Institut national de la recherche scientifique

PLAN DE COURS

Nom du cours :

Mathématiques appliquées et modélisation numérique en sciences de l'environnement

Sigle du cours :

ETE406

Offert au trimestre :

(Session d'automne)

Nombre de crédits :

3

Heure :		Date :		Local :	

PROFESSEUR RESPONSABLE ET COORDONNÉES

Claudio Paniconi (claudio.paniconi@ete.inrs.ca, bureau 3333, 418 654-3108)

AUTRES PROFESSEURS PARTICIPANTS AU COURS, LE CAS ÉCHÉANT

Cliquez ici pour taper du texte.

DESCRIPTION DU COURS

Le cours présentera les principes mathématiques fondamentaux du calcul, de l'algèbre linéaire et de l'analyse fonctionnelle. Bâtissant sur ceux-ci, nous étudierons de puissantes méthodes de transformation, techniques de résolution analytique et approches de discrétisation numérique. Le cours met l'accent en particulier sur les équations aux dérivées ordinaires et partielles, sur la compréhension des processus physiques représentés par ces équations et sur l'illustration de modèles applicables en sciences de l'eau, de la Terre et de l'environnement qui sont basés sur les principes, méthodes et équations introduits.

L'étudiant(e) s'inscrivant à ce cours devra posséder une connaissance de mathématiques de niveau 1er cycle (provenant d'un programme en sciences ou en génie, par exemple). Auditeurs libres sont les bienvenus. Le cours est organisé en 12 thèmes, tel qu'indiqué dans les modules ci-dessous.

OBJECTIFS DU COURS

- Acquérir compétence dans une large gamme de techniques mathématiques, ainsi que des aperçus sur les fondements physiques des méthodes présentées;
- Apprendre les principes fondamentaux de la modélisation (conservation de la masse, équations régissantes et constitutives, cohérence dimensionnelle, conditions initiales et aux bornes, mesures de performance numérique, erreurs de discrétisation, etc);

- À travers des exemples tirés de l'écologie, de la gestion des ressources en eau, de l'hydrogéologie et d'autres domaines, voir comment des modèles complexes peuvent être bâtis (de systèmes unidimensionnels à systèmes multidimensionnels, de phénomènes linéaires à phénomènes non linéaires, de simples processus ou composantes à systèmes couplés avec des interactions entre espéces, etc).

CONTENU DU COURS

Module 1. Quelques préliminaires
Nous débutons avec une révision des bases du calcul qui fourniront les fondements pour le reste du cours. Cette révision inclura: la trigonométrie; les transformations de systèmes de coordonnées; les fonctions logarithmiques et exponentielles; les nombres complexes et les fonctions avec valeurs complexes; le théorème des accroissements finis; les expansions en série de Taylor et en série de puissance; les opérateurs gradient et divergence pour les espaces multidimensionnels; la somme de Riemann; et l'intégration. Nous présenterons des méthodes d'intégration soit analytiques que numériques (la dichotomie analytique/numérique sera un thème constant durant le cours). Les liens entre la règle des trapèzes, la règle de Simpson et des règles de quadrature plus robustes ou d'ordre plus élevés pour l'intégration numérique seront discutés. Nous introduirons aussi l'important théorème de la divergence et le lemme de Green, et nous montrerons leurs liens, dans le cas des espaces unidimensionnels, avec la règle d'intégration par parties.

Module 2. Modèle logistique et autres modèles de la dynamique des populations et des écosystèmes
De nombreux systèmes dynamiques manifestent des comportements de croissance ou de décroissance exponentielle. Nous examinerons quelques exemples de modèles simples mais puissants pour ces systèmes, allant de modèles de cinétique de premier ordre (e.g., décroissance radioactive) au modèle proie–prédateur de Lotka-Volterra. Une attention particulière sera portée sur le modèle logistique de croissance de la population, et sur ses nombreuses variantes dans les domaines de la finance, de l'épidémiologie, du génie thermique, etc.

Module 3. Principe de conservation de la masse et l'équation de continuité de la dynamique des fluides
Dans le module précédent nous avons présenté diverses équations de modèles, et par la suite nous avons procédé à une analyse de ces modèles de différentes perspectives. Dans ce module nous allons faire, dans un sens, le contraire. Nous allons, premièrement, stipuler en détail la problématique à résoudre, et par la suite nous allons soigneusement construire, ou développer, les équations qui nous permettent d'aborder le problème posé. Dans une première illustration de ce processus d'élaboration de modèles (*model-building*), nous allons voir comment un modèle de type logistique, similaire à ceux du module précédent, ressort également quand nous utilisons le principe de conservation de la masse pour développer un modèle pour la pollution d'un lac (le dit modèle de mélange). Par la suite, appliquant ce principe de façon plus rigoureux à un volume de fluide infinitésimal nous amènera à l'équation de continuité de la dynamique des fluides et à un premier aperçu d'une équation aux dérivées partielles. Sur la base de cette équation et de quelques relations constitutives nécessaires, deux exemples importants d'une équation de conservation de la masse dans le domaine de l'hydrogéologie seront développés, et des liens seront tirés au concept du bilan hydrologique de l'eau qui est à la base de la plupart des modèles hydrologiques.

Module 4. Équations différentielles et géométrie différentielle
Dans les deux modules précédents nous avons vu comment les équations aux dérivées ordinaires et partielles découlent naturellement en formulant un problème physique (pour la croissance d'une population, par exemple) en termes mathématiques. Avant de considérer plus formellement les "odes" (*ordinary differential equations*) et les "pdes" (*partial differential equations*), respectivement, dans les

deux modules suivants, nous présentons ici quelques éléments et cadres qui sont nécessaires pour interpréter et résoudre ces équations: les classifications des équations différentielles; les conditions initiales et les conditions aux bornes (ou aux limites); la méthode des images pour conditions de type Dirichlet et de type Neumann; les équations paramétriques; et les vecteurs normaux et les plans tangents. Nous présenterons aussi une solution générale à une certaine classe d'odes linéaires (d'ordre un) et non linéaires (Bernoulli), et nous examinerons une application d'une transformation de coordonnées pour résoudre un problème (inverse) classique en hydrogéologie.

Module 5. Équations aux dérivées ordinaires ("odes")
Nous allons nous concentrer, dans ce module sur les équations aux dérivées ordinaires, sur une gamme de techniques pour résoudre, analytiquement, quelques classes spéciales de ces équations ainsi que quelques cas spéciaux (e.g., les équations d'Euler). En faisant ceci, nous introduirons des concepts, terminologies, définitions et résultats qui s'étendent ou qui s'appliquent aussi aux équations aux dérivées partielles: les équations différentielles homogènes; les équations quadratiques; la linéarité et la non linéarité; l'indépendance linéaire de deux fonctions et le Wronskian; la méthode de réduction de l'ordre; le principe de superposition; et les expansions en fractions partielles.

Module 6. Équations aux dérivées partielles ("pdes")
Nous allons développer un système de classification pour les équations aux dérivées partielles linéaires d'ordre deux qui a des implications importantes pour les applications pratiques de ces pdes et pour les algorithmes numériques utilisés pour les résoudre. Le problème *Cauchy data* que nous analyserons pour établir les formes canoniques du système de classification nous fournira des aperçus sur le comportement des conditions aux bornes et des courbes caractéristiques sur la surface qui représente la solution d'une pde, ainsi que sur l'utilisation des transformations de systèmes de coordonnées et leurs Jacobiens asssociés. Les trois formes canoniques (et leurs équations archétypes correspondantes) seront résumées: hyperbolique (équation de l'onde); parabolique (équation de diffusion); et elliptique (équation de Poisson et équation de Laplace). Un exemple de la procédure pour transformer une pde à sa forme canonique sera présenté pour l'équation de Tricomi. Dans un deuxième exemple, nous illustrerons une technique de résolution analytique (la méthode de séparation de variables) qui peut être utilisée quand la solution de la pde est d'une forme particulière.

Module 7. Fonctions de Green
Dans le Module 5 sur les odes nous avons présenté des puissants résultats théoriques qui garantissent l'existence de solutions uniques à des problèmes de valeurs initiales (IVPs, *initial value problems* – voir le Module 4) linéaires d'ordre deux. Ces résultats ont inclus aussi le concept d'un ensemble fondamental de solutions pour le cas d'une ode homogène, ainsi qu'une procédure pour trouver de telles solutions. Les fonctions de Green, sujet de ce module, sont à certains égards l'homologue de ces résultats pour les problèmes de valeurs aux bornes (BVPs, *boundary value problems*) linéaires, qu'ils soient des odes ou des pdes. Nous développerons, via un exemple, la procédure pour trouver la fonction de Green pour un BVP linéaire, et nous montrerons quelques unes des propriétés importantes des fonctions de Green. Nous discuterons, en outre, comment la fonction de Green caractérise la réponse impulsionnelle d'un système (en faisant ceci, nous introduirons aussi la fonction delta de Dirac et l'opération de convolution). Cette caractérisation fournit un moyen très utile pour analyser les impacts d'un terme de forçage dans un système physique qui est représenté par une équation différentielle linéaire (l'exemple classique de la vibration d'une corde sera utilisé pour illustrer ceci).

Module 8. Méthode de la transformée de Laplace (MTL)
Ayant focalisé sur les BVPs dans le module précédent, nous retournons maintenant aux IVPs, et nous développerons une méthode de transformée intégrale qui a quelques similitudes avec la méthode des fonctions de Green. La MTL transforme une équation différentielle linéaire en équation algébrique, ce qui

réduit considérablement la complexité de résoudre l’équation originale. Les transformées de Laplace et les transformées inverses de Laplace de plusieurs fonctions élémentaires seront démontrées, ainsi que des résultats importants concernant les transformées de Laplace des dérivées et les dérivées des transformées de Laplace. Dans le contexte de MTL, nous discuterons aussi les fonctions continues par morceaux, la convergence d’intégrales impropres et les théorèmes de *shifting*. Le dit deuxième théorème de shifting dépend sur la fonction échelon unité (ou fonction échelon Heaviside), qui à son tour est liée à la fonction delta de Dirac que nous avons introduit dans le module précédent. La fonction échelon unité a un grand nombre d’applications pour des systèmes dynamiques qui sont caractérisés par des forçages discrets, intermittents, périodiques ou continus par morceaux.

Module 9. Algèbre linéaire et analyse fonctionnelle
Nous présenterons une révision concise de l’algèbre linéaire et quelques concepts et résultats fondamentaux de l’analyse fonctionnelle. Nous utiliserons des systèmes simples et petits (2 x 2 ou 3 x 3) à titre d’illustration. Les techniques que nous allons introduire, ou des variantes de celles-ci, pourront par la suite être appliquées pour résoudre des systèmes d’équations contenant des centaines, des milliers, des millions, … de variables. Certaines idées et formalismes introduites dans ce module joueront un rôle important dans la présentation de méthodes numériques dans les prochains trois modules. Les sujets qui seront traités incluent: les déterminants et la règle de Cramer; les conditions pour l’existence d’une solution unique (matrices non singulières); les matrices creuses, symétriques et définies positives; les formes quadratiques et le problème de minimisation; les vecteurs de base, les vecteurs orthogonaux, les opérateurs de projection et les métriques des normes; les valeurs propres et les vecteurs propres; et le lien entre le rayon spectral (d’une matrice) et la convergence (d’une procédure itérative).

Module 10. Méthodes itératives pour les équations linéaires et non linéaires
Une méthode itérative simple (Jacobi) émane directement de notre exploration de systèmes d’équations linéaires algébriques dans le précédent module. C’est une méthode de point fixe, et nous l’utiliserons pour introduire des concepts tels que la convergence et l’analyse des erreurs qui sont très importants pour les algorithmes numériques. Nous retournerons à ces concepts dans la deuxième partie, sur les équations non linéaires. Suivant notre bref examen de la méthode de Jacobi, nous présenterons en détail la méthode prototype pour résoudre par itération des systèmes linéaires, à savoir la méthode des gradients conjugués. Dans la deuxième partie de ce module, nous passerons aux équations non linéaires, et pour cette partie aussi nous commencerons par une méthode rudimentaire, mais qui fournira néanmoins quelques aperçus très utiles. Par la suite, nous présenterons la méthode itérative prototype pour les équations non linéaires, à savoir la méthode de Newton. Le concept de matrices et équations mal conditionnées sera aussi discuté.

Module 11. Méthode des éléments finis
Les nombreuses méthodes élégantes pour résoudre analytiquement des odes et des pdes que nous avons examiné dans les modules précédents ne sont malheureusement pas toujours applicables, en raison de non linéarités ou coefficients variables dans l’équation, d’une forme irrégulière du domaine du problème, de conditions aux bornes complexes et divers autres facteurs. Des approches numériques sont donc souvent requises. Nous allons commencer par une très brève présentation de la méthode des différences finies, qui de plus révélera comment différents choix de discrétisation mènent à différents ordres de précision. Ceci sera suivi par une présentation beaucoup plus détaillée de la méthode des éléments finis (FEM, *finite element method*) qui inclura des définitions de fonctions d’essai et fonctions de base, de la méthode de Galerkin et d’une variété de critères de performance numérique. Une application de FEM à l’équation de Richards pour l’écoulement de l’eau dans un milieu poreux à saturation variable sera fourni pour référence. Pour conclure ce module, nous allons de nouveau emprunter des idées et concepts de l’algèbre linéaire et de l’analyse fonctionnelle pour montrer comment un BVP donné peut être formulé de trois façons très différentes et pourtant équivalentes – à savoir les formulations

différentielle, variationnelle et de minimisation – et comment la dite formulation faible peut être avantageuse.

Module 12. Analyse numérique et systèmes couplés
Dans la première partie de ce module, nous exécuterons une analyse numérique de différentes techniques de discrétisation appliquées à l'équation classique d'advection–diffusion. L'analyse introduira les équations aux différences et le nombre de Péclet de la grille, et illustrera des concepts importants de diffusion numérique, d'oscillations et de stabilité. Des méthodes *upwind* seront discutées par la suite, et le nombre de Courant sera introduit. Nous terminons le module (et le cours) avec un coup d'œil très rapide aux complexités de la modélisation dans un contexte réel. Nous utiliserons deux exemples (en particulier, un modèle hydrologique intégré eaux de surface / eaux souterraines à l'échelle d'un bassin versant et un modèle d'écoulement et de transport à densité variable pour des phénomènes d'intrusion d'eau saline) pour illustrer différentes conceptualisations et représentations de systèmes couplés (interactions entre processus, entre composantes et à travers des interfaces).

MATÉRIEL DIDACTIQUE ET APPROCHES PÉDAGOGIQUES

Le cours est structuré en 13 sessions hebdomadaires de 3 heures et une 14e session pour l'examen final. Les notes de cours pour chaque module seront distribuées à l'avance.

ÉVALUATION

- Devoirs (60%)
- Examen final (40%)

Pour plus de détails:
Politique d'intégrité en recherche:
(http://www.inrs.ca/sites/default/files/inrs/politiques_procedures_reglements/Politique_IntegriteRecherche%20_VersionFinale.pdf)
Intégrité en recherche : Guide pour les étudiants:
(http://www.inrs.ca/sites/default/files/etudier_inrs/etudiants_actuels/INRS_Guide_de_letudiant_Integrite_Recherche.pdf)

CONSIGNES RELATIVES AUX RETARDS DES TRAVAUX ET ABSENCE À UN EXAMEN

Cliquez ici pour taper du texte.

INFORMATIONS COMPLÉMENTAIRES

Cliquez ici pour taper du texte.

BIBLIOGRAPHIE SOMMAIRE

Ames WF, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Academic Press, 1977
Boyce WE, DiPrima RC, *Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems*, John Wiley, 1977
Carrier GF, Pearson CE, *Partial Differential Equations: Theory and Technique*, Academic Press, 1988
Carslaw HS, Jaeger JC, *Conduction of Heat in Solids*, Oxford University Press, 1959
Ciarlet PG, *Introduction to Numerical Linear Algebra and Optimisation*, Cambridge University Press, 1989
Clarke DA, *A Primer on Tensor Calculus*, Saint Mary's University, Halifax, NS, 2011
Gear CW, *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations*, Prentice-Hall, 1971
Johnson C, *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*, Cambridge University Press, 1987
Kreyszig E, *Advanced Engineering Mathematics*, John Wiley, 1979

Leithold L, *The Calculus with Analytic Geometry*, Harper & Row, 1976
Porter D, Stirling DSG, *Integral Equations*, Cambridge University Press, 1990
Press WH, Flannery BP, Teukolsky SA, Vetterling WT, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, 1989
Putti M, *Notes on Numerical Methods for Differential Equations*, University of Padua, Padua, Italy, 2020
Richtmyer RD, Morton KW, *Difference Methods for Initial-Value Problems*, John Wiley, 1967
Roach GF, *Green's Functions*, Cambridge University Press, 1982
Shewchuk JR, *An Introduction to the Conjugate Gradient Method*, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA, 1994
Simmons GF, *Differential Equations with Applications and Historical Notes*, McGraw-Hill, 1972