha t}(x) dx = \alpha t.$$

Grâce au lemme 2, on a confondu, dans l'intégrale, la fonction $u_{\Delta x}$ (obtenue avec les paramètres Δx et Δt) avec la fonction u (en toute rigueur, on ne peut pas appliquer le lemme 2 tel quel, car la fonction $\varphi(x) = x^2$ n'est pas $C_c^\infty(\mathbb{R})$; il faudrait donc généraliser ce lemme, exercice qu'on laisse en dehors de ces notes de cours). On retrouve bien le résultat (1.3) disant que $\mathbb{V}[X_{t/\Delta t}] \approx \alpha t$.

1.1.4 Propagation à vitesse infinie

Dans notre modèle, à l'instant initial, la particule est en $X_0 = 0$. On a ainsi $P(n = 0, k) = 1$ si $k = 0$ et $P(n = 0, k) = 0$ sinon. Pour ce qui est de la densité de probabilité u définie par (1.10), on peut voir que $u(t, \cdot)$ converge (au sens des distributions) vers la masse de Dirac δ_0 lorsque $t \rightarrow 0$.

Pour tout $t > 0$, on constate que $u(t, x) > 0$ pour tout $x \in \mathbb{R}$: la densité u charge tout \mathbb{R} , ce qui donne à penser que, pour tout instant $t > 0$, la particule peut occuper n'importe quel point de la droite réelle.

Ceci est consistant avec la modélisation initiale. On a vu que, au temps $n \Delta t$, la particule pouvait atteindre toutes les positions $k \Delta x$ avec $k \in [-n, n]$. Par définition de u , pour tout $t > 0$ et $x \in \mathbb{R}$,

$$\Delta x u(t, x) \approx P\left(\frac{t}{\Delta t}, \frac{x}{\Delta x}\right) = P\left(\frac{\alpha t}{(\Delta x)^2}, \frac{x}{\Delta x}\right),$$

où on a utilisé le scaling diffusif (1.4) dans la dernière égalité. Dans le régime Δx petit (et avec x et t fixés), on voit donc que $n := \frac{\alpha t}{(\Delta x)^2} \gg \frac{|x|}{\Delta x} =: k$. On est bien dans la région $k \in [-n, n]$, et même en fait dans la région $|k| \ll n$. On a donc bien $P(n, k) > 0$. Pour poursuivre le raisonnement, il faudrait vérifier que, dans la limite $\Delta x \rightarrow 0$, cette quantité reste strictement positive (et ne converge pas vers 0). Le calcul mené à la section 1.1.3 permet en fait de répondre à cette question.

Dans le cadre de la modélisation par équations aux dérivées partielles, on reviendra à cette propriété ci-dessous (cf. le théorème 14).

1.1.5 Le cas multi-dimensionnel

On peut généraliser les calculs précédents au cas multi-dimensionnel, en considérant une particule sur le réseau $\Delta x \mathbb{Z}^d$. En se plaçant pour simplifier en dimension $d = 2$ (l'important est de comprendre comment passer de $d = 1$ à $d = 2$, le passage de $d = 2$ à $d \geq 3$ étant plus simple), on suppose donc que la particule se déplace de Δx vers la droite, vers la gauche, vers le haut ou vers le bas, les 4 mouvements étant équiprobables (et donc de probabilité $1/4$).

Il est facile de voir (par la même raisonement que pour aboutir à (1.5)) que

$$\begin{aligned} & P(n+1, k_1, k_2) \\ &= \frac{P(n, k_1 - 1, k_2) + P(n, k_1 + 1, k_2) + P(n, k_1, k_2 - 1) + P(n, k_1, k_2 + 1)}{4}. \end{aligned}$$

On a donc

$$\begin{aligned} & P(n+1, k_1, k_2) - P(n, k_1, k_2) \\ &= \frac{P(n, k_1 - 1, k_2) + P(n, k_1 + 1, k_2) - 2P(n, k_1, k_2)}{4} \\ & \quad + \frac{P(n, k_1, k_2 - 1) + P(n, k_1, k_2 + 1) - 2P(n, k_1, k_2)}{4}. \end{aligned} \tag{1.11}$$

On introduit la densité de probabilité de présence $u(t, x_1, x_2)$ de la particule à l'instant $t > 0$ au point (x_1, x_2) de \mathbb{R}^2 : comme dans le cas mono-dimensionnel, c'est une fonction constante par morceaux en temps et en espace, et qui est reliée à la fonction P par

$$(\Delta x)^2 u(t, x_1, x_2) = P(n, k_1, k_2)$$

dans le pavé $(t, x_1, x_2) \in ((n - 1/2) \Delta t, (n + 1/2) \Delta t) \times ((k_1 - 1/2) \Delta x, (k_1 + 1/2) \Delta x) \times ((k_2 - 1/2) \Delta x, (k_2 + 1/2) \Delta x)$. On a donc à nouveau

$$(\Delta x)^2 u(t, x_1, x_2) \approx P\left(\frac{t}{\Delta t}, \frac{x_1}{\Delta x}, \frac{x_2}{\Delta x}\right).$$

On approche le schéma discret (1.11) par

$$\Delta t \partial_t u = \frac{(\Delta x)^2 \partial_{x_1 x_1} u}{4} + \frac{(\Delta x)^2 \partial_{x_2 x_2} u}{4} = \frac{(\Delta x)^2}{4} \Delta u,$$

où Δu est bien sûr le laplacien de u , qu'on ne confondra pas avec la notation Δx du pas d'espace. Avec à nouveau un scaling diffusif qu'on choisit (comparer avec (1.4)) sous la forme $(\Delta x)^2 / (2\Delta t) = \alpha$, on obtient

$$\partial_t u = \frac{\alpha}{2} \Delta u, \tag{1.12}$$

équation qui est bien sûr la version multi-dimensionnelle de (1.9).

Remarque 4. *La discussion menée ici possède une origine historique². Le savant néerlandais Anthony van Leeuwenhoek (1632-1723) a été le premier à observer, à l'aide d'un microscope, le mouvement irrégulier et désordonné de petits grains en suspension dans l'eau. En 1785, Jan Ingenhousz (1730-1799), médecin, botaniste et chimiste britannique d'origine néerlandaise, a décrit le mouvement irrégulier de la poussière de charbon à la surface de l'alcool. On peut postuler qu'il fut l'un des premiers à découvrir ce qu'on appelle aujourd'hui le mouvement brownien.*

En 1827, le botaniste écossais Robert Brown (1773-1858), en immergeant dans un liquide au repos des grains de pollen, remarqua le même comportement désordonné. Il observa au microscope de minuscules particules de quelques micromètres décrivant à la surface du liquide des trajectoires apparemment erratiques. Il utilisa les grains de pollen car ils contenaient des particules oblongues ayant une forme allongée plus longue que large. Brown était particulièrement passionné par les pollens et il croyait pouvoir suivre leur progression durant la fertilisation. Il pensait que ce mouvement était causé par un fluide vital provenant de l'intérieur des grains de pollen. En apprenant qu'Ingenhousz avait observé le même comportement pour la poussière de charbon, Brown renonça à son hypothèse du fluide vital et il réussit à montrer que ce mouvement chaotique se produisait également avec des grains de matière inerte. En 1828, Brown publia ses résultats dans un article de la revue "The Edinburgh Journal of Science".

² cf. le site <https://accromath.uqam.ca/2023/01/le-mouvement-brownien-du-pollen-de-brown-a-lorigine-de-la-finance-moderne/>

Le résultat suivant généralise le lemme 3 :

Lemme 5. *La fonction u définie par*

$$u(t, x) = p_{\alpha t}(x_1) \times \cdots \times p_{\alpha t}(x_d) = \frac{1}{(2\pi \alpha t)^{d/2}} \exp\left(-\frac{x \cdot x}{2 \alpha t}\right) \quad (1.13)$$

est bien solution de (1.12).

Démonstration. On a en effet

$$\begin{aligned} \partial_t u &= -\frac{d}{2t^{1+d/2}} \frac{1}{(2\pi \alpha)^{d/2}} \exp\left(-\frac{x \cdot x}{2 \alpha t}\right) + \frac{1}{(2\pi \alpha t)^{d/2}} \frac{x \cdot x}{2 \alpha t^2} \exp\left(-\frac{x \cdot x}{2 \alpha t}\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi \alpha t)^{d/2}} \left(\frac{x \cdot x}{2 \alpha t^2} - \frac{d}{2t}\right) \exp\left(-\frac{x \cdot x}{2 \alpha t}\right). \end{aligned}$$

Par ailleurs, on calcule, pour tout $1 \leq j \leq d$,

$$\partial_{x_j} u = -\frac{1}{(2\pi \alpha t)^{d/2}} \frac{x_j}{\alpha t} \exp\left(-\frac{x \cdot x}{2 \alpha t}\right),$$

et donc

$$\partial_{x_j x_j} u = \frac{1}{(2\pi \alpha t)^{d/2}} \left(\frac{x_j^2}{\alpha^2 t^2} - \frac{1}{\alpha t}\right) \exp\left(-\frac{x \cdot x}{2 \alpha t}\right),$$

ce qui entraîne, en sommant sur les j , que

$$\Delta u = \frac{1}{(2\pi \alpha t)^{d/2}} \left(\frac{x \cdot x}{\alpha^2 t^2} - \frac{d}{\alpha t}\right) \exp\left(-\frac{x \cdot x}{2 \alpha t}\right).$$

Ceci montre bien que (1.12) est satisfaite. \square

1.2 Equation de la chaleur

Motivé en particulier par le raisonnement ayant abouti à l'équation (1.12), on considère ici le problème suivant. Etant donné une fonction $f : [0, +\infty[\times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, on cherche une fonction du temps et de l'espace, $u : [0, +\infty[\times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, telle que

$$\partial_t u - \Delta u = f. \quad (1.14)$$

L'équation (1.14) intervient par exemple dans la modélisation des transferts thermiques : l'inconnue u représente une température et la donnée f une puissance volumique fournie au système (ou absorbée si $f < 0$). Cette interprétation physique a conféré son nom à l'équation (1.14), qui est communément appelée *équation de la chaleur*.

On complètera ci-dessous l'équation (1.14) par des conditions aux limites. Imposer $u = 0$ sur le bord du domaine (condition de Dirichlet homogène) exprime le fait que la température est maintenue égale à zéro sur ce bord. Imposer $n \cdot \nabla u = 0$ sur le bord du domaine (condition de Neumann homogène) exprime

le fait que le flux thermique est nul sur le bord du domaine (ce qui revient à dire que la paroi du domaine est isolante).

Dans la section 1.1, on a obtenu (1.14) dans un autre contexte. A l'échelle continue, $u(t, \cdot)$ représente la densité de probabilité de la particule à l'instant t . On peut comprendre le problème comme la modélisation d'une unique particule, ou bien comme la modélisation d'un ensemble constitué d'un grand nombre de particules indépendantes les unes des autres. On peut alors comprendre $u(t, x)$ comme la concentration (notion physique proche de celle de distribution statistique) des particules à l'instant t et au point macroscopique x . Cet exemple est à rapprocher du problème consistant à modéliser comment un polluant peut diffuser dans son environnement (ou comment une goutte d'encre peut diffuser dans de l'eau ou sur du papier).

L'équation de la chaleur intervient dans la modélisation de nombreux phénomènes physiques (au delà de ceux évoqués ci-dessus) car elle résulte de la combinaison

- d'une loi de conservation (cette notion sera largement revue au chapitre 2, dont elle formera la notion principale!) sous la forme

$$\partial_t u + \operatorname{div} q(\nabla u) = f,$$

où $q : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ est le flux de la variable conservative u (on pourra par exemple penser au flux de chaleur);

- et d'une loi phénoménologique de la forme

$$q(\nabla u) = -k\nabla u,$$

où $k > 0$ est un réel donné; on pourra par exemple penser à la loi de Fourier (reliant le flux thermique à la température) où k représente la conductivité thermique et u la température, à la loi de Fick (reliant le flux de particules à la concentration), ...

En combinant ces deux équations et en supposant que $k = 1$ (quitte à changer l'échelle de longueur ou l'échelle de temps), on récupère l'équation (1.14).

Nous allons poursuivre notre étude en commençant par le cas simple où l'équation est posée dans tout l'espace, avant de traiter le cas d'une équation posée sur un domaine borné (nous n'aborderons pas le cas de l'équation de la chaleur posé sur un domaine non borné différent de \mathbb{R}^d).

1.2.1 Equation de la chaleur dans tout l'espace

L'avantage de travailler dans tout l'espace est de ne pas avoir à satisfaire de conditions aux limites (qui sont en fait encodées dans l'espace fonctionnel dans lequel on travaille), et de pouvoir utiliser la transformée de Fourier (quelques rappels à ce sujet sont rassemblés au chapitre 6).

1.2.1.1 Solution fondamentale

On a déjà identifié une solution particulière de l'équation de la chaleur (1.14) en l'absence de second membre. En effet, le lemme 5 indique que la fonction

$$G(t, x) = \frac{1}{(4\pi t)^{d/2}} \exp\left(-\frac{x \cdot x}{4t}\right) \quad (1.15)$$

est bien solution de l'équation homogène associée à (1.14), au sens où $\partial_t G - \Delta G = 0$.

On peut en fait retrouver ce résultat en utilisant la transformée de Fourier, qui est définie, pour toute fonction $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$, par

$$\mathcal{F}(f)(k) = \widehat{f}(k) = \int_{\mathbb{R}^d} f(x) e^{-ik \cdot x} dx. \quad (1.16)$$

On rappelle que la notion de transformée de Fourier s'étend aux fonctions $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$ (attention, dans ce cas, \widehat{f} est définie de manière "abstraite", par dualité, et la formule (1.16) ci-dessus n'est pas valable). On rappelle une propriété fondamentale de la transformée de Fourier :

$$\forall 1 \leq j \leq d, \quad \widehat{\partial_{x_j} f}(k) = ik_j \widehat{f}(k).$$

Soit maintenant G solution de $\partial_t G - \Delta G = 0$. On note $\widehat{G}(t, \cdot)$ la transformée de Fourier (en espace) de $G(t, \cdot)$. On trouve donc que \widehat{G} doit résoudre l'équation

$$\partial_t \widehat{G}(t, k) + |k|^2 \widehat{G}(t, k) = 0, \quad (1.17)$$

équation qui se résout analytiquement et dont la solution est

$$\widehat{G}(t, k) = C e^{-t|k|^2}. \quad (1.18)$$

Remarque 6. *A ce stade, on pourrait considérer l'expression $\widehat{G}(t, k) = C_k e^{-t|k|^2}$ pour une "constante" C_k dépendant de k . Seule la condition initiale permet en fait de fixer cette constante d'intégration. On choisit C constant (i.e. indépendant de k) car cela conduit à une solution particulièrement utile pour la suite.*

On peut revenir dans les variables d'espace, en invoquant la transformée de Fourier inverse et le fait que, pour les fonctions f telles que $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$ et $\widehat{f} \in L^1(\mathbb{R}^d)$, on a

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \widehat{f}(k) e^{ik \cdot x} dk.$$

Le calcul d'une transformée de Fourier est particulièrement simple dans le cas de fonctions gaussiennes : pour tout $\beta > 0$,

$$\text{si } f(x) = \exp(-\beta|x|^2), \text{ alors } \widehat{f}(k) = (\pi/\beta)^{d/2} e^{-|k|^2/(4\beta)}. \quad (1.19)$$

Exercice 7. *Prouver le résultat (1.19). Indication : une bonne manière est de se placer en dimension un d'espace, d'identifier l'équation différentielle ordinaire dont $k \mapsto \widehat{f}(k)$ est solution (en dérivant sous l'intégrale) et de résoudre cette équation.*

On voit donc que les fonctions gaussiennes sont des fonctions dans $L^1(\mathbb{R}^d)$ et telles que leur transformée de Fourier est aussi dans $L^1(\mathbb{R}^d)$ (l'ensemble mentionné ci-dessus n'est donc pas vide!). Puisque la fonction $k \mapsto \widehat{G}(t, k)$ est gaussienne, on déduit facilement que

$$G(t, x) = \frac{1}{(2\pi)^d} \mathcal{F}\left(\widehat{G}(t, \cdot)\right)(-x) = \frac{C}{(2\pi)^d} (\pi/t)^{d/2} e^{-|x|^2/(4t)}.$$

En prenant $C = 1$, on obtient

$$G(t, x) = \frac{1}{(4\pi t)^{d/2}} \exp\left(-\frac{|x|^2}{4t}\right),$$

et on retrouve bien la formule (1.15) précédente. La constante C a été choisie de telle manière à ce que

$$\forall t > 0, \quad \int_{\mathbb{R}^d} G(t, x) dx = 1,$$

en utilisant la normalisation de la densité Gaussienne. On peut aussi argumenter en disant que $\widehat{G}(t, 0) = \int_{\mathbb{R}^d} G(t, x) dx$. Imposer la normalisation de $G(t, \cdot)$ revient donc à demander que $\widehat{G}(t, 0) = 1$, ce qui impose $C = 1$ au vu de (1.18).

Au temps initial, on voit que $\widehat{G}(t = 0, k) = 1$ pour tout $k \in \mathbb{R}^d$, donc $G(t, \cdot)$ est égal à la distribution δ_0 (se rappeler que la transformée de Fourier de δ_0 est la fonction identiquement égale à 1). Ceci est consistant avec le fait que $G(t, \cdot)$ converge lorsque $t \rightarrow 0$, au sens des distributions, vers la masse de Dirac δ_0 (fait signalé en section 1.1.4).

Par ailleurs, on remarque que G n'est bien définie que lorsque $t > 0$. Lorsque $t < 0$, la fonction $k \mapsto \widehat{G}(t, k)$ n'est pas dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, et tout le calcul précédent s'effondre. L'expression ci-dessus de G perd aussi son sens, puisqu'elle fait appel à \sqrt{t} . On voit donc apparaître dès maintenant une propriété importante de l'équation de la chaleur : la *non-réversibilité*. La solution n'est définie que pour les temps futurs (c'est-à-dire $t \geq 0$ si la condition initiale est donnée en $t = 0$).

Remarque 8. *La notion de non-réversibilité est une notion souhaitée pour l'équation. Elle est directement liée à un principe physique, qui est le second principe de la thermodynamique (lequel explique par exemple pourquoi, dans une pièce isolée, la température s'uniformise, alors que le premier principe de la thermodynamique, principe de conservation d'énergie, n'impose pas ceci, mais simplement que la température moyenne demeure constante).*

La fonction G que nous venons de construire est appelée solution fondamentale de l'équation de la chaleur, au sens où elle vérifie (formellement)

$$\begin{cases} \partial_t G - \Delta G = 0, & t > 0, \\ G(0) = \delta_0. \end{cases} \quad (1.20)$$

Remarque 9. Une autre façon de trouver la fonction G est de remarquer que, si $u(t, x)$ est une solution de l'équation de la chaleur (1.20), alors $\lambda^d u(\lambda^2 t, \lambda x)$ l'est également (le préfacteur λ^d venant du respect de la condition initiale). Il est donc naturel de chercher une fonction solution sous la forme $u(t, x) = \frac{v(|x|^2/t)}{t^{d/2}}$ (à une constante multiplicative près, à déterminer plus tard). On calcule alors

$$\partial_t u = -\frac{d}{2} \frac{v(|x|^2/t)}{t^{1+d/2}} - \frac{|x|^2}{t^2} \frac{v'(|x|^2/t)}{t^{d/2}}$$

et

$$\partial_{x_j} u = \frac{2x_j}{t} \frac{v'(|x|^2/t)}{t^{d/2}},$$

ce qui donne

$$\partial_{x_j x_j} u = \frac{2}{t} \frac{v'(|x|^2/t)}{t^{d/2}} + \frac{4x_j^2}{t^2} \frac{v''(|x|^2/t)}{t^{d/2}},$$

et donc

$$\Delta u = \frac{2d}{t} \frac{v'(|x|^2/t)}{t^{d/2}} + \frac{4|x|^2}{t^2} \frac{v''(|x|^2/t)}{t^{d/2}}.$$

La première ligne de (1.20) donne donc, dans la variable $y = |x|^2/t$,

$$-\frac{d}{2} v(y) - y v'(y) = 2d v'(y) + 4y v''(y).$$

On cherche une solution sous la forme $v(y) = \exp(-\omega y)$, ce qui donne

$$-\frac{d}{2} + \omega y = -2d\omega + 4y\omega^2,$$

ce qui conduit à choisir $\omega = 1/4$. On a donc identifié $v(y) = \exp(-y/4)$, d'où $u(t, x) = C \frac{\exp(-|x|^2/(4t))}{t^{d/2}}$, et on obtient la valeur de la constante C grâce à la condition initiale. On retrouve bien (1.15).

Remarque 10. La non-réversibilité mentionnée ci-dessus se voit aussi lorsqu'on compare la condition initiale de l'équation (une masse de Dirac, i.e. une "fonction" très piquée en 0) avec la solution pour tout $t > 0$, qui est une fonction très régulière vis à vis de la variable x . On observe aussi un autre phénomène fondamental sur lequel on reviendra (cf. le théorème 13) : l'équation est régularisante, au sens où elle permet de passer d'une condition initiale très peu régulière à une solution (à tout temps $t > 0$) de classe $C^\infty(\mathbb{R}^d)$.

1.2.1.2 Solution homogène

On peut maintenant utiliser la fonction G pour construire une solution de l'équation de la chaleur avec condition initiale g . La manière la plus simple de procéder est de travailler en Fourier³. Ceci conduit à introduire la fonction u définie, pour $x \in \mathbb{R}^d$ et $t > 0$, par

$$u(t, x) = (G(t, \cdot) \star g)(x) = \int_{\mathbb{R}^d} G(t, x-y) g(y) dy = \frac{1}{(4\pi t)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\frac{|x-y|^2}{4t}} g(y) dy. \quad (1.21)$$

Comme $G(t, \cdot) \in L^1(\mathbb{R}^d)$ pour tout $t > 0$, on déduit que si $g \in L^p(\mathbb{R}^d)$, alors $u(t, \cdot) \in L^p(\mathbb{R}^d)$ pour tout $t > 0$. On rappelle en effet le résultat suivant :

Lemme 11. Soit $\alpha \in L^1(\mathbb{R}^d)$ et $\beta \in L^p(\mathbb{R}^d)$ avec $1 \leq p \leq \infty$. Alors $\alpha \star \beta \in L^p(\mathbb{R}^d)$ et de plus $\|\alpha \star \beta\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \leq \|\alpha\|_{L^1(\mathbb{R}^d)} \|\beta\|_{L^p(\mathbb{R}^d)}$.

Théorème 12 (Solution de l'équation de la chaleur dans \mathbb{R}^d). Soit $g \in L^2(\mathbb{R}^d)$. Le problème

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = 0, & t > 0 \\ u(0) = g, \end{cases} \quad (1.22)$$

a une solution unique $u \in C^0([0; \infty), L^2(\mathbb{R}^d)) \cap C^1((0; \infty), H^2(\mathbb{R}^d))$, qui est donnée par la formule (1.21).

Démonstration. Il est clair que la définition (1.21) fournit une solution de l'équation (1.22) dans le bon espace fonctionnel (le vérifier en exercice!).

Si maintenant $v \in C^0([0; \infty), L^2(\mathbb{R}^d)) \cap C^1((0; \infty), H^2(\mathbb{R}^d))$ est une solution de (1.22) avec $g \equiv 0$, on peut prendre le produit scalaire avec la fonction $x \mapsto v(t, x)$ (qui est donc une fonction de $L^2(\mathbb{R}^d)$) et on intègre en temps sur $[0; t_0]$. On obtient

$$\frac{1}{2} \|v(t_0, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 + \int_0^{t_0} dt \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla v|^2 dx = \frac{1}{2} \|v(0, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 = \frac{1}{2} \|g\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 = 0,$$

ce qui montre que $v(t_0, \cdot) = 0$ pour tout t_0 . On obtient ainsi l'unicité de la solution.

Pour faire le calcul ci-dessus, on a utilisé que, pour tout $t > 0$, on a $-\int_{\mathbb{R}^d} v \Delta v = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla v|^2$. Cette égalité peut être obtenue en utilisant le fait que $v(t, \cdot) \in H^2(\mathbb{R}^d)$ (par définition de l'espace de travail), et qu'on peut donc trouver $v_n \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ tel que $\|v_n - v\|_{H^2(\mathbb{R}^d)}$ tend vers 0 quand $n \rightarrow \infty$. Par intégration par partie, on a $-\int_{\mathbb{R}^d} v_n \Delta v_n = \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla v_n|^2$, et on peut passer à la limite $n \rightarrow \infty$ de chaque côté. \square

On a aussi le résultat de régularité suivant :

3. travail laissé en exercice

Théorème 13. *Si $g \in L^2(\mathbb{R}^d)$, alors la solution (1.21) de (1.22) est dans $C^\infty((0; \infty) \times \mathbb{R}^d)$.*

Démonstration. Il s'agit juste de remarquer que G est de classe C^∞ sur $(0; \infty) \times \mathbb{R}^d$ et que toutes ses dérivées sont dans $C^0((0; \infty), L^2(\mathbb{R}^d))$, puis d'appliquer les résultats classiques de régularité d'intégrales dépendant d'un paramètre. \square

Ainsi, bien que nous ayons seulement supposé que la condition initiale g est dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, on obtient que la solution $u(t, x)$ est de classe C^∞ par rapport à $x \in \mathbb{R}^d$ pour tout temps $t > 0$. On dit que l'équation de la chaleur a un *effet régularisant*. On voit bien sûr la non-réversibilité de ce processus.

De même, notons la propriété suivante :

Théorème 14. *Si $g \geq 0$ avec g non identiquement nulle, alors $u(t, x) > 0$ pour tout $x \in \mathbb{R}^d$ et tout $t > 0$.*

Ce résultat est une conséquence directe du fait que $G > 0$. Même si g s'annule par endroit au temps initial, la solution est strictement positive sur tout l'espace quand $t > 0$. On parle de *propagation à vitesse infinie*, notion déjà évoquée dans la section 1.1.4.

On a aussi le résultat (dit principe du maximum) suivant, dont la démonstration est laissée en exercice :

Théorème 15 (Principe du maximum). *On suppose que $g \in L^2(\mathbb{R}^d) \cap L^\infty(\mathbb{R}^d)$. La solution u donnée par (1.21) est dans $L^\infty((0; \infty), L^\infty(\mathbb{R}^d))$ et vérifie*

$$\sup_{t>0} \|u(t)\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \leq \|g\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)}.$$

On a enfin le comportement asymptotique suivant (qui montre à nouveau la non-réversibilité du problème, i.e. l'existence d'une "flèche du temps"), dont à nouveau la démonstration est laissée en exercice :

Théorème 16 (Comportement asymptotique). *On suppose que $g \in L^2(\mathbb{R}^d) \cap L^\infty(\mathbb{R}^d)$. La solution u donnée par (1.21) vérifie*

$$\forall t > 0, \quad \lim_{|x| \rightarrow \infty} u(t, x) = 0$$

et

$$\forall x \in \mathbb{R}^d, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} u(t, x) = 0.$$

Remarque 17. *Ces propriétés de l'équation de la chaleur sont très spécifiques aux équations de type parabolique et ne seront plus vraies pour l'équation des ondes, par exemple. Pour l'équation de la chaleur, démontrer ces propriétés dans le cas d'un ouvert borné nous prendra un peu plus de temps mais tout restera vrai (cf. la section 1.2.2).*

1.2.1.3 Solution avec second membre

On s'intéresse maintenant à l'équation de la chaleur avec second membre. Pour cela, il est utile d'introduire l'opérateur $U(t)$, agissant sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ et défini par

$$U(t)g = G(t, \cdot) \star g.$$

Il s'agit simplement de l'opérateur de multiplication par $\widehat{G}(t, k)$ en Fourier.

On a le résultat suivant :

Théorème 18 (Équation de la chaleur dans tout l'espace avec second membre). Soient $g \in L^2(\mathbb{R}^d)$ et $f \in C^1([0; \infty), L^2(\mathbb{R}^d))$. Le problème

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = f, & t > 0 \\ u(0) = g, \end{cases} \quad (1.23)$$

admet une unique solution dans l'espace $C^0([0; \infty), L^2(\mathbb{R}^d)) \cap C^1((0; \infty), L^2(\mathbb{R}^d))$, et celle-ci est donnée par la formule de Duhamel

$$u(t) = U(t)g + \int_0^t U(t-s) f(s) ds. \quad (1.24)$$

Démonstration. L'unicité se montre encore par soustraction de deux solutions et estimées d'énergie (comme pour la preuve dans le théorème 12). On montre maintenant que la fonction proposée est bien solution. On a

$$u(t) = G(t, \cdot) \star g + \int_0^t G(t-s, \cdot) \star f(s, \cdot) ds, \quad (1.25)$$

donc

$$\begin{aligned} \partial_t u &= \partial_t (G(t, \cdot) \star g) + \int_0^t \partial_t G(t-s, \cdot) \star f(s, \cdot) ds + G(0, \cdot) \star f(t, \cdot) \\ &= (\partial_t G(t, \cdot)) \star g + \int_0^t \partial_t G(t-s, \cdot) \star f(s, \cdot) ds + f(t, \cdot), \end{aligned}$$

en utilisant le fait que $G(0, \cdot) = \delta_0$ et que la convolée par δ_0 est l'identité. Par ailleurs,

$$\Delta u(t) = (\Delta G(t, \cdot)) \star g + \int_0^t (\Delta G(t-s, \cdot)) \star f(s, \cdot) ds.$$

En utilisant que $\partial_t G = \Delta G$, on obtient que $\partial_t u - \Delta u = f$, c'est la première ligne de (1.23).

On fait maintenant tendre t vers 0 dans la formule proposée. Le second terme (intégrale entre 0 et t) s'annule, et il reste $u(0) = G(0, \cdot) \star g = g$, c'est la deuxième ligne de (1.23).

Une autre preuve consiste à passer en Fourier dans (1.23). On a ainsi

$$\partial_t \widehat{u}(t, k) + |k|^2 \widehat{u}(t, k) = \widehat{f}(t, k).$$

En utilisant la méthode de la variation de la constante, on voit que

$$\widehat{u}(t, k) = C(t, k) e^{-t|k|^2}$$

avec

$$\partial_t C(t, k) = e^{t|k|^2} \widehat{f}(t, k).$$

On peut résoudre cette équation et on trouve

$$C(t, k) = C(0, k) + \int_0^t e^{s|k|^2} \widehat{f}(s, k) ds,$$

ce qui entraîne

$$\widehat{u}(t, k) = C(0, k) e^{-t|k|^2} + \int_0^t e^{(s-t)|k|^2} \widehat{f}(s, k) ds.$$

La condition initiale donne $\widehat{g}(k) = \widehat{u}(t=0, k) = C(0, k)$, et on obtient donc finalement

$$\widehat{u}(t, k) = \widehat{g}(k) \widehat{G}(t, k) + \int_0^t \widehat{G}(t-s, k) \widehat{f}(s, k) ds. \quad (1.26)$$

La transformée de Fourier inverse (qui transforme un produit en une convolution) permet d'aboutir à (1.25). \square

On observe à nouveau les propriétés régularisantes de l'opérateur.

1.2.2 Equation de la chaleur en domaine borné

1.2.2.1 Modélisation pour la condition aux limites

On revient à la modélisation par une particule se déplaçant sur la grille $\{k \Delta x\}_{k \in \mathbb{Z}}$, et on suppose maintenant que la particule ne se déplace pas dans tout \mathbb{R} , mais seulement dans un domaine borné, qu'on choisit, sans perte de généralité, sous la forme $\Omega = (0, 1)$. On suppose qu'il existe $K \in \mathbb{N}$ tel que $K \Delta x = 1$, et que la particule est initialement dans Ω (et pas sur son bord!). Il faut donc maintenant faire des choix concernant les particules qui atteignent le bord de Ω , i.e. les positions $k = 1$ et $k = K - 1$. Différents choix sont possibles :

- une première option consiste à dire que toute particule qui atteint le bord disparaît : lorsque la particule est en $k = 1$ au temps n , elle peut sauter à droite avec probabilité $1/2$ (et les itérations en temps se poursuivent), ou bien sauter à gauche avec probabilité $1/2$, et dans ce cas elle disparaît. Par conséquent, la probabilité de présence au bord est nulle : $P(n, k=0) = P(n, k=K) = 0$ pour tout $n > 0$. La loi d'évolution est alors (1.5) pour tout $2 \leq k \leq K - 2$. On peut alors montrer⁴ qu'on aboutit à l'équation de la chaleur avec conditions aux limites de Dirichlet homogènes :

$$\partial_t u = \frac{\alpha}{2} \partial_{xx} u \quad \text{dans } \Omega, \quad u(t, \cdot) = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega.$$

4. travail laissé en exercice

- une seconde option consiste à dire que toute particule qui atteint le bord est renvoyée vers l'intérieur du domaine avec probabilité $1/2$. Lorsque la particule est en $k = 0$ au temps n , alors, au temps $n + 1$, elle peut rester en $k = 0$ (avec probabilité $1/2$), ou bien elle peut aller en $k = 1$ (avec probabilité $1/2$ aussi). On peut alors montrer⁵ qu'on obtient alors l'équation de la chaleur avec conditions aux limites de Neumann homogènes :

$$\partial_t u = \frac{\alpha}{2} \partial_{xx} u \quad \text{dans } \Omega, \quad \partial_x u(t, \cdot) = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega.$$

On vient donc de comprendre la signification des conditions aux limites de Dirichlet et de Neumann homogènes, dans le cas où u représente la concentration d'une espèce (polluant, goutte d'encre, ...) diffusant dans son milieu. Nous avons raisonné en dimension $d = 1$, mais l'interprétation des conditions aux limites reste bien sûr valable en dimension d quelconque.

Lorsque le problème modélise l'évolution de la température, la condition $u = 0$ (ou de manière plus générale $u = u_0$) sur $\partial\Omega$ s'interprète bien sûr comme le fait qu'on impose la température au bord du domaine. La condition $n \cdot \nabla u = 0$ sur $\partial\Omega$ (qui est la généralisation multidimensionnelle de $\partial_x u = 0$) consiste à écrire que le flux de chaleur $q = -\nabla u$ (cf. la discussion au début de la section 1.2) a une composante normale nulle sur $\partial\Omega$ (ou imposée à une certaine valeur τ si on travaille avec $n \cdot \nabla u = \tau$), ce qui correspond à un domaine isolé thermiquement de l'extérieur.

On reviendra sur ces questions de conditions aux limites quand on abordera la mécanique des solides (cf. le chapitre 3). On verra alors aussi des conditions aux limites mixtes, au sens de type Dirichlet sur une partie de $\partial\Omega$ et de Neumann sur le reste de $\partial\Omega$, ce qui aura beaucoup de sens dans ce cadre.

1.2.2.2 Propriétés qualitatives

Dans toute la suite de cette section 1.2.2, on s'intéresse à l'équation de la chaleur dans le domaine borné Ω , qu'on munit de conditions aux limites de type Dirichlet homogènes (mais le même type de raisonnement s'applique pour d'autres conditions aux limites, comme par exemple des conditions aux limites de type Neumann homogènes) :

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = f & \text{pour tout } t > 0, \text{ dans } \Omega, \\ u(0) = g & \text{dans } \Omega, \\ u(t, \cdot) = 0 & \text{pour tout } t > 0, \text{ sur } \partial\Omega. \end{cases} \quad (1.27)$$

On va ici retrouver les propriétés qualitatives obtenues dans le cas où l'équation est posée dans tout l'espace \mathbb{R}^d , avec des arguments plus ou moins techniques (on renvoie à [2] pour certaines preuves). Commençons par les effets régularisants :

5. travail laissé en exercice

Théorème 19 (Effet régularisant avec $f \equiv 0$). *On suppose que Ω est un ouvert borné de \mathbb{R}^d , de classe C^∞ . Soit $g \in L^2(\Omega)$ une condition initiale et u l'unique solution de (1.27) avec $f \equiv 0$. Alors, pour tout $0 < \varepsilon < T$, on a*

$$u \in C^\infty([\varepsilon; T] \times \overline{\Omega}).$$

Remarque 20. *La continuité étant une propriété locale, le résultat ci-dessus indique donc que $u \in C^\infty(]0; T[\times \overline{\Omega})$. La manière avec laquelle est énoncé le théorème 19 est en fait un artefact de la preuve, qui consiste à montrer que, pour tout $\varepsilon > 0$, la fonction u est dans l'espace $H^r(] \varepsilon; T[\times \Omega)$ pour tout $r \geq 0$, puis à invoquer les injections de Sobolev pour en déduire que $u \in C^\infty([\varepsilon; T] \times \overline{\Omega})$.*

Le théorème 19 est à rapprocher du théorème 13, mais sa preuve est plus difficile. On peut aussi obtenir la régularité jusqu'à $t = 0$ (i.e. sur $[0; T] \times \overline{\Omega}$) ou avec un terme source $f \neq 0$, ce qui est évidemment encore plus délicat à obtenir que le théorème 19.

On a aussi des résultats de type "principe du maximum", à rapprocher du théorème 15 :

Théorème 21 (Principe du maximum faible). *Soient Ω un ouvert borné de \mathbb{R}^d , $T > 0$, $g \in L^2(\Omega)$, $f \in L^2(]0; T[, L^2(\Omega))$, et u l'unique solution de (1.27). Si $f \geq 0$ presque partout dans $]0; T[\times \Omega$ et $g \geq 0$ presque partout dans Ω , alors $u \geq 0$ presque partout dans $[0; T] \times \Omega$.*

Remarque 22. *Le fait que u reste positive ou nulle lorsque les données sont positives ou nulles est important physiquement, par exemple si u représente une température, g la température initiale et f les sources de chaleur. En présence de sources de chaleur et si la température initiale est positive, on s'attend à ce qu'elle le reste (attention, localement, la température à l'instant t peut devenir plus petite qu'initialement, en particulier aux points x pour lesquels la température initiale était maximale : il ne faut donc pas s'attendre à ce que $u(t, x) \geq g(x)$ pour tout $t > 0$).*

Voici maintenant un résultat plus précis quand $f \equiv 0$ et qui traduit l'existence d'une *propagation à vitesse infinie* : même si la condition initiale s'annule à certains endroits à l'intérieur de Ω , la solution u vérifie $u(t, x) > 0$ pour tout $t > 0$ et $x \in \Omega$.

Théorème 23 (Propagation à vitesse infinie). *Soit Ω un ouvert borné régulier de \mathbb{R}^d , un temps final $T > 0$ et une fonction $g \in L^2(\Omega)$ telle que $g \neq 0$ et $g \geq 0$ presque partout. Alors la solution u de (1.27) avec $f \equiv 0$ vérifie*

$$\forall x \in \Omega, \quad u(t, x) > 0$$

pour tout temps $t > 0$.

Ce résultat est à rapprocher du théorème 14, dont la démonstration était très simple. Dans le cas présent, la démonstration du théorème 23 est complexe

et repose sur une inégalité de type Harnack parabolique, ou une formule de la moyenne parabolique. On renvoie à [3] pour plus de détails.

Discutons maintenant le comportement asymptotique de la solution, dans le cas où le second membre f ne dépend pas du temps.

Théorème 24 (Comportement asymptotique, f indépendant de t). *Soit Ω un ouvert borné régulier de \mathbb{R}^d , $g \in L^2(\Omega)$ et $u \in C^0([0; T], L^2(\Omega))$ l'unique solution de (1.27). On suppose que f est indépendant du temps. Alors on a*

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|u(t) - v\|_{L^2(\Omega)} = 0,$$

où v est l'unique solution dans $H_0^1(\Omega)$ du problème $-\Delta v = f$. On note que cette limite est indépendante de la condition initiale g .

Dans le cas où f est identiquement nul, on obtient un résultat comparable au théorème 16. La preuve de ce résultat est laissée en exercice.

Remarque 25. *Le comportement décrit par le théorème 24 est à nouveau caractéristique des équations paraboliques. Le même raisonnement formel aboutit à une conclusion fautive dans le cas de l'équation des ondes. Considérons en effet le problème $\partial_{tt}u - \Delta u = f$ dans Ω , avec des conditions initiales adéquates, et la condition aux limites $u(t, \cdot) = 0$ sur $\partial\Omega$ pour tout $t > 0$. En supposant f indépendant du temps, il est tentant d'introduire à nouveau l'unique solution $v \in H_0^1(\Omega)$ du problème $-\Delta v = f$. Dans le cas de l'équation des ondes, la solution $u(t)$ ne s'approche pas de v lorsque $t \rightarrow \infty$. Le comportement de $u(t)$ est plutôt un comportement oscillant autour de v (cf. la section 1.4.2.1), et non pas un comportement dissipatif vers v comme formalisé par le théorème 24.*