Transport et diffusion

G. ALLAIRE

Cours no. 7 — le 28/I/2016

Calcul critique (début)

☞ Motivation: comportement asymptotique en temps

☞ M-matrices et théorème de Perron-Frobenius

☞ “Extension” à la dimension infinie: théorème de Krein-Rutman et criticité pour un exemple en diffusion

(1) Motivation: comportement asymptotique en temps

Exemple: équation de Boltzmann linéaire sans sources

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{\partial \phi}{\partial t} + \omega \cdot \nabla \phi + \sigma(x)\phi = \displaystyle\int_{|\omega'|=1} \sigma^*(x, \omega \cdot \omega')\phi(x, \omega')\, d\omega' \\ \\ \phi(t = 0, x, \omega) = \phi^0(x, \omega) \geq 0 \end{array} \right.$$

Comportement asymptotique quand $t \to +\infty$. 3 cas possibles:

1. la solution $\phi(t, x, \omega)$ converge vers 0 (extinction de la population de particules, **cas sous-critique**),
2. la solution $\phi(t, x, \omega)$ converge vers $+\infty$ (“explosion” de la population de particules, **cas sur-critique**),
3. la solution $\phi(t, x, \omega)$ converge vers une limite finie non nulle $\phi^\infty(x, \omega)$ (état stationnaire, **cas critique**).

Un quatrième cas pourrait être possible: aucune limite ou bien cycle limite. Ce cas de figure ne se produit jamais.

Analogie en dimension finie

Système d'équations différentielles ordinaires.

On étudie la solution $u(t) \in C^1(\mathbb{R}^+ : \mathbb{R}^n)$ de

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} + Au = 0, \\ \\ u(t=0) = u^0, \end{cases}$$

où A est une matrice réelle de taille $n \times n$.

Penser à A matrice de discrétisation spatiale en transport/diffusion.

Cas facile: A diagonalisable sur $\mathbb{R}$

Soit λ_k ses valeurs propres, r_k ses vecteurs propres et l_k les vecteurs propres adjoints, normalisés, correspondant à sa transposée ou adjointe A^*, $1 \leq k \leq n$,

$$Ar_k = \lambda_k r_k, \qquad A^* l_k = \lambda_k l_k, \qquad r_k \cdot l_j = \delta_{jk}$$

où δ_{jk} est le symbole de Kronecker. On choisit de plus d'ordonner les valeurs propres par ordre croissant

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq ... \leq \lambda_n.$$

La solution exacte de l'EDO est

$$u(t) = \sum_{k=1}^{n} e^{-\lambda_k t} (u^0 \cdot l_k)\, r_k \,.$$

Lemme. Supposons que A est diagonalisable sur $\mathbb{R}$, et que $u^0 \cdot l_1 \neq 0$. Alors $u(t)$ admet une limite finie non nulle quand t tends vers l'infini si et seulement si la plus petite valeur propre vérifie $\lambda_1 = 0$.

Cas des matrices de discrétisation en transport/diffusion

Lemme. Soit λ_k, $1 \leq k \leq n$, les valeurs propres (éventuellement complexes) de A. On suppose qu'il existe une valeur propre, disons λ_1, qui soit réelle, simple et qui vérifie

$$\lambda_1 < \mathcal{R}(\lambda_k) \quad \text{pour tout } k \neq 1,$$

où $\mathcal{R}$ désigne la partie réelle. De plus, on fait l'hypothèse que $u^0 \cdot l_1 \neq 0$ avec l_1 le vecteur propre à gauche associé à λ_1.

Alors la solution $u(t)$ admet une limite finie non nulle quand t tends vers l'infini si et seulement si on a $\lambda_1 = 0$.

(On verra que les hypothèses ne sont pas restrictive en transport/diffusion.)

Preuve. La matrice A est semblable à sa forme de Jordan, diagonale par blocs, avec des blocs du type

$$D_m = \begin{pmatrix} \lambda_m & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \lambda_m \end{pmatrix},$$

où les valeurs propres $(\lambda_m)_{1\leq m\leq M}$ forment un sous-ensemble maximal de toutes les valeurs propres admettant des vecteurs propres indépendants.

Preuve (suite)

Dans la base de la forme de Jordan, l'EDO est un système de taille $\mathrm{dim} D_m$

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{dv_m}{dt} + D_m v_m = 0, \\ \\ v_m(t=0) = v_m^0, \end{array} \right.$$

dont chaque composante de la solution est le produit de $e^{-\lambda_m t}$ et d'un polynôme en t de degré inférieur ou égal à $(\mathrm{dim} D_m - 1)$.

Comme $v_1^0 = u^0 \cdot l_1 \neq 0$ et que λ_1 est simple $(\mathrm{dim} D_1 = 1)$, on a

$$u(t) \approx v_1^0 e^{-\lambda_1 t} r_1 \quad \text{quand } t \to +\infty$$

Remarque: y a-t-il de telles matrices A ?

(2) M-matrices et théorème de Perron-Frobenius

Définition. On dit qu'une matrice réelle A est une M-matrice si elle s'écrit

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ -a_{21} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & -a_{n-1n} \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{nn-1} & a_{nn} \end{pmatrix}$$

avec des coefficients $a_{ij} \geq 0$ positifs ou nuls tels que

$$a_{ii} - \sum_{j=1, j\neq i}^{n} a_{ij} \geq 0 \,, \qquad \text{pour tout } 1 \leq i \leq n.$$

Si l'inégalité est stricte pour tout i, on dit que A est une M-matrice stricte.

Exemples

La discrétisation par différences finies de l'équation de diffusion

$$\begin{cases} -\nu \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sigma(x) u = f(x) \text{ pour } x \in (0,1) \\ \\ u(0) = u(1) = 0, \end{cases}$$

avec $\sigma(x) \geq 0$ conduit à la M-matrice

$$A = \begin{pmatrix} \sigma_1 + 2c & -c & & 0 \\ -c & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & -c \\ 0 & \cdots & -c & \sigma_n + 2c \end{pmatrix} \quad \text{avec } c = \frac{\nu}{(\Delta x)^2}$$

Exemples

La discrétisation par différences finies (schéma décentré amont) de l'équation de transport

$$\left\{ \begin{array}{l} V \dfrac{\partial u}{\partial x} + \sigma(x) u = f(x) \text{ pour } x \in (0,1) \\ \\ u(0) = 0, \end{array} \right.$$

avec $V > 0$ et $\sigma(x) \geq 0$ conduit à la M-matrice

$$A = \begin{pmatrix} \sigma_1 + c & 0 & \cdots & 0 \\ -c & \ddots & & \vdots \\ & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & -c & \sigma_n + c \end{pmatrix} \quad \text{avec } c = \frac{V}{\Delta x}$$

Lemme. Toute M-matrice stricte est inversible.

Preuve. Soit $x \in \mathbb{R}^n$ un vecteur tel que $Ax = 0$. On note i un indice tel que $|x_i| = \max_{1 \leq j \leq n} |x_j|$. Si on suppose que $|x_i| > 0$, alors

$$a_{ii}|x_i| \leq \sum_{j \neq i} a_{ij}|x_j| \leq \sum_{j \neq i} a_{ij}|x_i| < a_{ii}|x_i|,$$

ce qui est une contradiction. Donc $x = 0$ et A est inversible.

Définition. On dit qu'une matrice A est **irréductible** s'il n'existe pas de matrice de permutation P telle que PAP^* se mette sous forme triangulaire par blocs

$$PAP^* = \begin{pmatrix} A_{11} & 0 \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}.$$

Lemme. A toute matrice A on associe le graphe de noeuds $1, 2, ..., n$ et d'arêtes orientées reliant i à j si $a_{ij} \neq 0$. Alors A est irréductible si et seulement si pour tout couple $i \neq j$ il existe une chaine d'arêtes qui permet d'aller de i à j

$$a_{ik_1} \rightarrow a_{k_1 k_2} \rightarrow ... \rightarrow a_{k_m j}$$

Preuve. Si A n'est pas irréductible, alors il existe une matrice de permutation P telle que PAP^* ait une forme triangulaire. Autrement dit, quitte à renuméroter les noeuds du graphe (c'est l'effet de la multiplication à gauche par P et à droite par son adjoint), les premiers noeuds $1 \leq i \leq \dim A_{11}$ ne sont pas reliés par une chaine d'arêtes aux derniers noeuds $\dim A_{11} + 1 \leq j \leq n$.

Réciproquement, supposons qu'il existe un couple d'indices $i_0 \neq j_0$ qui ne soient reliés par aucune chaine d'arêtes. On définit les ensembles

$$I = \{i \in \{1, ..., n\} \text{ tel que } i_0 \text{ est relié à } i\},$$
$$J = \{j \in \{1, ..., n\} \text{ tel que } j \text{ est relié à } j_0\},$$
$$K = \{1, ..., n\} \setminus (I \cup J).$$

L'intersection $I \cap J$ est vide sinon i_0 serait relié à j_0. De même, $I \cap K = \emptyset$. Par conséquent, si on applique la permutation qui numérote en premier les éléments de I puis ceux de $J \cup K$, on obtient une matrice trianglaire par blocs. Donc A n'est pas irréductible.

- ☞ Si A est irréductible alors sa transposée A^* aussi.
- ☞ La matrice de discrétisation de la diffusion est irréductible.
- ☞ La matrice de discrétisation du transport (sans collision) n'est pas irréductible.

Définition. On dit qu'une matrice réelle B est positive si tous ses coefficients sont positifs ou nuls, $b_{ij} \geq 0$. On dit qu'elle est stritement positive s'ils sont strictement positifs, $b_{ij} > 0$.

Attention ! Rien à voir avec la positivité au sens des formes quadratiques...

Théorème. Soit A une M-matrice inversible irréductible. Alors son inverse A^{-1} est strictement positive .

Preuve. Soit $x \in \mathbb{R}^n$ le k-ème vecteur colonne de A^{-1} qui vérifie donc $Ax = e_k$, le k-ème vecteur de la base canonique. Soit i tel que $x_i = \min_{1 \leq j \leq n} x_j$. Supposons que $x_i \leq 0$. La i-ème composante de $Ax = e_k$ donne

$$0 \leq \delta_{ik} = a_{ii} x_i - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j \leq \left(a_{ii} - \sum_{j \neq i} a_{ij} \right) x_i \leq 0,$$

ce qui implique que chacune de ces inégalités est en fait une égalité. En particulier, on a $x_j = x_i$ pour tous les indices j tels que $a_{ij} \neq 0$. Grâce à l'irréductibilité de A on en déduit que $x_k = \min_{1 \leq j \leq n} x_j$. On reprend alors cette inégalité pour $i = k$ mais, dans ce cas, le terme le plus à gauche vaut 1 comme la k-ème composante de e_k, ce qui est une contradiction. Par conséquent $x_i > 0$.

Théorème de Perron-Frobenius. Soit K une matrice strictement positive. Alors K a une valeur propre dominante λ_{max} qui vérifie les propriétés suivantes.

1. $\lambda_{max} > 0$ et un vecteur propre associé x (tel que $Kx = \lambda_{max}x$) a toutes ses composantes strictement positives.

2. λ_{max} est simple (sa multiplicité comme racine du polynôme caractéristique est un).

3. Toute autre valeur propre $\lambda \in \mathbf{C}$ de K vérifie $|\lambda| < \lambda_{max}$.

4. La matrice K n'a pas d'autre vecteur propre dont toutes les composantes sont positives.

Lemme intermédiaire. Soit $p(K)$ l'ensemble des réels $\lambda \geq 0$ tels qu'il existe un vecteur non nul $x \geq 0$ vérifiant

$$Kx \geq \lambda x \,.$$

Si K est une matrice strictement positive, l'ensemble $p(K)$ est fermé, borné, non vide et contient un nombre strictement positif.

Preuve. Soit un vecteur $x > 0$. Alors $Kx > 0$ aussi et, pour $\lambda > 0$ petit, on a $Kx \geq \lambda x$, ce qui prouve que $p(K) \neq \emptyset$.

Soit $\mathbf{1}$ le vecteur de composantes toutes égales à 1. En prenant le produit scalaire avec $\mathbf{1}$, sachant que $x \geq 0$, on obtient

$$\lambda \leq \frac{x \cdot K^* \mathbf{1}}{\sum_{i=1}^n x_i} \leq \max_{1 \leq i \leq n} (K^* \mathbf{1})_i,$$

ce qui prouve que $p(K)$ est borné.

Soit une suite $\lambda_n \in p(K)$ avec $K x_n \geq \lambda_n x_n$ et $\mathbf{1} \cdot x_n = 1$. Pour une sous-suite on peut passer à la limite et montrer que $p(K)$ est fermé.

Démonstration de Perron-Frobenius

Point 1: grâce au Lemme, $p(K)$ admet un maximum $\lambda_{max} = \max p(K) > 0$. Puisque $\lambda_{max} \in p(K)$ $\exists\, y \geq 0, y \neq 0$ tel que $Ky \geq \lambda_{max} y$.

Supposons qu'il existe un indice k tel que

$$\sum_{j=1}^{n} K_{kj} y_j > \lambda_{max} y_k \quad \text{et} \quad \sum_{j=1}^{n} K_{ij} y_j \geq \lambda_{max} y_i \quad \text{pour } i \neq k\,.$$

Pour $\epsilon > 0$ on définit $x = y + \epsilon e_k$. Comme K est strictement positive, on a $Kx > Ky$ tandis que seule la k-ème composante de x diffère de y. Donc, pour $\epsilon > 0$ suffisamment petit, on en déduit une inégalité stricte

$$Kx > \lambda_{max} x\,.$$

On peut donc augmenter λ_{max} dans cette inégalité, ce qui contredit $\lambda_{max} = \max p(K)$. Ainsi, $Ky = \lambda_{max} y$ et λ_{max} est bien une valeur propre de K. De plus, $y > 0$ car K est strictement positive, $y \geq 0$ et $y = Ky/\lambda_{max}$. Cela termine la preuve du point 1.

Point 2: montrons d'abord que la valeur propre λ_{max} est géométriquement simple, i.e. il n'y a pas d'autres vecteurs propres que y. Supposons qu'il en exite un autre z non proportionnel à y. Donc, $\exists c$ petit tel que $y + cz \geq 0$ (toujours vecteur propre de K) avec au moins une composante nulle. Contradiction avec l'argument précédent.

Montrons ensuite que λ_{max} est algébriquement simple. Si cela n'est pas le cas, $\exists z \neq 0$ tel que

$$Kz = \lambda_{max} z + c\, y \,,$$

où, quitte à changer z en $-z$, on peut supposer $c > 0$, et quitte à changer z en $z + d\, y$ avec $d > 0$, on peut aussi supposer $z \geq 0$. On en déduit l'inégalité

$$Kz > \lambda_{max} z$$

et on peut donc augmenter un peu λ_{max} en préservant cette inégalité, ce qui contredit encore le caractère maximal de λ_{max}.

Point 3: soit une valeur propre $\lambda \in \mathbf{C}$ et un vecteur propre non nul $z \in \mathbf{C}^n$ vérifiant $Kz = \lambda z$. Comme K est positive, on a

$$|\lambda|\,|z_i| \le \sum_{j=1}^{n} K_{ij}|z_j| \quad \text{pour tout } 1 \le i \le n\,,$$

$\Rightarrow |\lambda|\,z^+ \le Kz^+$ avec z^+ de composantes $|z_i|$. Ainsi $|\lambda|$ appartient à l'ensemble $p(K)$ et $|\lambda| \le \lambda_{max}$. Cette inégalité est stricte car sinon z^+ serait proportionnel à y et l'inégalité deviendrait une égalité. Or, on ne peut avoir

$$\left|\sum_{j=1}^{n} K_{ij} z_j\right| = \sum_{j=1}^{n} K_{ij}|z_j|$$

que s'il existe un unique nombre $\theta \in \mathbb{R}$ tel que

$$z_j = e^{i\theta}|z_j| \quad \text{pour tout } 1 \le j \le n\,.$$

Autrement dit, z serait proportionnel à y. Donc, pour tout valeur propre $\lambda \ne \lambda_{max}$ on a bien $|\lambda| < \lambda_{max}$.

Point 4: supposons que K ait un autre vecteur propre $z \neq 0$, réel à composantes positives, pour une autre valeur propre λ (forcément réelle) différente de λ_{max}. On sait que K et sa transposée (ou adjointe) K^* ont les mêmes valeurs propres. En particulier, puisque K^* est aussi une matrice strictement positive, elle admet λ_{max} (le même que pour K) comme valeur propre dominante avec un vecteur propre à composantes strictement positives y. Or les vecteurs propres z et y sont orthogonaux car

$$\lambda z \cdot y = K z \cdot y = z \cdot K^* y = \lambda_{max} z \cdot y \quad \text{ et } \lambda \neq \lambda_{max}.$$

Mais comme toutes les composantes de y sont trictement positives, on ne peut pas avoir $z \cdot y = 0$. Ainsi, il n'y a pas d'autre vecteur propre de K à composantes positives.

Théorème principal. Soit A une M-matrice irréductible. Alors A a une plus petite valeur propre λ_{min} qui vérifie les propriétés suivantes.

1. λ_{min} est réelle et simple.
2. Son vecteur propre associé x (tel que $Ax = \lambda_{min} x$) a toutes ses composantes strictement positives.
3. La matrice A n'a pas d'autre vecteur propre dont toutes les composantes sont positives.
4. Toute autre valeur propre $\lambda \in \mathbf{C}$ de A vérifie $\lambda_{min} < \mathcal{R}(\lambda)$.

Lemme intermédiaire. Soit B une matrice irréductible positive, dont les coefficients diagonaux sont strictement positifs, autrement dit

$$b_{ii} > 0 \; \forall \, i \, , \; \text{et} \; b_{ij} \geq 0 \; \forall \, i, j \, .$$

Alors il existe un entier m, avec $1 \leq m \leq n-1$, tel que B^m est strictement positive, c'est-à-dire que tous ses coefficients sont strictement positifs.

Preuve. Par récurrence, le coefficient de B^m en position (i,j) est

$$b_{ij}^{(m)} = \sum_{k_1=1}^{n} \cdots \sum_{k_{m-1}=1}^{n} b_{ik_1} b_{k_1 k_2} ... b_{k_{m-1} j} .$$

Tous les termes de cette somme sont positifs ou nuls.

L'irréductibilité de B implique qu'il existe une chaine de m coefficients **non nuls** $b_{ik_1}, b_{k_1 k_2}, ..., b_{k_{m-1} j}$ qui relie les indices i et j (avec au plus $m = n-1$). Par conséquent, au moins un terme de la somme ci-dessus est non nul et on a bien $b_{ij}^{(m)} > 0$.

Démonstration du théorème principal

Pour $\alpha > \max_i a_{ii}$, la matrice $(\alpha\,\mathrm{Id} - A)$ est positive irréductible avec des coefficients diagonaux strictement positifs. En vertu du Lemme il existe m tel que $(\alpha\,\mathrm{Id} - A)^m$ est strictement positive. Par Perron-Frobenius $(\alpha\,\mathrm{Id} - A)^m$ admet une valeur propre dominante. Les valeurs propres (répétées avec leur multiplicité) de A, notées λ, et celles de $(\alpha\,\mathrm{Id} - A)^m$, notées μ, sont en bijection par l'application

$$\lambda \to (\alpha - \lambda)^m \text{ d'inverse } \mu \to \alpha - \mu^{1/m}$$

avec les mêmes vecteurs propres. De la relation $\mu_{max} > |\mu|$ on déduit

$$\mu_{max}^{1/m} > |\mu^{1/m}| \geq \mathcal{R}(\mu^{1/m}),$$

c'est-à-dire

$$\lambda_{min} = \alpha - \mu_{max}^{1/m} < \alpha - \mathcal{R}(\mu^{1/m}) \leq \mathcal{R}(\lambda)$$

ce qui prouve les propriétés annoncées à partir de celles données par le Théorème de Perron Frobenius.

Conclusion

Si A est une M-matrice irréductible, la solution $u(t) \in C^1(\mathbb{R}^+ : \mathbb{R}^n)$ de

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} + Au = 0, \\ u(t=0) = u^0 \text{ avec } u^0 \geq 0,\ u^0 \neq 0, \end{cases}$$

vérifie (car $u^0 \cdot l_1 > 0$)

$$u(t) \approx (u^0 \cdot l_1) e^{-\lambda_1 t} r_1 \quad \text{quand } t \to +\infty$$

où $r_1 > 0$ et $l_1 > 0$ sont les vecteurs propres de A et A^*, associés à la plus petite valeur propre λ_1 commune de A et A^* et normalisés par

$$Ar_1 = \lambda_1 r_1\,,\ A^* l_1 = \lambda_1 l_1 \ \text{ et } r_1 \cdot l_1 = 1\,.$$

Le calcul de λ_1, $r_1 > 0$ et $l_1 > 0$ est appelé **calcul critique**.

$$\lambda_1 = 0 \ \Leftrightarrow \ \text{ cas critique.}$$

Exemple pour Boltzmann linéaire

Soit A la matrice de discrétisation spatiale par différences finies ($N = 1$) de

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \omega \cdot \nabla \phi + \sigma \phi - \sigma^* \int_{|\omega'|=1} \phi(x, \omega') \, d\omega' = 0.$$

Sous l'hypothèse $\sigma^* > 0$ il existe un réel $\alpha \geq 0$ tel que $(A + \alpha \, \mathrm{Id})$ est une M-matrice irréductible.

On choisit le schéma décentré amont: indice j pour l'espace et k pour les vitesses. Poids uniformes dans la règle de quadrature pour calculer les moyennes angulaires.

On range les inconnues discrètes ϕ_j^k en les regroupant par vitesse commune.

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & -s\,\mathrm{Id} & \cdots & \cdots & -s\,\mathrm{Id} \\ -s\,\mathrm{Id} & A_{22} & -s\,\mathrm{Id} & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & -s\,\mathrm{Id} & A_{K-1\,K-1} & -s\,\mathrm{Id} \\ -s\,\mathrm{Id} & \cdots & \cdots & -s\,\mathrm{Id} & A_{K\,K} \end{pmatrix} \text{ avec } s = \sigma^*/K,$$

avec les blocs diagonaux donnés, lorsque $\omega_k > 0$, par

$$A_{kk} = \begin{pmatrix} \sigma + c_k & 0 & & & 0 \\ -c_k & \sigma + c_k & 0 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -c_k & \sigma + c_k & 0 \\ 0 & & & -c_k & \sigma + c_k \end{pmatrix} \text{ avec } c_k = \frac{\omega_k}{\Delta x}.$$

Il s'agit bien d'une M-matrice car tous les coefficients extra-diagonaux sont négatifs ou nuls tandis que les coefficients diagonaux sont positifs et la diagonale dominance est bien satisfaite, quitte à rajouter $\alpha\,\mathrm{Id}$.

Comme $\sigma^* > 0$ on peut construire une chaine d'arêtes, $a_{ij} \neq 0$, reliant n'importe quels noeuds i et j du graphe de connectivité de A. Elle est donc bien irréductible.

(3) “Extension” à la dimension infinie: théorème de Krein-Rutman

Problèmes aux valeurs propres et criticité

☞ Dimension finie: théorème de Perron-Frobenius (démontré).

☞ Dimension infinie: théorème de Krein-Rutman (admis).

☞ On se contente d'extrapoler les résultats de dimension finie vers la dimension infinie.

Pour éviter les difficultés techniques, on ne va même pas énoncer le cas général du théorème de Krein-Rutman...

Diffusion à deux groupes d'énergie

Un exemple parmi d'autres en neutronique.

$$\left\{\begin{array}{ll}\dfrac{\partial u_1}{\partial t} - \operatorname{div}(D_1 \nabla u_1) + \sigma_1 u_1 = \sigma_{12}^f u_2 & \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}^+, \\ \dfrac{\partial u_2}{\partial t} - \operatorname{div}(D_2 \nabla u_2) + \sigma_2 u_2 = \sigma_{21}^c u_1 & \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}^+, \\ u_1 = u_2 = 0 & \text{sur } \partial\Omega \times \mathbb{R}^+, \\ u_1(t=0,x) = u_1^0(x)\,, u_2(t=0,x) = u_2^0(x) & \text{dans } \Omega,\end{array}\right.$$

où Ω est borné régulier, les coefficients sont des fonctions bornées telles que

$$D_1(x)\,, D_2(x)\,, \sigma_{12}^f(x)\,, \sigma_{21}^c(x) \geq C > 0 \quad \text{et} \quad \sigma_1 \geq \sigma_{12}^f\,, \sigma_2 \geq \sigma_{21}^c\,.$$

La borne inférieure sur σ_1 et σ_2 n'est pas restrictive car on peut remplacer $u_1(t), u_2(t)$ par $v_1(t)e^{Ct}, v_2(t)e^{Ct}$ pour $C > 0$ suffisamment grand.

Le problème aux valeurs propres correspondant à ce problème d'évolution est:

trouver $\lambda \in \mathbf{C}$ et $(\psi_1, \psi_2) \neq 0$ tels que

$$\left\{\begin{array}{ll} -\lambda\psi_1 - \operatorname{div}(D_1 \nabla \psi_1) + \sigma_1 \psi_1 = \sigma_{12}^f \psi_2 & \text{dans } \Omega, \\ -\lambda\psi_2 - \operatorname{div}(D_2 \nabla \psi_2) + \sigma_2 \psi_2 = \sigma_{21}^c \psi_1 & \text{dans } \Omega, \\ \psi_1 = \psi_2 = 0 & \text{sur } \partial\Omega. \end{array}\right.$$

Théorème (Krein-Rutman). Il existe une plus petite valeur propre réelle et simple λ telle que sa fonction propre associée (ψ_1, ψ_2) est la seule à être strictement positive dans Ω et pour toute autre valeur propre $\mu \in \mathbf{C}$ on a $\lambda < |\mu|$.

Remarque. Puisque seule la fonction propre associée à la plus petite valeur propre est positive, c'est la seule qui puisse s'interpréter comme une densité de particules. Les autres fonctions propres, si elles existent, n'ont pas d'interprétation physique.

Matrice de discrétisation de la diffusion à deux groupes

Lemme. La matrice de discrétisation par différences finies en dimension $N = 1$ est une M-matrice irréductible (à laquelle on peut donc appliquer le Théorème de Perron-Frobenius).

Remarque. Ce lemme est une "indication" de la validité de la Proposition.

Preuve. Pour simplifier on suppose tous les coefficients constants. On range les inconnues discrètes par groupe d'énergie (ψ_1 puis ψ_2):

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & -\sigma_{12}^f \,\mathrm{Id} \\ -\sigma_{21}^c \,\mathrm{Id} & A_{22} \end{pmatrix},$$

avec les blocs diagonaux de type "diffusion 1-d".

Blocs diagonaux pour $k = 1, 2$,

$$A_{kk} = \begin{pmatrix} \sigma_k + 2c_k & -c_k & & & 0 \\ -c_k & \sigma_k + 2c_k & -c_k & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -c_k & \sigma_k + 2c_k & -c_k \\ 0 & & & -c_k & \sigma_k + 2c_k \end{pmatrix} \text{ avec } c_k = \frac{D_k}{(\Delta x)^2}.$$

A est bien une M-matrice car $a_{ij} \leq 0$ pour $i \neq j$, $a_{ii} \geq 0$ et la diagonale dominance est bien satisfaite.

Comme σ_{12}^f et σ_{21}^c sont non nuls on peut construire une chaine d'arêtes,

$$a_{ik_1} \to a_{k_1 k_2} \to \ldots \to a_{k_m j} \ ,$$

reliant n'importe quels noeuds i et j du graphe de connectivité de A. Elle est donc bien irréductible.

Comportement en temps grand de la diffusion à deux groupes

Pour étudier la limite en temps grand de la diffusion nous avons besoin d'introduire son problème adjoint.

Définition (formelle). L'adjoint A^* d'un opérateur A dans un espace de Hilbert V, muni du produit scalaire $\langle u, v \rangle$, est

$$\langle Au, v \rangle = \langle u, A^* v \rangle \quad \text{ pour tout } u, v \in V.$$

Ici, on choisit $V = L^2(\Omega)^2$ et on définit, pour des fonctions $u = (u_1, u_2)$ suffisamment régulières, l'opérateur A par

$$Au = \begin{pmatrix} -\operatorname{div}(D_1 \nabla u_1) + \sigma_1 u_1 - \sigma_{12}^f u_2 \\ -\operatorname{div}(D_2 \nabla u_2) + \sigma_2 u_2 - \sigma_{21}^c u_1 \end{pmatrix}.$$

Un calcul simple, pour une fonction régulière $v = (v_1, v_2)$, montre que

$$\langle Au, v\rangle = \int_\Omega \Big(D_1 \nabla u_1 \cdot \nabla v_1 + D_2 \nabla u_2 \cdot \nabla v_2 + \sigma_1 u_1 v_1 + \sigma_2 u_2 v_2 \\ - \sigma_{12}^f u_2 v_1 - \sigma_{21}^c u_1 v_2 \Big) \, dx$$

et donc que

$$A^* v = \begin{pmatrix} -\operatorname{div}(D_1 \nabla v_1) + \sigma_1 v_1 - \sigma_{21}^c v_2 \\ -\operatorname{div}(D_2 \nabla v_2) + \sigma_2 v_2 - \sigma_{12}^f v_1 \end{pmatrix}.$$

On définit le **problème adjoint**

$$\begin{cases} -\lambda \psi_1^* - \operatorname{div}(D_1 \nabla \psi_1^*) + \sigma_1 \psi_1^* = \sigma_{21}^c \psi_2^* & \text{dans } \Omega, \\ -\lambda \psi_2^* - \operatorname{div}(D_2 \nabla \psi_2^*) + \sigma_2 \psi_2^* = \sigma_{12}^f \psi_1^* & \text{dans } \Omega, \\ \psi_1^* = \psi_2^* = 0 & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases}$$

On peut, bien sûr, montrer que le problème adjoint admet, comme en dimension finie, la même plus petite valeur propre λ que le problème "direct", avec un vecteur propre positif (ψ_1^*, ψ_2^*).

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u_1}{\partial t} - \operatorname{div}(D_1 \nabla u_1) + \sigma_1 u_1 = \sigma_{12}^f u_2 & \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}^+, \\ \dfrac{\partial u_2}{\partial t} - \operatorname{div}(D_2 \nabla u_2) + \sigma_2 u_2 = \sigma_{21}^c u_1 & \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}^+, \\ u_1 = u_2 = 0 & \text{sur } \partial\Omega \times \mathbb{R}^+, \\ u_1(t=0,x) = u_1^0(x)\,, u_2(t=0,x) = u_2^0(x) & \text{dans } \Omega, \end{cases}$$

Proposition. On suppose que $u_1^0, u_2^0 \geq 0$. Une condition nécessaire pour que le problème d'évolution admette une limite non nulle quand $t \to +\infty$ est que la plus petite valeur propre du problème spectral soit $\lambda = 0$.

Si cette limite existe, alors elle est du type

$$\lim_{t \to +\infty} (u_1(t), u_2(t)) = c\,(\psi_1, \psi_2) \qquad \text{avec } c = \int_\Omega \left(u_1^0 \psi_1^* + u_2^0 \psi_2^* \right) dx\,.$$

Remarque. Le profil spatial asymptotique est le premier et seul vecteur propre positif (ψ_1, ψ_2). Le coefficient de proportionnalité c est le produit scalaire de la donnée initiale et du premier vecteur propre adjoint (ψ_1^*, ψ_2^*), positif lui aussi, appelé **fonction d'importance** en neutronique.

Problème critique

En neutronique on préfère une autre formulation du problème aux valeurs propres, appelée **problème critique**

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(D_1 \nabla \psi_1) + \sigma_1 \psi_1 = \dfrac{1}{k} \sigma_{12}^f \psi_2 & \text{dans } \Omega, \\ -\operatorname{div}(D_2 \nabla \psi_2) + \sigma_2 \psi_2 = \sigma_{21}^c \psi_1 & \text{dans } \Omega, \\ \psi_1 = \psi_2 = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases}$$

où $1/k$ est une valeur propre.

Proposition. Il existe une plus petite valeur propre réelle et simple $1/k_{\text{eff}}$ telle que son vecteur propre associé (ψ_1, ψ_2) est le seul à être strictement positif dans Ω et pour toute autre valeur propre $1/k \in \mathbf{C}$ on a $1/k_{\text{eff}} < 1/|k|$.

La valeur k_{eff} est appelée **facteur multiplicatif effectif**.

Remarquons que $k_{\text{eff}} = 1$ si et seulement si $\lambda = 0$ et que, dans ce cas, les vecteurs propres associés sont les mêmes.

Si $k_{\text{eff}} \neq 1$, alors $\lambda = 0$ (i.e. il existe un état stationnaire) si le taux de fission σ_{12}^f est divisé par k_{eff}.

Autrement dit, k_{eff} est une mesure du changement qu'il faut apporter aux fissions pour qu'il puisse exister un état stationnaire.

On interprète donc ainsi le facteur multiplicatif effectif:

1. si $k_{\text{eff}} = 1$, le milieu est dit **critique** (les réactions de fission sont équilibrées par la diffusion et l'absorption),

2. si $k_{\text{eff}} > 1$, le milieu est dit **sur-critique** (les réactions de fission dominent la diffusion et l'absorption),

3. si $k_{\text{eff}} < 1$, le milieu est dit **sous-critique** (les réactions de fission sont trop faibles en comparaison de la diffusion et l'absorption).