

Modélisation par équations aux dérivées partielles

Chapitre 1 : Exemples de modèles basés sur des edp

Philippe Villedieu

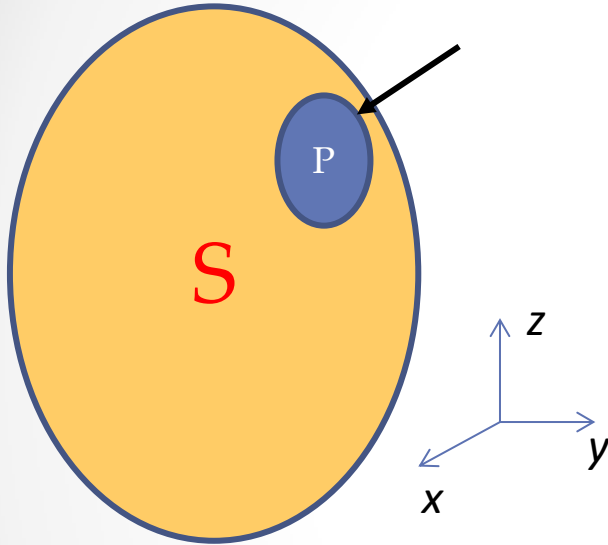
Philippe.villedieu@insa-toulouse.fr

Plan

1. Conduction de la chaleur dans un solide
2. Propagation des ondes acoustiques dans un solide
3. Transport d'un polluant dans un fluide
4. Modèle de réaction-diffusion en dynamique des populations

1.1 Modélisation du transport de la chaleur dans un solide

Sous partie
quelconque **P** de S



Solide S

Considérons une sous partie P de S. **P constitue un système thermodynamique fermé auquel on peut à chaque instant appliquer le 1er principe de la thermodynamique:**

$$\frac{d\mathcal{U}_P}{dt} = \dot{W}_P + \dot{Q}_P$$

où

- \mathcal{U}_P désigne **l'énergie interne** de P,
- \dot{W}_P désigne **le travail échangé par unité de temps** entre P et le reste du solide ou avec l'extérieur de S
- \dot{Q}_P désigne **la chaleur échangée par unité de temps** entre P et le reste du solide ou avec l'extérieur de S

1. Modélisation du transport de la chaleur dans un solide

Dans un solide, les variations relatives de volume sont en général très faibles devant les variations relatives de température (contrairement aux cas des gaz).

On peut montrer qu'il est possible de négliger le terme \dot{W}_P (qui implique un déplacement de matière) devant le terme \dot{Q}_P .

On a donc finalement l'équation suivante (valable pour tout sous-partie P de S):

$$(1) \quad \frac{d\mathcal{U}_P}{dt} = \dot{Q}_P$$

Il reste maintenant à :

- exprimer \mathcal{U}_P et \dot{Q}_P en fonction du champ de température $T(t,x)$ dans S,
- utiliser le fait que l'équation obtenue est valable pour toute sous-partie P de S afin d'en déduire une équation locale valable pour tout t et pour tout x de S (e.d.p.)

Remarque: pour un gaz à pression constante, l'équation (1) reste vraie à condition de remplacer l'énergie par l'enthalpie.

1. Modélisation du transport de la chaleur dans un solide

L'énergie étant une grandeur additive, on a par définition de la densité massique d'énergie interne u :

$$\text{Energie de P [J]} \leftarrow \mathcal{U}_P(t) = \int_P u(t, \mathbf{x}) dm = \int_P \rho(t, \mathbf{x}) u(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x} \rightarrow \text{Volume [m}^3\text{]}$$

\swarrow Energie massique [J kg⁻¹] \downarrow Masse [kg] \downarrow Masse volumique [kg m⁻³]

où ρ désigne **la masse volumique du solide** que l'on supposera constante par la suite (par soucis de simplicité).

Si on fait l'hypothèse que le solide est en équilibre thermodynamique local, on peut définir sa température en chaque point, notée $T(t, \mathbf{x})$, et on peut écrire que u est une fonction de T . On a donc:

$$\mathcal{U}_P(t) = \int_P \rho u(T(t, \mathbf{x})) d\mathbf{x}$$

D'où finalement la relation suivante (en omettant les variables t et \mathbf{x} pour alléger les notations) :

$$(2) \quad \frac{d\mathcal{U}_P}{dt} = \int_P \rho c(T) \frac{\partial T}{\partial t} d\mathbf{x} \quad \text{avec} \quad c(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{du}{dT}(T)$$

Chaleur spécifique du solide [J kg⁻¹ K⁻¹]

1. Modélisation du transport de la chaleur dans un solide

Les transferts de chaleur dans un solide ou entre un solide et l'extérieur peuvent se faire:

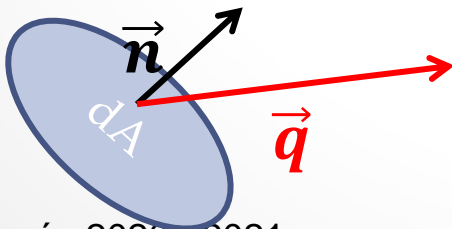
- **par conduction** (échange d'énergie de proche en proche entre les atomes ou les molécules du réseau)
- **par rayonnement** (échange d'énergie à distance entre les atomes ou les molécules par émission et absorption de photons)

Au températures usuelles, les échanges par rayonnement sont négligeables devant les échanges par conduction.

On supposera donc dans la suite que \dot{Q}_P provient uniquement de la conduction. Dans ce cas on peut écrire que:

$$(3) \quad \dot{Q}_P = - \int_{\partial P} \vec{q} \cdot \vec{n} dA$$

$\vec{q} \cdot \vec{n} dA$ correspond (par définition du vecteur \vec{q}) à la quantité de chaleur qui tranverse par unité de temps la surface dA de normale \vec{n} .



\vec{q} s'exprime en W m^{-2} (ou en $\text{J s}^{-1} \text{m}^{-2}$)

1. Modélisation du transport de la chaleur dans un solide

En regroupant (1), (2) et (3), on obtient l'équation:

$$\int_P \rho c(T) \frac{\partial T}{\partial t} d\mathbf{x} = - \int_{\partial P} \vec{q} \cdot \vec{n} dA$$

Or d'après le théorème de Green-Ostrogradsky:

$$\int_{\partial P} \vec{q} \cdot \vec{n} dA = \int_P \operatorname{div}(\vec{q}) d\mathbf{x}$$

d'où finalement l'équation :

$$\int_P \left[\rho c(T) \frac{\partial T}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{q}) \right] d\mathbf{x} = 0$$

Cette dernière équation étant vérifiée pour toute sous-partie P (suffisamment régulière) du solide S, on en déduit **l'équation locale** suivante:

$$(4) \quad \rho c(T) \frac{\partial T}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{q}) = 0$$

1. Modélisation du transport de la chaleur dans un solide

L'équation (4) n'est pas fermée (plus d'inconnues que d'équations). Pour fermer le problème, il faut relier le flux de chaleur à la température.

Pour cela on utilise la **loi semi-empirique de Fourier**:

$$(5) \quad \vec{q} = -\lambda(T) \vec{\nabla} T = -\lambda(T) \begin{pmatrix} \partial_x T \\ \partial_y T \\ \partial_z T \end{pmatrix}$$

λ est appelée **conductivité thermique du matériau** et s'exprime en $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$.

C'est une fonction strictement positive de la température. La loi (5) exprime le fait que la chaleur « s'écoule » du chaud vers le froid (d'où le signe -).

Finalement en regroupant (4) et (5), on obtient l'équation dite de la chaleur:

$$(6) \quad \rho c(T) \frac{\partial T}{\partial t} - \text{div}(\lambda(T) \vec{\nabla} T) = 0$$

1. Modélisation du transport de la chaleur dans un solide

Si, sur la plage de température considérée, on peut négliger les variations de c et λ , on peut simplifier l'équation (6) et l'écrire sous la forme:

$$(7) \quad \frac{\partial T}{\partial t} - D \operatorname{div}(\vec{\nabla} T) = 0 \quad \text{avec :}$$

$$D = \frac{\lambda}{\rho c} \quad [\text{m}^2\text{s}^{-1}]$$

Par définition de l'opérateur Δ (Laplacien), on a:

Diffusivité thermique du solide

$$\operatorname{div}(\vec{\nabla} T) = \Delta T = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

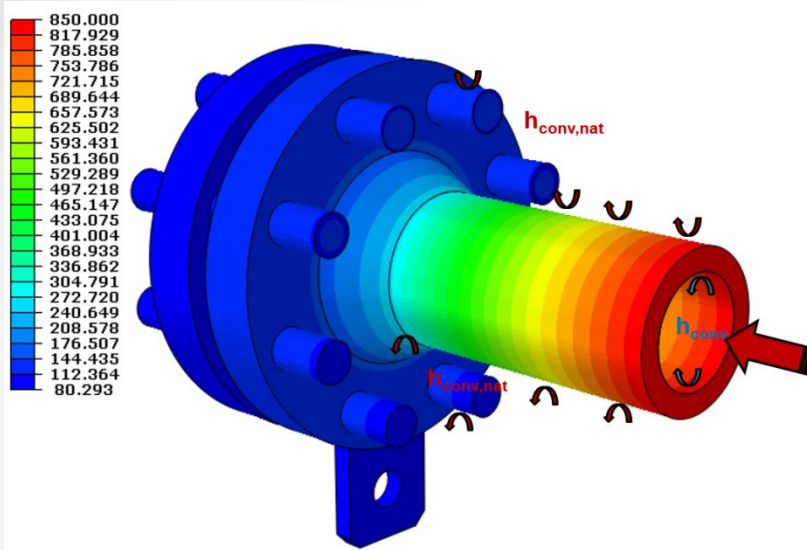
d'où finalement l'équation:

$$(8) \quad \frac{\partial T}{\partial t} - D \Delta T = 0$$

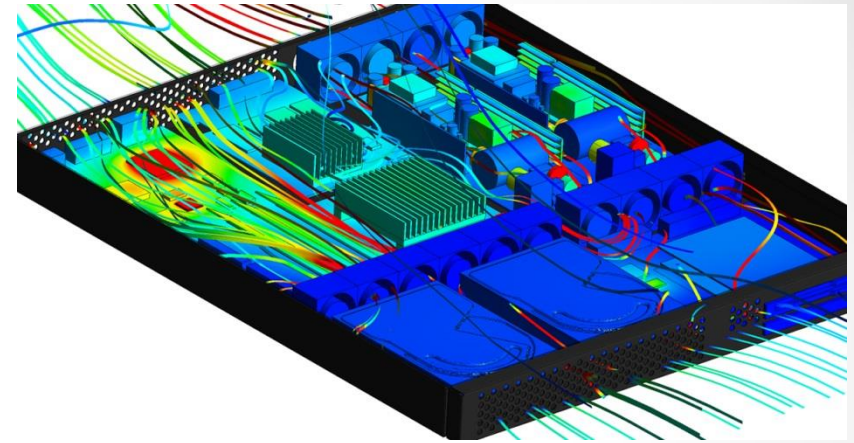
La chaleur se propage d'autant plus vite dans un solide que D est grand. On peut montrer à partir de (8) que la distance caractéristique sur laquelle la chaleur diffuse pendant un temps τ a pour expression $l \approx \sqrt{D\tau}$. Il suffit d'appliquer (8) et d'écrire formellement que:

$$\frac{\partial T}{\partial t} \approx \frac{\delta T}{\tau} \quad \Delta T \approx \frac{\delta T}{l^2}$$

1. Modélisation du transport de la chaleur dans un solide



Simulation numérique
(ANSYS) du refroidissement
d'une pièce métallique par un
flux d'air froid



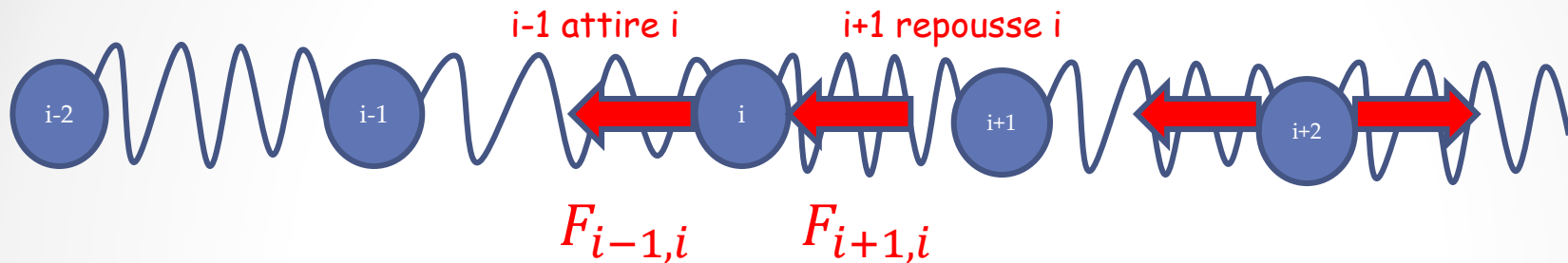
Simulation numérique
(ANSYS) du refroidissement
d'une carte à puce par un
flux d'air froid

Dans les deux cas, la simulation couple la résolution numérique de l'équation de la chaleur dans le solide et dans l'air (voir suite).

2. Modélisation de la propagation du son dans un solide

Modèle unidimensionnel

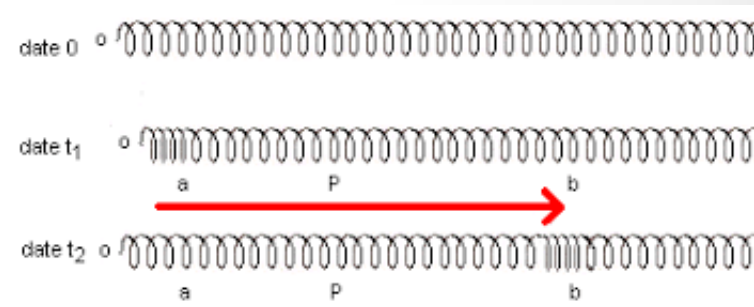
Considérons un chaîne linéaire d'atomes liés entre eux par des forces de rappel d'origine électrique. On peut modéliser cette chaîne par un ensemble de N points matériels de masse m liés entre eux par des ressorts de raideur k .



Contrairement au cas de la chaleur, on s'intéresse à la modélisation du déplacement d'ensemble des atomes le long de la chaîne provoqué par une sollicitation extérieure.

A un instant donné, des atomes de la chaîne sont mis en mouvement à un endroit donné sur la chaîne (en général à une extrémité) et ce mouvement se transmet de proche à tous les atomes par l'intermédiaire des forces électriques liant les atomes entre eux.

L'objectif est de modéliser ce phénomène de propagation.



2. Modélisation de la propagation du son dans un solide

Modèle unidimensionnel

- Notons u_i le déplacement de l'atome i par rapport à sa position d'équilibre (en l'absence de la sollicitation).
- **Il est important de noter que u_i est en général très grand devant la distance interatomique moyenne a .** On s'intéresse donc ici à des **vibrations collectives du réseau atomique** (mouvement d'ensemble des atomes), alors que dans le mouvement d'agitation thermique il s'agit de vibrations individuelles non cohérentes et de faible amplitude

La loi de Newton appliquée à l'atome i s'écrit:

$$(1) \quad m \frac{d^2 u_i}{dt^2} = -k(u_i - u_{i-1}) + k(u_{i+1} - u_i)$$

On pose

$$\rho = \frac{m}{a^3} \quad (\text{masse volumique du solide})$$

$$E = \frac{k}{a} \quad (\text{E s'identifie avec le **module d'Young du solide** et peut donc être mesuré facilement par une simple expérience de traction pure})$$

2. Modélisation de la propagation du son dans un solide

Modèle unidimensionnel

Avec ces notations, l'équation (1) peut être réécrite sous la forme:

$$(2) \quad \frac{d^2 u_i}{dt^2} - \frac{E}{\rho} \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{a^2} = 0$$

On note x_i la position d'équilibre de l'atome i et on pose: $u_i = u(t, x_i)$.

La fonction u est appelée champ de déplacement.

Elle n'est rigoureusement définie qu'aux noeuds x_i . Cependant, à l'échelle macroscopique, la distance interatomique a (de l'ordre de 10^{-10} m) est négligeable et **on peut donc considérer que u est définie pour tout réel x . On dit que le solide est assimilé à un milieu continu.**

L'équation (2) peut donc encore s'écrire sous la forme :

$$(3) \quad \frac{\partial^2 u(t, x_i)}{\partial t^2} - \frac{E}{\rho} \frac{u(t, x_{i+1}) - 2u(t, x_i) + u(t, x_{i-1}))}{a^2} = 0$$

2. Modélisation de la propagation du son dans un solide

Modèle unidimensionnel

Pour finir, il suffit de noter que:

$$\begin{aligned} & \frac{u(t, x_{i+1}) - 2u(t, x_i) + u(t, x_{i-1}))}{l^2} \\ &= \frac{1}{l} \left[\frac{u(t, x_{i+1}) - u(t, x_i)}{l} - \frac{u(t, x_i) - u(t, x_{i-1}))}{l} \right] \\ &\approx \frac{1}{l} \left[\frac{\partial u}{\partial x} \left(t, x_{i+\frac{1}{2}} \right) - \frac{\partial u}{\partial x} \left(t, x_{i-\frac{1}{2}} \right) \right] \\ &\approx \frac{\partial^2 u(t, x_i)}{\partial x^2} \end{aligned}$$

Cette approximation est d'autant plus exacte que a est petit devant l'échelle de longueur Λ caractéristique des variations de u (longueur d'onde), hypothèse toujours largement vérifiée en pratique.

2. Modélisation de la propagation du son dans un solide

Modèle unidimensionnel

On en déduit finalement l'équation suivante pour la fonction u

$$(4) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

avec par definition :

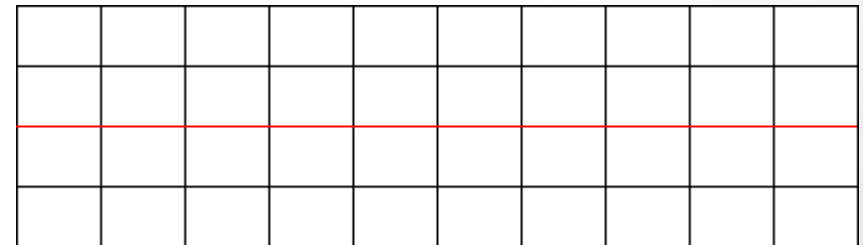
$$c = \sqrt{\frac{E}{\rho}}$$

L'équation (4) est appelée équation des ondes (monodimensionnelle). En l'absence de conditions aux limites (chaîne infinie), sa solution générale est de la forme*:

$$u(t, x) = g(x - ct) + f(x + ct)$$

où f et g sont deux fonctions arbitraires (deux fois dérivables par rapport à x et t) dépendant des conditions initiales.

Le premier terme (g) correspond à une onde se propageant dans le sens des x croissants à la vitesse c , le second (f) à une onde se propageant dans le sens des x décroissants à la vitesse $-c$.



* Il suffit de poser $\theta = x - ct$ et $\mu = x + ct$. Avec ces nouvelles variables l'équation (4) est équivalente à : $\frac{\partial^2 u}{\partial \theta \partial \mu} = 0$ d'où l'existence de deux fonctions f et g telles que: $u = f(\theta) + g(\mu)$.

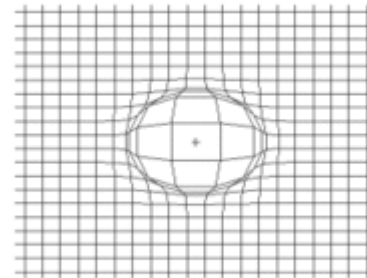
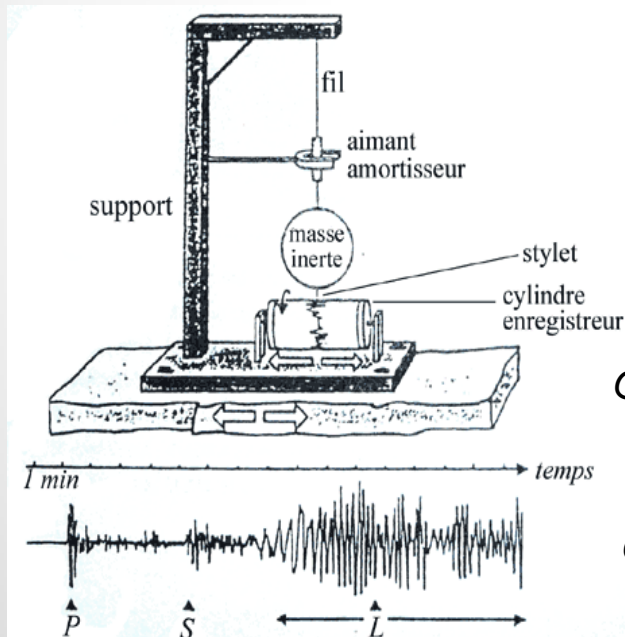
2. Modélisation de la propagation du son dans un solide

Généralisation au cas multidimensionnel

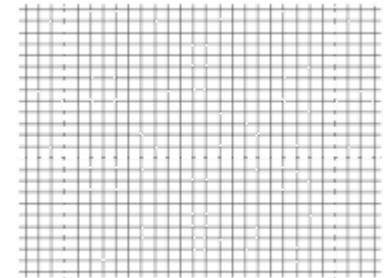
Dans le cas tridimensionnel, l'équation des ondes s'écrit:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) = 0 \quad \text{soit :} \quad (5) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \Delta u = 0$$

Exemple d'application: modélisation des séismes



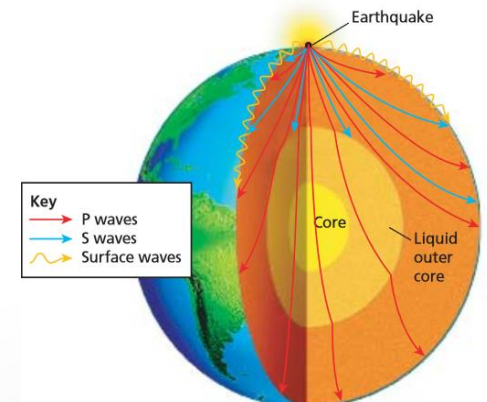
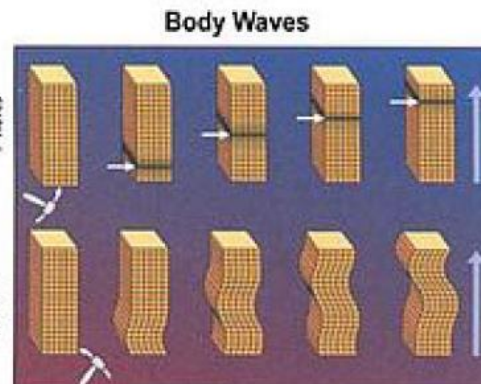
Onde sphérique de type P



Onde plane de type P

Onde P

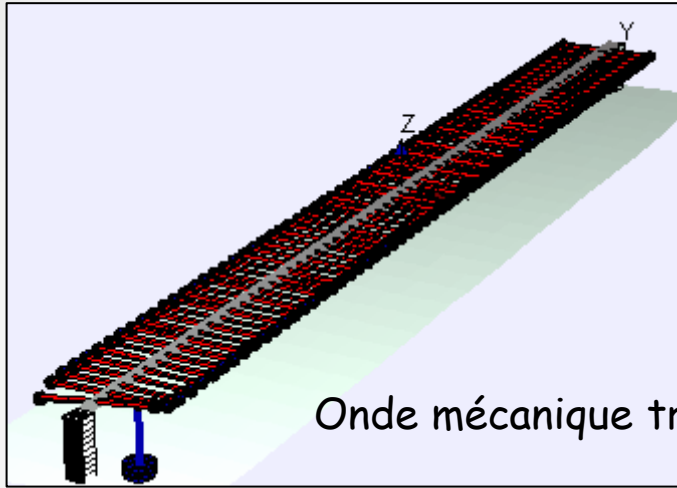
Onde S



2. Modélisation de la propagation du son dans un solide

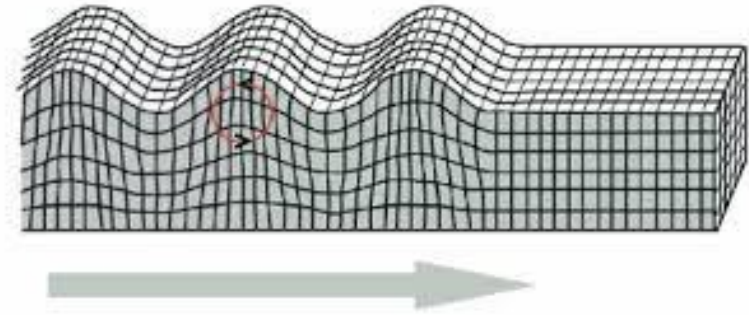
Autres exemples d'ondes

La machine à onde de John Shive



Onde mécanique transversale

Rayleigh Wave



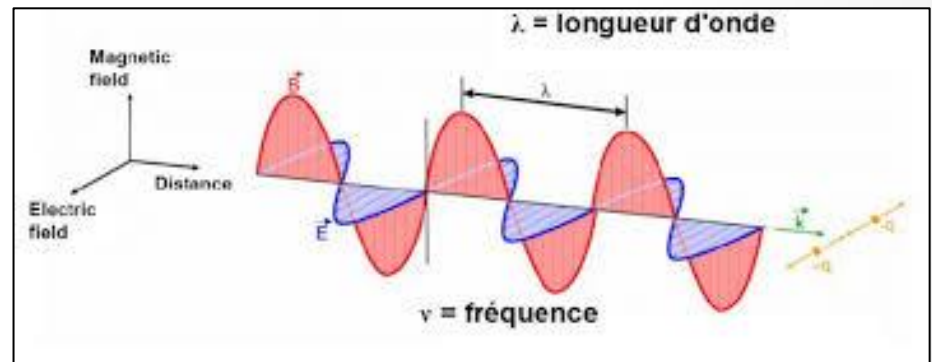
Onde mécanique de surface

Propagation d'une onde sonore plane



Onde acoustique dans l'air

<https://www.youtube.com/watch?v=6dIqCQ-WA10>



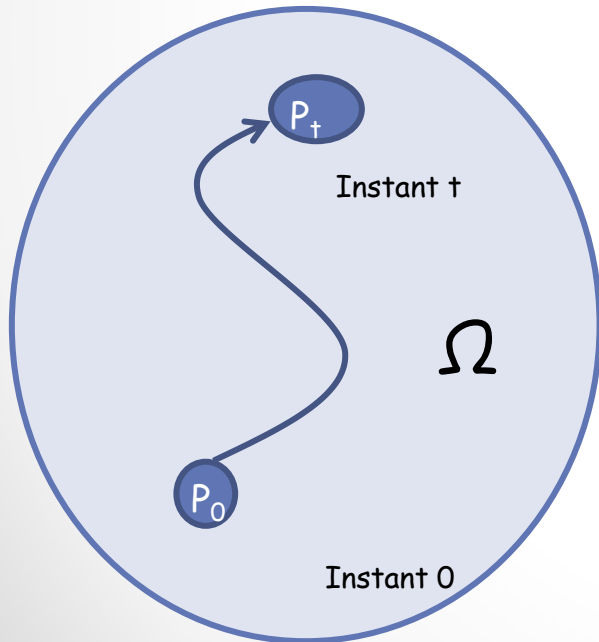
Onde électromagnétique plane

Les champs électrique et magnétique oscillent dans des plan orthogonaux à la direction de propagation.

3. Transport d'un polluant dans un fluide

Cas avec convection pure

- On considère un fluide en mouvement occupant un domaine Ω de l'espace. On suppose connue sa vitesse $\vec{V}(t, \mathbf{x})$ en tout point et à tout instant.
- **On souhaite modéliser le transport d'un polluant par le fluide** en admettant que le polluant se déplace localement exactement à la même vitesse que le fluide.
- On note $y(t, \mathbf{x})$ la fraction massique de polluant au point \mathbf{x} à l'instant t . Pour obtenir l'équation vérifiée par y , on écrit l'équation traduisant la conservation de la masse du polluant sur toute sous-partie P du fluide, occupant le domaine P_t à l'instant t :



$$\frac{d}{dt} \int_{P_t} \rho(t, \mathbf{x}) y(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0$$

d'où en supposant que le polluant se déplace à la même vitesse que le fluide :

$$\int_{P_t} \frac{\partial \rho y}{\partial t} d\mathbf{x} + \int_{\partial P_t} \rho y \vec{V} \cdot \vec{n} dA = 0$$

d'où en utilisant le théorème de Green-Ostrogradsky :

$$\boxed{\int_{P_t} \left[\frac{\partial \rho y}{\partial t} + \text{div} (\rho y \vec{V}) \right] d\mathbf{x} = 0}$$

3. Transport d'un polluant dans un fluide

Cas avec convection pure

En utilisant une nouvelle fois le fait que P_t est arbitraire, on obtient finalement l'edp suivante:

$$(1) \quad \frac{\partial \rho y}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho y \vec{V}) = 0$$

Par ailleurs, en appliquant le même raisonnement pour la conservation de la masse du fluide, on peut également établir l'équation :

$$(2) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho \vec{V}) = 0$$

En combinant l'équation (1) avec l'équation (2), on obtient finalement l'équation fondamentale suivante pour la fonction y :

$$(3) \quad \frac{\partial y}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} y = 0$$

Cette équation modélise le transport d'un traceur passif à la vitesse du fluide.

3. Transport d'un polluant dans un fluide

Cas avec convection & diffusion

On reprend le même problème mais **on distingue cette fois que la vitesse du polluant** (c'est-à-dire la vitesse moyenne locale des molécules de polluant), que l'on note \vec{V}_p , **de celle du fluide**.

En reprenant exactement les mêmes arguments que précédemment, on trouve cette fois l'équation suivante:

$$(4) \quad \frac{\partial \rho y}{\partial t} + \text{div}(\rho y \vec{V}_p) = 0 \quad \text{avec:} \quad \vec{V}_p = \vec{V} + \delta \vec{V}$$

$\delta \vec{V}$ s'appelle **vitesse de diffusion du polluant**. Elle est liée au mouvement d'agitation désordonné des molécules au sein du fluide.

Pour fermer le modèle (4), il faut utiliser une relation semi-empirique permettant de relier $\delta \vec{V}$ à \vec{V}_y . Le modèle le plus souvent utilisé est la loi de Fick:

$$\delta \vec{V} = -D \vec{V} \ln(y) = -D \frac{\vec{V}_y}{y}$$

D est appelé **coefficient diffusion** du polluant dans le fluide (il dépend à la fois de la nature du polluant et du fluide considéré)

3. Transport d'un polluant dans un fluide

Cas avec convection & diffusion

On obtient donc l'équation suivante:

$$\frac{\partial \rho y}{\partial t} + \operatorname{div} (\rho y \vec{V}) - \operatorname{div} (\rho D \vec{\nabla} y) = 0$$

En combinant cette équation avec l'équation (2) exprimant la conservation de la masse du fluide, on obtient finalement :

$$(5) \quad \rho \frac{\partial y}{\partial t} + \rho \vec{V} \cdot \vec{\nabla} y - \operatorname{div} (\rho D \vec{\nabla} y) = 0$$

Cette équation est appelée **équation de convection-diffusion**.

On peut également tenir compte de termes source ou puit modélisant par exemple l'émission du polluant, son dépôt sur des surfaces, des réactions chimiques entre le polluant et d'autres espèces chimiques du fluide. On obtient alors un modèle de la forme:

$$(6) \quad \rho \frac{\partial y}{\partial t} + \rho \vec{V} \cdot \vec{\nabla} y - \operatorname{div} (\rho D \vec{\nabla} y) = R(y)$$

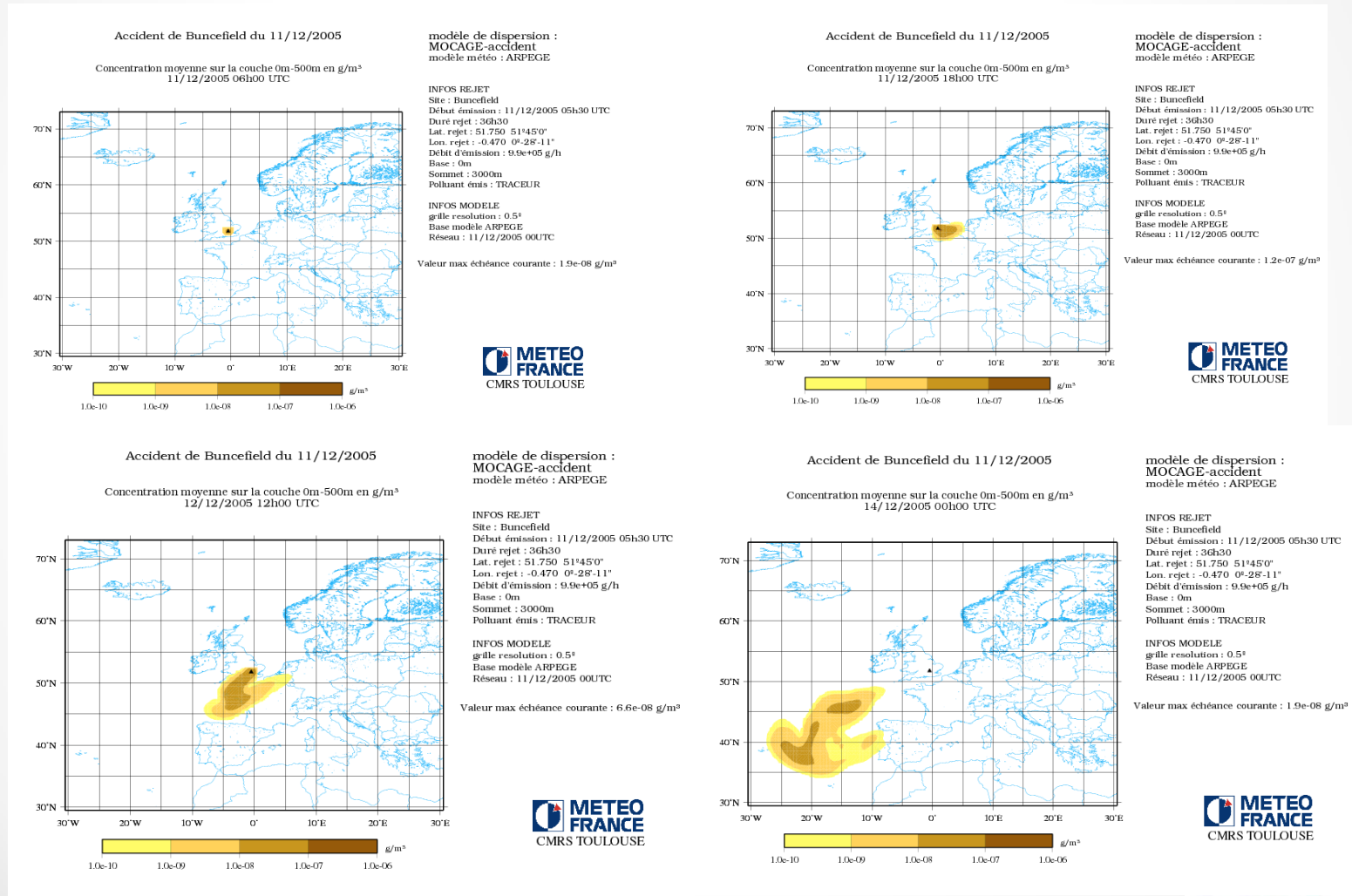
où R modélise le taux volumique de production (de disparition si $R < 0$) du polluant.

x

3. Transport d'un polluant dans un fluide

Exemple d'application

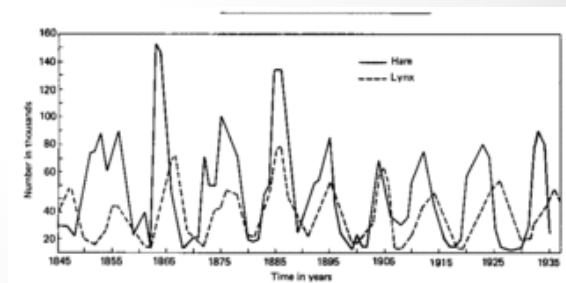
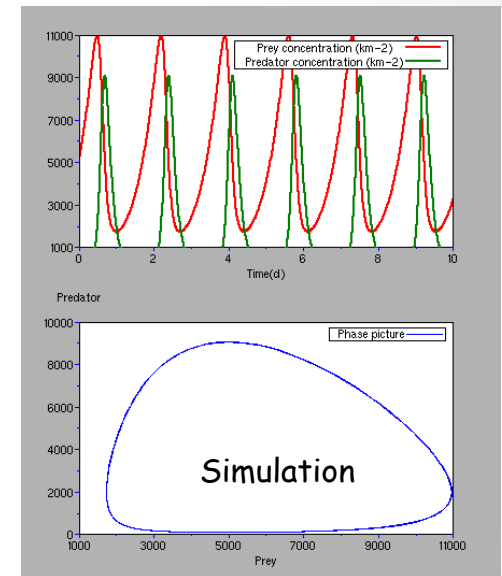
Moélisation de la dispersion d'un polluant dans l'atmosphère suite à un accident



4. Modèle de Dynamique des populations

Modèle prédateurs - proies

- **Modèle de Lotka-Volterra (1926)**
- Deux espèces sur le même territoire : une herbivore, une carnivore. Exemple : lapins et lynx dans le nord du Canada.
- R = nombre de lapins, F = nombre de lynx
- Le modèle de LV est un modèle dynamique en temps continu à 4 paramètres (que l'on doit déterminer à partir de données d'observation)



Données du Canada entre 1845 et 1935

$$(LV) \begin{cases} \dot{R} = R (r_1 - a_1 F) \\ \dot{F} = F (-r_2 + a_2 R) \end{cases}$$

4. Modèle de Dynamique des populations

Prise en compte de la répartition spatiale

- Le modèle de Lokta-Volterra ne tient pas compte de la distribution spatiale des populations.
- On peut complexifier le modèle en considérant R et F comme des fonctions du temps **et de l'espace** représentant des **nombre d'individus par unité de surface**.
- On peut (en première approximation) modéliser les mouvements de population comme des phénomènes de diffusion isotrope (hypothèse sous-jacente de mouvements aléatoires à petite échelle).
- On obtient alors un **modèle de réaction – diffusion**.

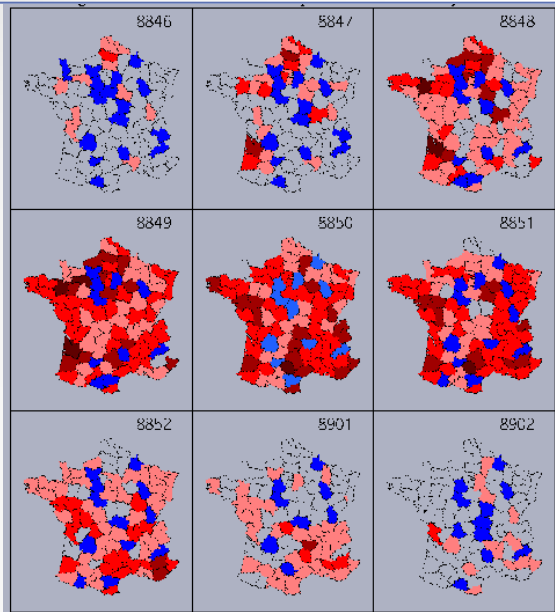


Ronald Fisher (1890-1962)

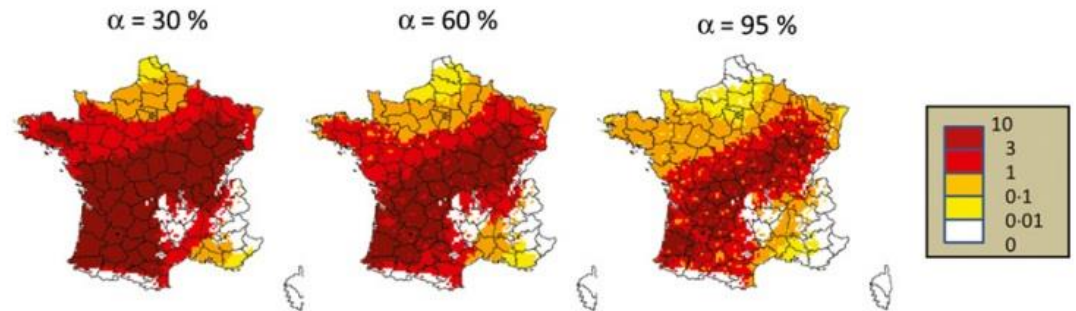
$$(RD) \begin{cases} \partial_t R - D_1 \Delta R = R (r_1 - a_1 F) \\ \partial_t F - D_2 \Delta F = F (-r_2 + a_2 R) \end{cases}$$

4. Modèle de Dynamique des populations

Modèles de réaction-diffusion



Propagation et extinction d'une épidémie de grippe



Modélisation de la propagation du frelon asiatique en France pour trois valeurs différentes d'un paramètre du modèle rendant compte de l'influence des mesures de contrôle humaines sur la propagation.

Référence: Robinet, C., Suppo, C., & Darrouzet, E. (2016). Rapid spread of the invasive yellow-legged hornet in France: the role of human-mediated dispersal and the effects of control measures. *Journal of Applied Ecology*. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/1365-2664.12724/full>

- Ces modèles peuvent être utilisés pour simuler la croissance forestière, l'invasion d'un territoire par une nouvelle espèce, la propagation d'une épidémie ...
- La principale difficulté est l'identification des paramètres et la prise en compte de leurs variations dans le temps et l'espace → Assimilation de données
- Ces modèles, même très simples, peuvent permettre d'expliquer l'apparition spontanée de formes observées dans le monde vivant (par exemple les rayures d'un zèbre).

References: **A. Turing**. *The chemical basis of morphogenesis*, Phil. Trans. R. Soc. Lond. B 1952 **237**, 37-72. & **J.D. Murray**. *Mathematical Biology*, tomes 1 et 2, Interdisciplinary applied mathematics, Springer (1989).