

# Chapitre 1

## INTRODUCTION A LA MODÉLISATION MATHÉMATIQUE ET A LA SIMULATION NUMÉRIQUE

### 1.1 Introduction générale

Ce chapitre est une introduction à deux aspects distincts, mais très liés, des mathématiques appliquées : la **modélisation mathématique** et la **simulation numérique**. Un modèle mathématique est une représentation ou une interprétation abstraite de la réalité physique qui est accessible à l'analyse et au calcul. La simulation numérique permet de calculer sur ordinateur les solutions de ces modèles, et donc de simuler la réalité physique. Dans ce cours, les modèles que nous étudierons seront des équations aux dérivées partielles (ou e.d.p. en abrégé), c'est-à-dire des équations différentielles à plusieurs variables (le temps et l'espace, par exemple).

Pour l'instant nous laissons de côté un troisième aspect fondamental des mathématiques appliquées, à savoir l'analyse mathématique des modèles, sur lequel nous reviendrons un peu plus longuement dans les chapitres suivants. En pratiquant de la sorte, nous voulons en quelque sorte, motiver et justifier cette nécessaire intrusion de l'analyse mathématique. Nous allons voir, en effet, que le calcul numérique des solutions de ces modèles physiques réserve parfois des surprises (désagréables) qui ne peuvent s'expliquer et s'éviter que par une bonne compréhension de leurs propriétés mathématiques. Rappelons encore une fois le caractère fondamentalement multidisciplinaire des mathématiques appliquées, et donc de la simulation numérique, qui mêlent mathématiques, calcul informatique, et sciences de l'ingénieur.

Bien que la plupart des problèmes et des applications qui motivent les mathé-

matiques appliquées sont fondamentalement **non-linéaires** (voir par exemple [14], [30]), nous nous restreignons dans cet ouvrage aux problèmes linéaires par souci de simplicité. De la même façon, nous n'envisageons que des problèmes déterministes, c'est-à-dire sans introduction d'aléatoire ou de stochastique. Enfin, ce chapitre se voulant introductif et attractif, nous resterons souvent un peu flou dans l'argumentaire mathématique pour ne pas alourdir inutilement l'exposé. Que le lecteur rigoureux se rassure : nous reprendrons tous les concepts introduits de manière plus précise au prochain chapitre.

Le plan de ce chapitre est le suivant. La Section 1.2 est consacrée à un exemple élémentaire de modélisation qui conduit à **l'équation de la chaleur**. La Section 1.3 est une revue rapide des principales équations aux dérivées partielles que l'on rencontre dans les modèles usuels en mécanique, physique, ou sciences de l'ingénieur. La Section 1.4 est une introduction assez informelle au calcul numérique et à la méthode des **différences finies**. Enfin, nous donnons dans la Section 1.5 la définition d'un **problème bien posé** ainsi qu'une classification (sommaire) des équations aux dérivées partielles.

## 1.2 Un exemple de modélisation

La modélisation représente une part considérable du travail du mathématicien appliqué et nécessite une connaissance approfondie, non seulement des mathématiques appliquées, mais aussi de la discipline scientifique à laquelle elles s'appliquent. En effet, dans de nombreux cas le modèle mathématique n'est pas encore établi, ou bien il faut en sélectionner un pertinent parmi plusieurs disponibles, ou encore il faut simplifier des modèles connus mais trop complexes. Néanmoins, il ne nous est pas possible dans une première présentation de la discipline de rendre compte avec justice de l'importance de cette démarche de modélisation : il faut bien commencer par apprendre les notions de base propres aux mathématiques appliquées ! C'est pourquoi nous nous limitons à décrire un exemple de dérivation d'un modèle physique très classique, et nous renvoyons le lecteur désireux d'en savoir plus à des ouvrages ou cours plus spécialisés.

Le modèle que nous allons décrire est connu sous le nom **d'équation de la chaleur**, ou d'équation de diffusion.

Considérons un domaine  $\Omega$  de l'espace à  $N$  dimensions (noté  $\mathbb{R}^N$ , avec en général  $N = 1, 2$ , ou  $3$ ) que l'on suppose occupé par un matériau homogène, isotrope, et conducteur de la chaleur. On note  $x$  la variable d'espace, c'est-à-dire un point de  $\Omega$ , et  $t$  la variable de temps. Dans  $\Omega$  les sources de chaleur (éventuellement non uniformes en espace et variables dans le temps) sont représentées par une fonction donnée  $f(x, t)$ , tandis que la température est une fonction inconnue  $\theta(x, t)$ . La quantité de chaleur est proportionnelle à la température  $\theta$  et vaut  $c\theta$  où  $c$  est une constante physique (qui dépend du type de matériau) appelée chaleur spécifique. Pour déterminer la température  $\theta$ , nous écrivons la **loi de conservation de l'énergie** ou de la quantité de chaleur. Dans un volume élémentaire  $V$  inclus dans  $\Omega$ , la variation en temps de la

quantité de chaleur est le bilan de ce qui est produit par les sources et de ce qui sort ou rentre à travers les parois. Autrement dit,

$$\frac{d}{dt} \left( \int_V c\theta \, dx \right) = \int_V f \, dx - \int_{\partial V} q \cdot n \, ds \quad (1.1)$$

où  $\partial V$  est le bord de  $V$  (d'élément de surface  $ds$ ),  $n$  est la normale extérieure unité de  $V$ , et  $q$  est le vecteur flux de chaleur. Si on applique le théorème de Gauss, on obtient

$$\int_{\partial V} q \cdot n \, ds = \int_V \operatorname{div} q \, dx.$$

Regroupant les différents termes de (1.1) et utilisant le fait que le volume élémentaire  $V$  est quelconque, indépendant du temps, on en déduit l'équation de conservation de l'énergie

$$c \frac{\partial \theta}{\partial t} + \operatorname{div} q = f \quad (1.2)$$

qui a lieu en tout point  $x \in \Omega$  et à tout temps  $t$ . Rappelons que l'opérateur divergence est défini par

$$\operatorname{div} q = \sum_{i=1}^N \frac{\partial q_i}{\partial x_i} \text{ avec } q = (q_1, \dots, q_N)^t.$$

Il faut maintenant relier le flux de chaleur à la température, et on fait appel à ce qu'on appelle une **loi constitutive**. Dans le cas présent, il s'agit de la loi de Fourier qui relie le flux de chaleur de manière proportionnelle au gradient de température

$$q = -k \nabla \theta, \quad (1.3)$$

où  $k$  est une constante positive (qui dépend du type de matériau) appelée conductivité thermique. Rappelons que l'opérateur gradient est défini par

$$\nabla \theta = \left( \frac{\partial \theta}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial \theta}{\partial x_N} \right)^t.$$

En combinant la loi de conservation (1.2) et la loi constitutive (1.3), on obtient une équation pour la température  $\theta$

$$c \frac{\partial \theta}{\partial t} - k \Delta \theta = f,$$

où  $\Delta = \operatorname{div} \nabla$  est l'opérateur laplacien donné par

$$\Delta \theta = \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_i^2}.$$

Il faut ajouter à cette équation qui est valable dans tout le domaine  $\Omega$ , une relation, appelée **condition aux limites**, qui indique ce qui se passe à la frontière ou au

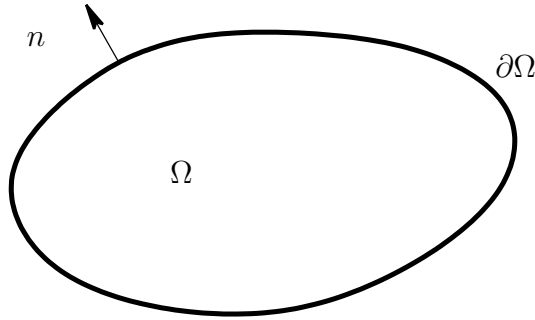


FIGURE 1.1 – Vecteur normal unité orienté vers l’extérieur.

bord  $\partial\Omega$  du domaine, et une autre relation qui indique quel est l’état initial de la température. Par convention, on choisit l’instant  $t = 0$  pour être le temps initial, et on impose une **condition initiale**

$$\theta(t = 0, x) = \theta_0(x), \quad (1.4)$$

où  $\theta_0$  est la fonction de distribution initiale de température dans le domaine  $\Omega$ . En ce qui concerne la condition aux limites, cela dépend du contexte physique. Si le domaine est supposé baigner dans un thermostat à température constante, alors, quitte à modifier l’échelle des températures, la température vérifie la condition aux limites de Dirichlet

$$\theta(t, x) = 0 \text{ pour tout } x \in \partial\Omega \text{ et } t > 0. \quad (1.5)$$

Si le domaine est supposé adiabatique ou thermiquement isolé de l’extérieur, alors le flux de chaleur sortant au bord est nul et la température vérifie la condition aux limites de Neumann

$$\frac{\partial\theta}{\partial n}(t, x) \equiv n(x) \cdot \nabla\theta(t, x) = 0 \text{ pour tout } x \in \partial\Omega \text{ et } t > 0, \quad (1.6)$$

où  $n$  est la normale extérieure unité de  $\Omega$  (voir la Figure 1.1). Une situation intermédiaire peut aussi avoir lieu : le flux de chaleur sortant au bord est proportionnel au saut de température entre l’extérieur et l’intérieur, et la température vérifie la condition aux limites de Fourier

$$\frac{\partial\theta}{\partial n}(t, x) + \alpha\theta(t, x) = 0 \text{ pour tout } x \in \partial\Omega, \text{ et } t > 0 \quad (1.7)$$

où  $\alpha$  est une constante positive. Puisqu’il faut choisir (c’est une des étapes de la modélisation), nous allons sélectionner la condition aux limites de Dirichlet (1.5). Rassemblant enfin l’équation, la condition initiale, et la condition aux limites satis-

faites par la température, on obtient l'équation de la chaleur

$$\begin{cases} c \frac{\partial \theta}{\partial t} - k \Delta \theta = f & \text{pour } (x, t) \in \Omega \times \mathbb{R}_*^+ \\ \theta(t, x) = 0 & \text{pour } (x, t) \in \partial \Omega \times \mathbb{R}_*^+ \\ \theta(t = 0, x) = \theta_0(x) & \text{pour } x \in \Omega \end{cases} \quad (1.8)$$

Le problème (1.8) est donc constitué d'une équation aux dérivées partielles munie de conditions aux limites et d'une condition initiale. A cause de la présence de conditions aux limites, on dit que (1.8) est un **problème aux limites**, mais on dit aussi que c'est un **problème de Cauchy** à cause de la donnée initiale en temps.

**Remarque 1.2.1** Dans ce modèle de propagation de la chaleur, il nous faut préciser les unités ou dimensions physiques : la température  $\theta$  s'exprime en Kelvin ( $K$ ), la chaleur spécifique  $c$  en Joule par kilogramme par Kelvin ( $J/(kg \times K)$ ), la conductivité thermique (par unité de masse)  $k$  en Joule mètre carré par kilogramme par Kelvin par seconde ( $Jm^2/(kg \times K \times s)$ ). D'un point de vue mathématique, nous allons très souvent oublier ces unités, et même ces constantes, en supposant que  $c$  et  $k$  valent 1 (cela revient à adimensionner les grandeurs physiques). •

**Remarque 1.2.2** Nous avons mentionné trois types de conditions aux limites, Dirichlet, Neumann, Fourier (mais il en existe d'autres) qui ont lieu sur l'intégralité de la frontière  $\partial \Omega$ . Bien sûr, on peut aisément imaginer des situations où les conditions aux limites sont mélangées : Dirichlet sur  $\partial \Omega_D$ , Neumann sur  $\partial \Omega_N$ , et Fourier sur  $\partial \Omega_F$ , avec  $\partial \Omega_D, \partial \Omega_N, \partial \Omega_F$  formant une partition de la frontière  $\partial \Omega$ . •

**Remarque 1.2.3** L'équation de la chaleur (1.8) est **linéaire** au sens où sa solution  $\theta$  dépend linéairement des données  $(f, \theta_0)$ . En physique cette propriété de linéarité est souvent traduite sous la forme d'un principe de superposition : une combinaison linéaire des données  $(f, \theta_0)$  conduit à une solution  $\theta$  qui est la même combinaison linéaire des solutions correspondant à chaque terme de la décomposition des données. D'un point de vue physique, la linéarité n'est qu'une hypothèse parmi d'autres. En effet, pour les problèmes à forte variation de température, la loi de Fourier est fautive, et il faut la corriger en supposant que la conductivité thermique  $k$  dépend en fait de la température  $\theta$  et de son gradient  $\nabla \theta$  (ce qui rend le problème non-linéaire). Encore pire, pour des phénomènes extrêmement rapides (explosion, par exemple) il est nécessaire d'abandonner le principe même de la loi de Fourier qui suppose la proportionnalité du flux de chaleur  $q$  avec le gradient de température  $\nabla \theta$ . En effet, cette hypothèse ("naturelle" à première vue) entraîne une propriété paradoxale : la chaleur se propage à une vitesse infinie dans le domaine  $\Omega$ . Nous verrons plus loin (voir la Remarque 1.2.9) comment établir ce paradoxe. Retenons pour l'instant que modéliser c'est faire des hypothèses et préciser leur domaine de validité... •

**Remarque 1.2.4** Le problème (1.8) n'est pas seulement un modèle de propagation de la chaleur. Il a en fait un caractère universel, et on le retrouve comme modèle de

nombreux phénomènes sans aucun rapport entre eux (il faut simplement changer le nom des diverses variables du problème). Par exemple, (1.8) est aussi connue sous le nom **d'équation de diffusion**, et modélise la diffusion ou migration d'une concentration ou densité à travers le domaine  $\Omega$  (imaginer un polluant diffusant dans l'atmosphère, ou bien une espèce chimique migrant dans un substrat). Dans ce cas,  $\theta$  est la concentration ou la densité en question,  $q$  est le flux de masse,  $k$  est la diffusivité, et  $c$  est la densité volumique de l'espèce. De même, la loi de conservation (1.2) est un bilan de masse, tandis que la loi constitutive (1.3) est appelée loi de Fick. •

**Remarque 1.2.5** Le problème (1.8) intervient aussi en finance où il porte le nom de **modèle de Black et Scholes**. Une variante de (1.8) permet de trouver le prix de l'option d'achat (ou call) d'une action qui vaut initialement  $x$  et qu'on pourra acheter au prix  $k$  dans un temps ultérieur  $T$ . Ce prix est la solution  $u$  de

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - ru + 1/2rx \frac{\partial u}{\partial x} + 1/2\sigma^2 x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 & \text{pour } (x, t) \in \mathbb{R} \times (0, T) \\ u(t = T, x) = \max(x - k, 0) & \text{pour } x \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (1.9)$$

Plus précisément,  $u(0, x)$  est le prix au temps  $t = 0$  de l'option d'achat de prix d'exercice  $k$  à l'échéance  $T > 0$ , et d'actif  $x$  en  $t = 0$ . On note  $\sigma$  la volatilité de l'action et  $r$  le taux d'intérêt. Remarquons que (1.9) est un problème avec condition finale et non pas initiale, mais que le signe de la dérivée seconde en espace est opposé à celui dans (1.8). Par conséquent, après inversion du temps (1.9) est bien une équation parabolique. •

Il existe de nombreuses variantes de l'équation de la chaleur (1.8) dont nous explorons certaines maintenant. Jusqu'ici nous avons supposé que la chaleur se propageait dans un milieu immobile ou au repos. Supposons à présent qu'elle se propage dans un milieu en mouvement comme, par exemple, un fluide animé d'une vitesse  $V(x, t)$  (une fonction à valeurs vectorielles dans  $\mathbb{R}^N$ ). Alors, il faut changer la loi constitutive car le flux de chaleur est la somme d'un flux de diffusion (comme précédemment) et d'un flux de convection (proportionnel à la vitesse  $V$ ), et des considérations similaires à celles qui précèdent nous conduisent à un problème, dit de **convection-diffusion**

$$\begin{cases} c \frac{\partial \theta}{\partial t} + cV \cdot \nabla \theta - k\Delta \theta = f & \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}_*^+ \\ \theta = 0 & \text{sur } \partial\Omega \times \mathbb{R}_*^+ \\ \theta(t = 0, x) = \theta_0(x) & \text{dans } \Omega \end{cases} \quad (1.10)$$

La différence entre (1.8) et (1.10) est l'apparition d'un terme de convection. On mesure la balance entre ce nouveau terme de convection et le terme de diffusion par un nombre sans dimension, appelé **nombre de Péclet**, défini par

$$\text{Pe} = \frac{cVL}{k}, \quad (1.11)$$