

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

6 novembre 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 3.3), 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 3.4) : 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, 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 extérieures, 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 [5] 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 Ehrlicher, 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
1.3	Equation de transport	26
1.3.1	Problème continu	26
1.3.2	Schémas numériques	27
1.4	Equation des ondes	31
2	Lois de conservation	35
2.1	Lois de conservation scalaires	35
2.1.1	Transport de soluté	36
2.1.2	Trafic routier	37
2.2	Systèmes de lois de conservation	38
3	Mécanique des milieux continus	41
3.1	Formalismes lagrangien et eulérien	41
3.2	Conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie	42
3.2.1	Conservation de la masse	42
3.2.2	Conservation de la quantité de mouvement	42
3.2.3	Conservation de l'énergie	45
3.2.4	Récapitulatif	47

3.3	Fluides newtoniens	47
3.3.1	Fluides newtoniens, le cas général	47
3.3.2	Fluides newtoniens, le cas incompressible	48
3.4	Elasticité linéaire	51
3.4.1	Elastodynamique	51
3.4.2	Equilibre élastique	53
3.4.3	Module d'Young et coefficient de Poisson (et leur interprétation)	55
4	Système de particules en interaction	57
4.1	Principe de moindre action	57
4.2	Formulation hamiltonienne	59
4.3	Formulation liouvillienne	60
4.4	Système de particules	61

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,

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

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 raisonnement 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

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

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 posée 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.

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

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

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

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

avec

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

On peut résoudre cette équation et on trouve

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

ce qui entraîne

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

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

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

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 [1] 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 [2] 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 $t \rightarrow 0$. Le comportement de $u(t)$ est plutôt un comportement oscillant autour de v , et non pas un comportement dissipatif vers v comme formalisé par le théorème 24.*

1.3 Equation de transport

On se restreint ici au cas d'une équation posée dans tout l'espace $\mathbb{R}^d$, avec une condition initiale régulière, et lorsque le second membre est nul (problème homogène). Le cas de l'équation de transport posé dans un domaine borné est brièvement évoqué ci-dessous.

1.3.1 Problème continu

On s'intéresse ici à l'équation de transport dans tout l'espace $\mathbb{R}^d$:

$$\partial_t u + b \cdot \nabla_x u = 0, \quad (1.28)$$

où b est un vecteur fixe de $\mathbb{R}^d$ (pris pour simplifier indépendant de x et t). Ce type d'équations modélise le transport (par un flot de vitesse b) d'espèces chimiques. La fonction u représente la concentration de ces espèces, fonction du temps et de l'espace. On retrouvera aussi plus tard cette équation, quand on s'intéressera (en physique statistique) à l'évolution de la distribution de particules évoluant suivant une dynamique hamiltonienne (cf. par exemple l'équation de Liouville (4.11)).

Supposons que u est une fonction régulière. On remarque alors que (1.28) signifie qu'une certaine dérivée de u s'annule. Soit $(t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$ fixé. Introduisons la fonction auxiliaire $z(s) = u(t + s, x + sb)$. Alors (1.28) signifie que $z'(s) = 0$, donc que $s \mapsto u(t + s, x + sb)$ est une fonction constante sur tout $\mathbb{R}$. Ainsi, pour chaque point $(t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$, u est constante sur la droite de direction $(1, b) \in \mathbb{R}^{d+1}$ passant par (t, x) . La fonction régulière u est donc connue partout pourvu que l'on connaisse u sur au moins un point de chacune de ces droites (c'est la *méthode des caractéristiques*).

Considérons alors le problème avec condition initiale *régulière* $g \in C^1(\mathbb{R}^d)$:

$$\begin{cases} \partial_t u(t, x) + b \cdot \nabla_x u(t, x) = 0, & (t, x) \in (0, \infty) \times \mathbb{R}^d, \\ u(0, x) = g(x), & x \in \mathbb{R}^d. \end{cases} \quad (1.29)$$

Les arguments précédents montrent que la fonction u définie sur $[0, \infty) \times \mathbb{R}^d$ par

$$u(t, x) := g(x - bt) \quad (1.30)$$

est l'unique solution de (1.29) dans $C^1([0, \infty) \times \mathbb{R}^d)$. Notons que la formule (1.30) décrit une *onde progressive*, avançant dans la direction b à la vitesse $|b|_{\mathbb{R}^d}$. La propagation a lieu à vitesse finie, à la différence de l'équation de la chaleur (cf. la section 1.1.4 et les théorèmes 14 et 23).

On remarque aussi que, pour tout $t > 0$, la fonction $x \mapsto u(t, x)$ a exactement la même régularité que la condition initiale : l'équation de transport n'a pas d'effet régularisant, à la différence de l'équation de la chaleur (cf. les théorèmes 13 et 19).

Lorsqu'on travaille dans un ouvert Ω borné, il faut imposer des conditions aux limites. Il faut alors distinguer les points x de $\partial\Omega$ pour lesquels b pointe vers

l'intérieur du domaine (i.e. les points $x \in \partial\Omega$ tels que $b(x) \cdot n(x) < 0$, où $n(x)$ est le vecteur normal sortant ; ce sont les points de flot entrant) et les points x de $\partial\Omega$ pour lesquels b pointe vers l'extérieur du domaine (i.e. les points $x \in \partial\Omega$ tels que $b(x) \cdot n(x) > 0$; ce sont les points de flot sortant). En particulier, on ne peut pas imposer de conditions aux limites sur l'ensemble de $\partial\Omega$ (penser à deux points reliés par une caractéristique : la connaissance de u en un point impose la valeur de u en l'autre point). Imposer les conditions aux limites est donc une opération délicate, puisqu'on ne peut imposer les valeurs de u (ou de certaines de ses dérivées spatiales) qu'en les points entrants.

1.3.2 Schémas numériques

On se place en dimension un d'espace, dans l'ouvert $\Omega = (0, 1)$. Nous considérons l'équation de transport (ou d'advection) suivante :

$$\begin{cases} \partial_t u + V \partial_x u = 0, & \text{dans } \mathbb{R}_+^* \times \Omega, \\ u(t, 0) = u(t, 1), & \text{pour tout } t \in \mathbb{R}_+^* \text{ (conditions aux limites périodiques),} \\ u(0, x) = u^0(x), & \text{pour tout } x \in \Omega \text{ (condition initiale),} \end{cases} \quad (1.31)$$

avec une vitesse $V \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ constante et uniforme et une condition initiale u^0 . Pour simplifier, nous supposons que $V > 0$ (des résultats analogues peuvent être obtenus sans difficulté pour $V < 0$). Le but de cette section d'étudier plusieurs schémas aux différences finies explicites pour cette équation.

Le terme de dérivée en temps sera toujours approché à l'aide de la formule

$$\partial_t u(t_n, x_j) \approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}.$$

Nous allons considérer trois types de schémas, qui correspondent à trois manières d'approcher le terme $V \partial_x u$:

— Le schéma *explicite centré* :

$$V \partial_x u(t_n, x_j) \approx V \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x},$$

ce qui aboutit au schéma

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + V \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0. \quad (1.32)$$

— Le schéma *explicite décentré aval* :

$$V \partial_x u(t_n, x_j) \approx V \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x},$$

ce qui aboutit au schéma

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + V \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x} = 0. \quad (1.33)$$

— Le schéma *explicite décentré amont* :

$$V \partial_x u(t_n, x_j) \approx V \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x},$$

ce qui aboutit au schéma

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + V \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 0. \quad (1.34)$$

Avant d'étudier ces trois schémas, on rappelle la notion de stabilité d'un schéma.

Soit $1 \leq p < \infty$. Pour tout $U := (u_j)_{1 \leq j \leq N} \in \mathbb{R}^N$, on définit la norme

$$\|U\|_p = \left(\sum_{j=1}^N \Delta x |u_j|^p \right)^{1/p},$$

qui a pour objectif de ressembler à $\|u\|_{L^p(\Omega)}$. Dans le cas $p = \infty$, on définit naturellement

$$\|U\|_\infty = \max_{1 \leq j \leq N} |u_j|,$$

ce qui là aussi ressemble à $\|u\|_{L^\infty(\Omega)}$.

Définition 26. Soit $1 \leq p \leq \infty$. Un schéma aux différences finies est dit *inconditionnellement stable* pour la norme L^p s'il existe une constante C , indépendante de Δt et de Δx , telle que

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad \|U^n\|_p \leq C \|U^0\|_p \quad (1.35)$$

quelle que soit la donnée initiale U^0 .

Si (1.35) n'a lieu que pour des pas Δt et Δx astreints à certaines inégalités, on dit que le schéma est *conditionnellement stable*.

Remarque 27. La stabilité par rapport à une norme n'implique pas la stabilité par rapport à d'autres normes, même si toutes les normes sont équivalentes en dimension finie. Il existe des schémas qui sont stables par rapport à une norme mais qui ne le sont pas par rapport à une autre. En effet, le point crucial est que la majoration (1.35) est uniforme par rapport à Δx et Δt .

Remarque 28. Bien sûr, la notion de stabilité n'est utile que pour des EDP telles que la solution exacte vérifie $\|u(t, \cdot)\|_{L^p(\Omega)} \leq C \|u(0, \cdot)\|_{L^p(\Omega)}$.

On peut montrer les résultats suivants :

- Le schéma explicite centré (1.32) est consistant avec l'équation d'advection (1.31), précis à l'ordre 1 en temps et 2 en espace, mais inconditionnellement instable en norme L^2 .
- Le schéma explicite décentré aval (1.33) est consistant avec l'équation d'advection (1.31), précis à l'ordre 1 en temps et 1 en espace, mais inconditionnellement instable en norme L^2 .

- Le schéma explicite décentré amont (1.34) est consistant avec l'équation d'advection (1.31), précis à l'ordre 1 en temps et 1 en espace, et stable en norme L^2 sous la condition

$$V \Delta t \leq \Delta x, \quad (1.36)$$

dite condition CFL du nom de ses découvreurs, les mathématiciens Courant, Friedrichs et Lewy.

- Le schéma explicite décentré amont (1.34) est aussi conditionnellement stable en norme L^∞ sous la même condition CFL (1.36).

Bien sûr, lorsque $V < 0$, le décentrement amont (qui consiste à aller chercher l'information en amont du flot) s'écrit $V \partial_x u(t_n, x_j) \approx V \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x}$.

Remarque 29. *L'idée de décentrement amont est une idée majeure de l'analyse numérique. Elle est particulièrement cruciale dans tous les problèmes de mécanique des fluides où elle fut d'abord découverte (en anglais, on parle de upwinding, qui traduit l'idée que l'on remonte le vent ou le courant), mais elle apparaît dans bien d'autres modèles.*

Les résultats ci-dessus peuvent être rigoureusement établis en utilisant l'analyse de stabilité de von Neumann (par transformée de Fourier discrète). On présente ici une autre approche, basée sur la notion d'équation équivalente (ou équation modifiée). L'idée est de chercher une EDP (avec des coefficients qui vont dépendre a priori des paramètres de discrétisation numérique, Δt et Δx), telle que la solution v de cette EDP vérifie $v(n \Delta t, j \Delta x) = u_j^n$, où $\{u_j^n\}_{j,n}$ est la solution obtenue par le schéma numérique. En pratique, cette EDP équivalente est construite de manière itérative, en identifiant les termes correctifs à l'équation de départ les uns après les autres. Cette idée est très générale en analyse numérique (pour les EDP, les EDO, etc).

Mettons en oeuvre ce programme dans le cas du schéma explicite centré (1.32). On écrit

$$\begin{aligned} \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} &= \frac{v(n \Delta t + \Delta t, j \Delta x) - v(n \Delta t, j \Delta x)}{\Delta t} \\ &= \partial_t v + \frac{\Delta t}{2} \partial_{tt} v + O(\Delta t^2), \end{aligned}$$

où les dérivées de la fonction v à la dernière ligne sont évaluées en $(n \Delta t, j \Delta x)$. On a de même

$$u_{j+1}^n = v(n \Delta t, j \Delta x + \Delta x) = u_j^n + \Delta x \partial_x v + \frac{\Delta x^2}{2} \partial_{xx} v + \frac{\Delta x^3}{6} \partial_{xxx} v + O(\Delta x^4),$$

donc

$$\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = \partial_x v + O(\Delta x^2).$$

En reportant ces expressions dans le schéma numérique (1.32), on obtient que v est solution de

$$\partial_t v + \frac{\Delta t}{2} \partial_{tt} v + V \partial_x v = O(\Delta t^2) + O(\Delta x^2). \quad (1.37)$$

On pourrait identifier les termes de reste $O(\Delta t^2)$ et $O(\Delta x^2)$ en allant plus loin dans les développements de Taylor, mais cela n'est pas indispensable ici. A l'ordre dominant, on retrouve bien l'équation de départ (le schéma est bien consistant !), i.e. $\partial_t v + V \partial_x v = 0$. Ceci implique, toujours à l'ordre dominant, que

$$\partial_{tt} v = -\partial_t (V \partial_x v) = -V \partial_x \partial_t v = V^2 \partial_{xx} v.$$

En reportant ceci dans (1.37), et en ignorant les termes de reste, on obtient que v est solution de

$$\partial_t v + \frac{\Delta t}{2} V^2 \partial_{xx} v + V \partial_x v = 0. \quad (1.38)$$

Il s'agit donc d'une équation avec un terme de diffusion portant le mauvais signe : il apparaît la contribution $+\partial_{xx} v$ et non pas $-\partial_{xx} v$ comme dans l'équation de la chaleur. Cette équation (1.38) est mal posée, ce qui peut se montrer facilement dans le cas de conditions aux limites périodiques sur $\Omega = (0, 2\pi)$:

- considérer la condition initiale $v(t = 0, x) = \exp(ikx)$ pour $k \in \mathbb{N}^*$ (qui est bien périodique) ;
- en cherchant une solution sous la forme $v(t, x) = \exp(p(t) + ikx)$, on constate que $p(t) = (\Delta t V^2 k^2 / 2 - ikV) t$;
- on considère une condition initiale de la forme $v(t = 0, x) = \sum_{k \in \mathbb{N}^*} \alpha_k \exp(ikx)$

avec $\sum_{k \in \mathbb{N}^*} |\alpha_k|^2 < \infty$, ce qui assure que la série est bien convergente dans L^2 ; la solution s'écrit alors (formellement) sous la forme $v(t, x) =$

$$\sum_{k \in \mathbb{N}^*} \alpha_k \exp(p_k(t) + ikx) \text{ avec } p_k(t) = (\Delta t V^2 k^2 / 2 - ikV) t ;$$

- dès que $t > 0$, cette série n'est en général pas convergente dans L^2 : on a en effet

$$\|v(t, \cdot)\|_{L^2}^2 = \sum_{k \in \mathbb{N}^*} |\alpha_k|^2 \exp(\Delta t V^2 k^2 t)$$

et il est facile de trouver des exemples de suite $(\alpha_k) \in \ell^2$ telles que la somme ci-dessus soit divergente.

Ceci explique pourquoi le schéma explicite centré est instable.

On peut faire la même analyse sur le schéma décentré amont ⁶.

6. travail laissé en exercice

1.4 Equation des ondes

Soit Ω un ouvert de $\mathbb{R}^d$ (qui peut être $\mathbb{R}^d$ tout entier). Etant donné une fonction $f :]0, +\infty[\times \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ et deux fonctions $u_0 : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ et $u_1 : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$, on considère le problème suivant : chercher une fonction $u : [0, +\infty[\times \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ vérifiant

$$\begin{cases} \partial_{tt}u - \Delta u = f & \text{sur }]0, +\infty[\times \Omega, \\ u(t, \cdot) = 0 & \text{sur }]0, +\infty[\times \partial\Omega, \\ u(0, \cdot) = u_0 & \text{sur } \Omega, \\ \partial_t u(0, \cdot) = u_1 & \text{sur } \Omega. \end{cases} \quad (1.39)$$

L'EDP dans (1.39) est appelée *équation des ondes*. Elle fait intervenir l'opérateur $\partial_{tt} - \Delta$ appelé le *d'Alembertien*. En dimension $d = 1$ avec $\Omega =]0, L[$, le problème (1.39) modélise les vibrations d'une corde élastique de longueur L autour de sa position d'équilibre lorsqu'elle est sollicitée par une force extérieure f . La fonction $u(t, \cdot) : x \in \Omega \mapsto u(t, x)$ représente la position de la corde à l'instant t . La condition limite $u(t, \cdot) = 0$ signifie que la corde est maintenue attachée à ses deux extrémités. Les équations $u(0, \cdot) = u_0$ et $\partial_t u(0, \cdot) = u_1$ constituent les conditions initiales (ou données de Cauchy) pour le problème (1.39). Elles signifient que l'on se donne à l'instant $t = 0$ la position et la vitesse de la corde. En dimension $d = 2$, le problème (1.39) modélise les vibrations d'une membrane élastique autour de sa position d'équilibre, dans le régime de l'élasticité linéaire. Plus généralement, le problème (1.39) modélise la propagation d'une onde acoustique, électromagnétique, etc.

On notera une différence importante dans la formulation des problèmes (1.14) et (1.39) : le premier fait intervenir une dérivée d'ordre un en temps alors que le deuxième fait intervenir une dérivée d'ordre deux en temps.

L'origine physique de l'équation des ondes sera étudiée plus tard (cf. en particulier la section 3.4.1 relative à la mécanique du solide). On s'intéresse ici aux propriétés qualitatives des solutions, afin de les comparer à celles des autres équations vues dans ce chapitre.

Pour simplifier, on ne considère ici que le cas simple de l'équation des ondes posée sur tout $\mathbb{R}$:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2}{\partial t^2} u(t, x) - c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(t, x) = 0, & (t, x) \in]0; \infty[\times \mathbb{R}, \\ u(0, x) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}, \\ \frac{\partial}{\partial t} u(0, x) = u_1(x), & x \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (1.40)$$

La constante c a la dimension d'une vitesse, on l'appelle souvent célérité. On impose des conditions initiales à la fois sur la solution et sur sa dérivée en temps.

Nous supposons pour commencer que u_0 et u_1 sont des fonctions régulières. On va alors chercher la solution sous la forme

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

pour deux fonctions régulières f et g qu'on détermine en fonction de u_0 et u_1 . On constate en effet que l'expression ci-dessus est solution de la première ligne de (1.40), quelque soit f et g . La fonction $(t, x) \mapsto f(x - ct)$ représente une onde progressive avançant à la vitesse c vers la droite, alors que $(t, x) \mapsto g(x + ct)$ est une onde progressive avançant à la vitesse c vers la gauche.

On calcule

$$u_0(x) = u(0, x) = f(x) + g(x)$$

et

$$u_1(x) = \frac{\partial}{\partial t} u(0, x) = -c f'(x) + c g'(x).$$

On trouve donc la formule de d'Alembert :

$$u(t, x) = \frac{1}{2} (u_0(x - ct) + u_0(x + ct)) + \frac{1}{2c} \int_{x-ct}^{x+ct} u_1(s) ds. \quad (1.41)$$

On voit déjà, sur ce cas très simple, de grandes différences de comportement par rapport à l'équation de la chaleur. Supposons que les conditions initiales soient à support compact : il existe $a < b$ tels que

$$\text{Supp}(u_0) \cup \text{Supp}(u_1) \subseteq [a; b].$$

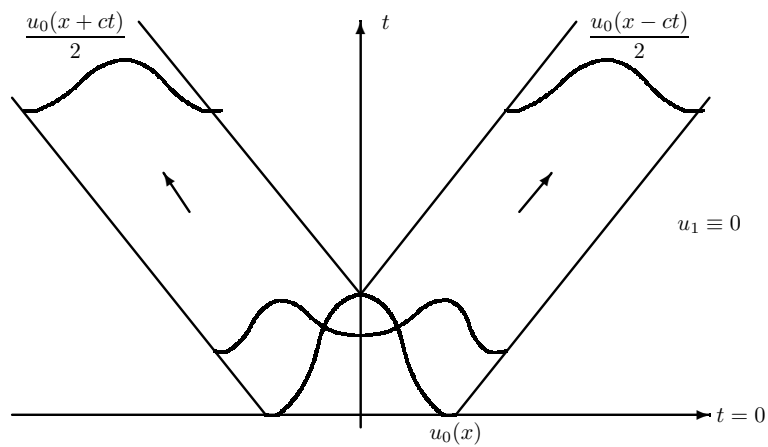
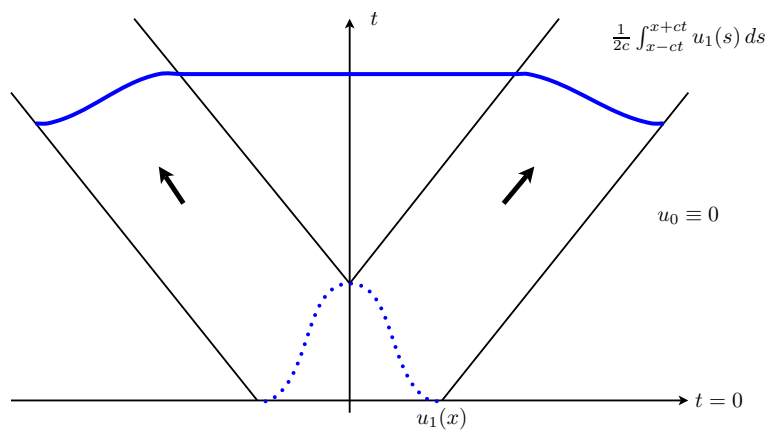
Alors, pour $t > 0$, on a

$$\text{Supp}(u(t, \cdot)) \subseteq [a - ct; b + ct].$$

Ainsi, la propagation a lieu à la vitesse c (cf. les figures 1.1 et 1.2), il n'y a pas de propagation à vitesse infinie comme pour l'équation de la chaleur (cf. la section 1.1.4 et les théorèmes 14 et 23). On retrouve la même situation que pour l'équation de transport.

Par ailleurs, on voit qu'il n'y a aucun gain ou aucune perte de régularité de la solution comme c'est le cas pour l'équation de la chaleur (effet régularisant, cf. les théorèmes 13 et 19) ou l'équation de Burgers (apparition de singularités). Ainsi, si $u_1 \equiv 0$, alors, pour tout $t > 0$, la fonction $u(t, \cdot)$ a exactement la même régularité que la fonction u_0 . C'est une situation analogue à celle de l'équation de transport.

L'équation des ondes est par contre réversible en temps, à la différence de l'équation de la chaleur. Si u est solution de (1.39) sur $]0, T[\times \Omega$, alors, la fonction $v(t) = u(T - t)$ est aussi solution de l'équation des ondes sur $]0, T[\times \Omega$, avec des conditions finales (en $t = T$) plutôt que des conditions initiales (en $t = 0$). L'équation aux dérivées partielles (la première ligne de (1.39)) ne change pas

FIGURE 1.1 – Equation des ondes en 1D : propagation quand $u_1 \equiv 0$ et $u_0 \neq 0$.FIGURE 1.2 – Equation des ondes en 1D : propagation quand $u_0 \equiv 0$ et $u_1 \neq 0$.

dans le changement de variable $t \mapsto T - t$, grâce à la dérivée d'ordre deux en temps.

En l'absence de terme source, l'énergie se conserve, comme montré par le théorème suivant.

Théorème 30 (Conservation de l'énergie). *On considère la solution u de (1.39), et on suppose que $f \equiv 0$. On a alors la conservation de l'énergie : soit*

$$E(t) = \int_{\Omega} \left(\left| \frac{\partial}{\partial t} u(t, x) \right|^2 + |\nabla u(t, x)|^2 \right) dx.$$

Alors $E(t) = E(0)$ pour tout $t \in]0; T[$.

Chapitre 2

Lois de conservation

Les lois de conservation constituent un prototype important d'équations aux dérivées partielles issues des sciences de l'ingénieur car de nombreux modèles se fondent sur un principe de conservation (par exemple de la masse, de l'impulsion ou de l'énergie).

2.1 Lois de conservation scalaires

On se place en dimension d d'espace. Etant donné d fonctions $f^k : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $1 \leq k \leq d$, on cherche une fonction $u : \mathbb{R}^d \times [0, +\infty[\rightarrow \mathbb{R}$, dépendant des variables d'espace et de temps, et telle que

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \sum_{k=1}^d \frac{\partial f^k}{\partial x_k}(u) = 0. \quad (2.1)$$

L'interprétation physique de l'équation (2.1) est la suivante. Considérons pour commencer le cas mono-dimensionnel $d = 1$. L'équation ci-dessus s'écrit donc

$$\partial_t u + \partial_x [f(u)] = 0.$$

En intégrant cette équation sur un intervalle $[x_1, x_2]$ et entre des instants t_1 et t_2 , nous obtenons une équation de bilan sous la forme intégrale suivante :

$$\int_{x_1}^{x_2} u(t_2, x) dx = \int_{x_1}^{x_2} u(t_1, x) dx + \int_{t_1}^{t_2} f(u(t, x_1)) dt - \int_{t_1}^{t_2} f(u(t, x_2)) dt.$$

En interprétant, pour tout temps t , la quantité $\int_{x_1}^{x_2} u(t, x) dx$ comme la masse contenue dans le volume de contrôle $\Omega = [x_1, x_2]$ au temps t , la forme intégrale ci-dessus signifie que la variation de masse sur ce volume entre les instants t_1 et t_2 est égale à la différence algébrique des flux en x_1 et x_2 intégrés entre les instants t_1 et t_2 : la variation de masse est liée aux flux entrant et sortant. On

voit aussi que, sous l'hypothèse $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} f(u(t, x)) = 0$, la quantité $\int_{\mathbb{R}} u(t, x) dx$ se conserve au cours du temps : pour tout t ,

$$\int_{\mathbb{R}} u(t, x) dx = \int_{\mathbb{R}} u(0, x) dx.$$

L'interprétation dans le cas multi-dimensionnel est similaire. On considère un volume de contrôle $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, on note $\partial\Omega$ sa frontière et n sa normale extérieure (on suppose que la frontière de Ω est suffisamment régulière pour que la normale extérieure soit définie partout sur $\partial\Omega$). On pose

$$\Phi(u) = \sum_{k=1}^d n_k f^k(u),$$

où $(n_1, \dots, n_d)$ désignent les coordonnées cartésiennes de la normale extérieure. En intégrant (2.1) sur Ω et en utilisant la formule de la divergence, il vient

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega} u \right) + \int_{\partial\Omega} \Phi(u) = 0. \quad (2.2)$$

A nouveau, cette identité exprime un bilan : $\int_{\Omega} u$ représente la “masse totale” contenue à un instant t dans le volume de contrôle Ω et $\Phi(u)$ représente le flux de “masse” à travers la frontière. La fonction f^k représente le flux le long de la k -ième coordonnée spatiale.

On considère maintenant deux exemples concrets de lois de conservation.

2.1.1 Transport de soluté

Un premier exemple (très simple !) de loi de conservation scalaire consiste à se placer en une dimension d'espace, à se donner un paramètre réel constant b et à considérer la fonction de flux (on omet l'indice supérieur car on se place en une dimension d'espace)

$$f(u) = bu.$$

On observera que le paramètre b a la dimension d'une vitesse. Avec le choix ci-dessus pour le flux, le modèle (2.1) s'écrit

$$\partial_t u + b \partial_x u = 0,$$

et on retrouve l'équation de transport vu à la section 1.3. On a expliqué que cette équation décrit par exemple le transport d'un soluté inerte¹ dans un écoulement

1. Cette précision a son importance : si le soluté n'était pas inerte, il pourrait réagir, il pourrait donc y avoir création ou disparition de soluté dans le volume de contrôle, et donc la variation de la quantité de soluté présente dans le volume de contrôle ne serait pas uniquement liée aux flux entrant et sortant, mais aussi à un terme de réaction interne au volume.

unidimensionnel de vitesse b , l'inconnue u représentant la concentration de ce soluté. Si on connaît le profil de concentration à l'instant $t = 0$ tel que décrit par une fonction $u_0 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, on vérifie facilement que, pour tout $(t, x) \in [0, +\infty[\times \mathbb{R}$, on a

$$u(t, x) = u_0(x - bt).$$

Cette identité exprime le fait que le soluté est transporté par l'écoulement à la vitesse b , c'est-à-dire qu'à un instant $t > 0$, la fonction $x \mapsto u(t, x)$ se déduit de la fonction $x \mapsto u_0(x)$ par une translation de longueur bt .

La formulation (2.2) s'écrit

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega} u \right) + \int_{\partial\Omega} n b u = 0. \quad (2.3)$$

Interprétons cette relation. Dans un volume de contrôle $\Omega = [x_1, x_2]$ fixe, la masse de soluté est $\int_{\Omega} u$. On cherche à savoir comment cette quantité varie au cours du temps : comme le soluté est simplement transporté par le flot à la vitesse b (il n'y a par exemple pas de réaction chimique qui le ferait disparaître), la variation de $\int_{\Omega} u$ est simplement lié à ce qui sort et ce qui rentre par les bords de Ω . Au niveau du bord droit (i.e. pour $x = x_2$), on sait que ce qui sort pendant le temps τ se trouve à une distance inférieure à $b\tau$ du bord, et la quantité de soluté présent dans cet intervalle est $b\tau u(t, x_2)$. Donc la quantité de soluté qui sort par le bord droit par unité de temps est $b u(t, x_2)$. De la même manière, la quantité de soluté qui entre par le bord gauche par unité de temps est $b u(t, x_1)$. D'où la relation (2.3).

Remarque 31. *On peut aussi argumenter en disant que*

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} u(t + \tau, x) dx - \int_{\Omega} u(t, x) dx \\ &= \text{ce qui rentre pendant le temps } \tau \text{ en } x_1 - \text{ce qui sort pendant le temps } \tau \text{ en } x_2 \\ &= \int_{x_1 - \tau b}^{x_1} u(t, x) dx - \int_{x_2 - \tau b}^{x_2} u(t, x) dx \end{aligned}$$

puis on divise par τ et on passe à la limite $\tau \rightarrow 0$, ce qui donne

$$\int_{\Omega} \partial_t u(t, x) dx = b u(t, x_1) - b u(t, x_2) = - \int_{\Omega} \partial_x (b u).$$

Une troisième manière de voir les choses est de suivre un volume Ω_t au cours du temps. Ce point de vue est laissé en exercice.

2.1.2 Trafic routier

Un deuxième exemple concret de loi de conservation scalaire provient de la modélisation du trafic routier. On considère un axe routier unidimensionnel

et on désigne par $u(t, x)$ la concentration de véhicules au point x à l'instant t . On suppose que la vitesse v des véhicules au point x et à l'instant t ne dépend qu'implicitement des variables spatio-temporelles (t, x) mais qu'elle dépend explicitement de la concentration de véhicules $u(t, x)$. Cette hypothèse de modélisation signifie que les conducteurs ajustent instantanément leur vitesse aux conditions de trafic locales, en réduisant leur vitesse lorsque l'axe routier est plutôt saturé et en augmentant celle-ci lorsque le trafic est fluide (le fait que v ne dépend pas directement de x et de t signifie que les capacités routières sont identiques en tout point du réseau et à tout instant). Un modèle simple, dû à Greenshields, consiste à poser

$$v(u) = v_d \left(1 - \frac{u}{u_m}\right).$$

Ce modèle fait intervenir deux paramètres, la vitesse désirée v_d des conducteurs (et que ceux-ci adoptent dans la limite où $u \rightarrow 0$, c'est-à-dire lorsque ceux-ci sont seuls sur la route) et la concentration maximale u_m de véhicules, c'est-à-dire la concentration pour laquelle la vitesse s'annule et un bouchon s'établit.

Pour établir l'équation satisfaite par u , on peut considérer un volume de contrôle Ω . La quantité $\int_{\Omega} u(t, x) dx$ est le nombre de véhicules dans Ω à l'instant t . Ce nombre varie à cause des véhicules qui sortent par le bord droit (et à cause de ceux qui entrent par le bord gauche). Pendant le temps τ , les véhicules qui sortent sont ceux qui sont à une distance inférieure à $v(u)\tau$ du bord. Dans ce "volume", le nombre de véhicules est $u v(u)\tau$. Donc le nombre de véhicules sortant par unité de temps est $u v(u)$. On introduit donc la fonction de flux

$$f(u) = u v(u) = v_d u \left(1 - \frac{u}{u_m}\right).$$

Le modèle de trafic consiste à considérer la loi de conservation scalaire (2.1) avec la fonction de flux ci-dessus :

$$\partial_t u + \partial_x (u v(u)) = 0. \quad (2.4)$$

Exercice 32. *Comme dans le cas du soluté, on peut aussi raisonner² en suivant un volume Ω_t au cours du temps, de telle manière que le nombre de véhicules dans Ω_t reste constant. Donner l'expression de Ω_t puis établir l'équation de conservation à partir du fait que $I_t = \int_{\Omega_t} u(t, x) dx$ est une constante.*

2.2 Systèmes de lois de conservation

On ne suppose plus que la fonction inconnue u est à valeurs scalaires mais à valeurs vectorielles. On cherche donc une fonction $u : [0, +\infty[\times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^m$ avec

2. travail laissé en exercice

$m \geq 1$ telle que

$$\partial_t u + \sum_{k=1}^d \partial_k f^k(u) = 0, \quad (2.5)$$

avec d fonctions de flux $f^k : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, $1 \leq k \leq d$. Les composantes de $u = (u_1, \dots, u_m)$ s'appellent les *variables conservatives*.

Un exemple simple de système de lois de conservation à deux variables conservatives ($m = 2$) en une dimension d'espace ($d = 1$) est le suivant :

$$\begin{aligned} \partial_t u_1 + c \partial_x u_2 &= 0, \\ \partial_t u_2 + c \partial_x u_1 &= 0, \end{aligned} \quad (2.6)$$

où c est un paramètre réel donné (qui a les dimensions d'une vitesse). Le système d'équations aux dérivées partielles (2.6) s'écrit sous la forme (2.5) en introduisant la fonction de flux $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ donnée par

$$f(u_1, u_2) = c(u_2, u_1).$$

En dérivant la première équation dans (2.6) par rapport à t et la deuxième par rapport à x , on obtient

$$\begin{aligned} \partial_{tt} u_1 + c \partial_{tx} u_2 &= 0, \\ \partial_{xt} u_2 + c \partial_{xx} u_1 &= 0. \end{aligned}$$

On peut éliminer l'inconnue u_2 et obtenir l'équation d'ordre deux suivante pour u_1 :

$$\partial_{tt} u_1 - c^2 \partial_{xx} u_1 = 0. \quad (2.7)$$

Il s'agit de l'équation des ondes en une dimension d'espace, déjà rencontrée dans la section 1.4 (cf. l'équation (1.40)).

Chapitre 3

Mécanique des milieux continus

La mécanique des fluides intervient dans de nombreuses applications des sciences de l'ingénieur : aéronautique, hydraulique, hydrologie, effet du vent sur les ouvrages d'art, sciences de la terre, environnement, etc.

La mécanique des solides constitue un autre champ d'application important des sciences de l'ingénieur. Elle intervient notamment dans le calcul des structures, le dimensionnement des ouvrages d'art et le génie des matériaux.

Sur les deux sujets, on pourra consulter [6]. Un point important est que la matière est représentée par un continuum (par opposition à une représentation discrète, comme c'est le cas dans les modèles atomiques que nous verrons au chapitre 4).

3.1 Formalismes lagrangien et eulérien

Les formalismes lagrangien et eulérien sont deux façons très différentes d'écrire les équations de la mécanique des milieux continus.

Dans le point de vue eulérien, on donne la valeur des champs qui décrivent le matériau en chaque point du référentiel d'observation et à chaque instant. Ainsi, $u(t, x)$ est par exemple la vitesse observée à l'instant t et à la position x du système.

Dans le point de vue lagrangien, on considère un état de référence fixé une fois pour toutes, par exemple la configuration du système à l'instant initial, et on va suivre les volumes élémentaires de matière dans leur déplacement. Dans ce cas, $u(t, x)$ est la vitesse à l'instant t de l'élément de volume qui se situait à l'instant initial à la position x dans la configuration de référence.

Un point de vue lagrangien est bien adapté quand la déformation est petite, et donc que la configuration de référence a une importance physique (on ne s'en

éloigne pas trop, elle reste pertinente même après déformation). C'est donc un point de vue bien adapté en mécanique des solides. En mécanique des fluides, la déformation est très importante, la configuration de référence n'a pas d'utilité, et on préfère souvent un point de vue eulérien. On remarquera que, dans la section 2.1, le fait d'écrire un bilan concernant un volume fixe Ω participe d'un point de vue eulérien, tandis que le fait de suivre un volume Ω_t participe d'un point de vue lagrangien.

3.2 Conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie

On considère un milieu continu, et on note $\rho(t, x)$ la masse volumique et $u(t, x)$ la vitesse macroscopique du fluide. On se place dans un formalisme eulérien.

3.2.1 Conservation de la masse

On écrit la conservation de la masse, en s'intéressant à un volume Ω fixe. La masse contenue dans Ω est $\int_{\Omega} \rho(t, x) dx$, et on écrit sa variation sous la forme (2.2) :

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega} \rho \right) + \int_{\partial\Omega} \Phi(\rho) = 0.$$

En effet, la masse est une quantité qui ne varie pas (un système ne peut pas spontanément créer de la masse ou bien en perdre), donc la seule manière pour que la masse dans Ω varie est qu'il y ait des flux de masse entrante et/ou sortante.

La masse qui sort pendant le temps τ est à la distance $n \cdot u \tau$ du bord. Le volume de masse qui sort est donc une couronne autour de $\partial\Omega$ d'épaisseur $n \cdot u \tau$, et la masse correspondante est (dans la limite de τ petit) égale à $\int_{\partial\Omega} n \cdot u \tau \rho$. On est donc amené à poser $\Phi(\rho) = n \cdot u \rho$, ce qui correspond aux fonctions de flux $f^k(\rho) = u^k \rho$. L'équation (2.1) s'écrit

$$0 = \partial_t \rho + \sum_{k=1}^d \partial_{x_k} u^k \rho = \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u). \quad (3.1)$$

3.2.2 Conservation de la quantité de mouvement

On écrit la conservation de la quantité de mouvement, en s'intéressant à un volume Ω fixe (ce volume de contrôle n'est pas égal à l'ensemble du matériau d'intérêt, on va le prendre bien plus petit de manière à pouvoir le faire "tendre" vers 0). La quantité de mouvement présente dans Ω est $P(t) = \int_{\Omega} \rho(t, x) u(t, x) dx$

3.2. CONSERVATION DE LA MASSE, DE LA QUANTITÉ DE MOUVEMENT ET DE L'ÉNERGIE 43

(c'est l'analogie du produit masse par vitesse). Contrairement à la masse, la quantité de mouvement peut varier, suite à l'effet de forces.

Un principe fondamental est que la variation de quantité de mouvement est due aux forces :

$$\text{Variation de } P(t) = \text{forces agissant sur le volume } \Omega. \quad (3.2)$$

Cette équation est à rapprocher de l'équation de Newton

$$m \ddot{x} = F(x),$$

où m est la masse, x la position (et donc $\ddot{x}$ est l'accélération) et $F(x)$ sont les forces. En introduisant l'impulsion (ou quantité de mouvement) $p = m \dot{x}$, produit de la masse par la vitesse, on voit que

$$\dot{p} = F(x),$$

équation qui ressemble bien à (3.2).

Les forces agissant sur Ω sont de plusieurs natures : des forces extérieures qui correspondent à une action de force agissant par l'intermédiaire d'un champ macroscopique extérieur, et des forces intérieures qui correspondent à des forces microscopiques internes (les atomes situés au voisinage de la surface d'un élément de matériau interagissent avec les atomes en vis à vis par des forces) :

- forces extérieures volumiques : ce sont des forces venant de l'extérieur du système, et qui s'appliquent sur tout le volume Ω (et non pas uniquement sur son bord, par exemple). Un bon exemple de telle force est la gravité. On note F_{ext} est la densité volumique de ces forces (i.e. la force par unité de volume), si bien que les forces extérieures volumiques sont données par l'expression $\int_{\Omega} F_{\text{ext}}$. Dans le cas de la gravité, la force est proportionnelle à la masse, le coefficient de proportionnalité étant g , et on a donc $F_{\text{ext}}(t, x) = -\rho(t, x) g e_z$ où e_z est le vecteur unitaire vertical.
- forces extérieures surfaciques : ce sont des forces venant de l'extérieur du système, et qui s'appliquent sur la surface (le bord) du système d'intérêt. Un bon exemple de telle force est la pression subie par un solide immergé dans de l'eau. Comme Ω est un sous ensemble (bien plus petit) du volume effectivement occupé par le matériau, on ne tient pas compte de ces forces ici.
- les forces intérieures, qui sont les efforts qui s'appliquent sur $\partial\Omega$ et qui sont dues au solide lui-même. On représente ces forces par le tenseur des contraintes σ . Par définition, $\sigma(t, x) n$ est la force (c'est un vecteur) par unité de surface (l'unité de σ est donc la même que celle d'une pression) qui s'exerce sur une surface infinitésimale placée en x et de normale n . Par convention de signe, on a $n \cdot \sigma n < 0$ lorsque la surface est comprimée¹

1. Un cas simple pour comprendre est l'exemple de la pression dans un fluide. On souhaite que $\sigma n = \text{force par unité de surface} = -p n$ où p est la pression, champ scalaire. Le signe moins vient de la convention de signe, et le fait que la force soit selon n vient de la physique : la force qui s'exerce appuie sans cisailier.

(et une traction correspond à $n \cdot \sigma n > 0$). Les efforts intérieurs, i.e. ceux appliqués sur Ω par le reste du système, sont donc donnés par

$$\int_{\partial\Omega} \sigma n d\Sigma,$$

où $d\Sigma$ est la mesure surfacique sur $\partial\Omega$ et n est le vecteur normal sortant unitaire. On vérifie que la convention de signe est la bonne : dans le cas d'un matériau soumis à une pression, la force qui s'exerce sur Ω est physiquement selon $-n$ (i.e. dans la direction de $-n$) afin de comprimer le matériau, et c'est aussi ce qu'indique la formule ci-dessus. On va maintenant faire une intégration par partie dans l'intégrale ci-dessus, en écrivant

$$\int_{\partial\Omega} \sigma n d\Sigma = \sum_{\ell, i=1}^d e_\ell \int_{\partial\Omega} \sigma_{\ell i} n_i d\Sigma = \sum_{\ell=1}^d e_\ell \int_{\partial\Omega} \sigma_{\ell.} \cdot n d\Sigma,$$

où $\sigma_{\ell.}$ est le vecteur $(\sigma_{\ell i})_{1 \leq i \leq d}$ et $(e_\ell)_{1 \leq \ell \leq d}$ est la base canonique de $\mathbb{R}^d$. En appliquant la formule de Green, on a donc

$$\int_{\partial\Omega} \sigma n d\Sigma = \sum_{\ell=1}^d e_\ell \int_{\Omega} \operatorname{div} \sigma_{\ell.},$$

ce qui amène à introduire un vecteur dans $\mathbb{R}^d$, noté $\operatorname{div} \sigma$, et défini par

$$(\operatorname{div} \sigma)_\ell = \operatorname{div} \sigma_{\ell.} = \sum_{i=1}^d \frac{\partial \sigma_{\ell i}}{\partial x_i}.$$

On obtient ainsi

$$\int_{\partial\Omega} \sigma n d\Sigma = \sum_{\ell=1}^d e_\ell \int_{\Omega} (\operatorname{div} \sigma)_\ell = \int_{\Omega} \operatorname{div} \sigma.$$

On écrit la relation (3.2) sous la forme (cf. (2.2))

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega} \rho u \right) + \int_{\partial\Omega} \Phi(\rho u) = \int_{\Omega} F_{\text{ext}} + \int_{\Omega} \operatorname{div} \sigma, \quad (3.3)$$

où Φ est le flux de quantité de mouvement, qu'on va maintenant déterminer.

La quantité de mouvement qui sort pendant le temps τ est à la distance $n \cdot u \tau$ du bord. Ce qui sort est donc dans une couronne (dans le régime $\tau \ll 1$) autour de $\partial\Omega$ d'épaisseur $n \cdot u \tau$, et la quantité de mouvement correspondante est $\int_{\partial\Omega} n \cdot u \tau \rho u$. On est donc amené à poser $\Phi(\rho u) = n \cdot u \rho u$, ce qui correspond aux fonctions de flux $f^k(\rho) = u^k \rho u$.

3.2. CONSERVATION DE LA MASSE, DE LA QUANTITÉ DE MOUVEMENT ET DE L'ÉNERGIE 45

Le volume de contrôle Ω dans (3.3) est arbitrairement petit. On déduit donc de (3.3) (cf. (2.1)) que

$$\partial_t(\rho u) + \sum_{k=1}^d \partial_{x_k}(u^k \rho u) = F_{\text{ext}} + \text{div } \sigma.$$

Cette équation est une équation vectorielle, et signifie que, dans chaque direction $1 \leq \ell \leq d$, on a

$$\partial_t(\rho u^\ell) + \sum_{k=1}^d \partial_{x_k}(u^k \rho u^\ell) = F_{\text{ext}}^\ell + (\text{div } \sigma)_\ell.$$

On peut simplifier cette relation. On développe en effet l'équation ci-dessus selon

$$u^\ell \partial_t \rho + \rho \partial_t u^\ell + u^\ell \text{div}(\rho u) + \sum_{k=1}^d \rho u^k \partial_{x_k} u^\ell = F_{\text{ext}}^\ell + (\text{div } \sigma)_\ell.$$

En utilisant l'équation de conservation de la masse (3.1), la somme du premier et du troisième termes s'annule, et on obtient donc

$$\rho \partial_t u^\ell + \sum_{k=1}^d \rho u^k \partial_{x_k} u^\ell = F_{\text{ext}}^\ell + (\text{div } \sigma)_\ell,$$

ce qu'on écrit sous la forme

$$\rho (\partial_t u^\ell + u \cdot \nabla u^\ell) = F_{\text{ext}}^\ell + (\text{div } \sigma)_\ell,$$

où l'opérateur $u \cdot \nabla$ est donné par $u \cdot \nabla \psi = \sum_{k=1}^d u^k \partial_{x_k} \psi$ pour toute fonction ψ .

On rassemble ces d équations scalaires en une unique équation vectorielle écrite de manière compacte sous la forme

$$\rho (\partial_t u + u \cdot \nabla u) = F_{\text{ext}} + \text{div } \sigma. \quad (3.4)$$

Remarque 33. On pourrait écrire une équation similaire pour la quantité de mouvement angulaire. Cette équation permet de montrer que σ est une matrice $d \times d$ qui est symétrique : pour tout $x \in \Omega$, on a $\sigma(x) = (\sigma(x))^T$.

3.2.3 Conservation de l'énergie

Soit e la densité (massique) d'énergie interne (l'énergie interne est la différence entre l'énergie totale et l'énergie cinétique macroscopique), d le tenseur taux de déformation défini par

$$d(t, x) = \frac{1}{2} (\nabla_x u(t, x) + \nabla_x u(t, x)^T),$$

et q_{th} le flux de chaleur. L'énergie totale contenue dans un volume de contrôle Ω fixe est $E(t) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho |u|^2 + \int_{\Omega} \rho e$, où le premier terme est l'énergie cinétique et le second l'énergie interne.

La variation d'énergie est reliée :

- à des flux thermiques, qu'on écrit $-\int_{\partial\Omega} q_{\text{th}} \cdot n$, le signe négatif venant du fait que, si le flux est positif, alors de la chaleur sort de Ω , et donc l'énergie diminue.
- à la puissance des efforts appliqués, efforts extérieurs et efforts intérieurs. Cette puissance s'écrit $\int_{\Omega} F_{\text{ext}} \cdot u + \int_{\partial\Omega} u \cdot (\sigma n)$.

On a donc

$$\begin{aligned}
 \text{Variation de } E(t) &= - \int_{\partial\Omega} q_{\text{th}} \cdot n + \int_{\Omega} F_{\text{ext}} \cdot u + \int_{\partial\Omega} u \cdot (\sigma n) \\
 &= - \int_{\Omega} \operatorname{div} q_{\text{th}} + \int_{\Omega} F_{\text{ext}} \cdot u + \int_{\Omega} \operatorname{div}(\sigma u) \\
 &= - \int_{\Omega} \operatorname{div} q_{\text{th}} + \int_{\Omega} F_{\text{ext}} \cdot u + \int_{\Omega} u \cdot \operatorname{div} \sigma + \sigma : \nabla u \\
 &= - \int_{\Omega} \operatorname{div} q_{\text{th}} + \int_{\Omega} F_{\text{ext}} \cdot u + \int_{\Omega} u \cdot \operatorname{div} \sigma + \sigma : d,
 \end{aligned}$$

où on a utilisé à la dernière relation que σ est une matrice symétrique.

En suivant le même raisonnement que pour la masse et le quantité de mouvement, on voit que les fonctions de flux correspondant à l'énergie sont $f^k = u^k \left(\frac{1}{2} \rho |u|^2 + \rho e \right)$. On a donc, suivant (2.2), que

$$\begin{aligned}
 &\partial_t \left(\frac{1}{2} \rho |u|^2 + \rho e \right) + \sum_{k=1}^d \partial_{x_k} \left[u^k \left(\frac{1}{2} \rho |u|^2 + \rho e \right) \right] \\
 &= - \operatorname{div} q_{\text{th}} + (F_{\text{ext}} + \operatorname{div} \sigma) \cdot u + \sigma : d \\
 &= - \operatorname{div} q_{\text{th}} + \sigma : d + \rho \sum_{\ell=1}^d u^\ell (\partial_t u^\ell + u \cdot \nabla u^\ell), \tag{3.5}
 \end{aligned}$$

où on a utilisé (3.4) à la dernière ligne. En développant le membre de gauche et en utilisant (3.1), on voit que

$$\begin{aligned}
 \partial_t \left(\frac{1}{2} \rho |u|^2 \right) &= \frac{1}{2} |u|^2 \partial_t \rho + \rho \sum_{\ell=1}^d u^\ell \partial_t u^\ell \\
 &= \rho \sum_{\ell=1}^d u^\ell \partial_t u^\ell - \frac{1}{2} |u|^2 \operatorname{div}(\rho u).
 \end{aligned}$$

On a aussi

$$\begin{aligned}\partial_t(\rho e) + \sum_{k=1}^d \partial_{x_k} [u^k \rho e] &= e \left(\partial_t \rho + \sum_{k=1}^d \partial_{x_k} [u^k \rho] \right) + \rho \partial_t e + \rho \sum_{k=1}^d u^k \partial_{x_k} e \\ &= \rho \partial_t e + \rho u \cdot \nabla e,\end{aligned}$$

où on a encore utilisé (3.1). On observe enfin que

$$\frac{1}{2} \sum_{k=1}^d \partial_{x_k} [u^k \rho |u|^2] = \frac{1}{2} |u|^2 \operatorname{div}(\rho u) + \sum_{k,\ell=1}^d \rho u^k u^\ell \partial_{x_k} u^\ell.$$

En utilisant ces résultats dans (3.5), on obtient

$$\rho(\partial_t e + u \cdot \nabla e) + \sum_{k,\ell=1}^d \rho u^k u^\ell \partial_{x_k} u^\ell = -\operatorname{div} q_{\text{th}} + \sigma : d + \rho \sum_{\ell=1}^d u^\ell u \cdot \nabla u^\ell,$$

et donc

$$\rho(\partial_t e + u \cdot \nabla e) = -\operatorname{div} q_{\text{th}} + \sigma : d. \quad (3.6)$$

3.2.4 Récapitulatif

En rassemblant (3.1), (3.4) et (3.6), on a donc obtenu les équations

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \\ \rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) = \operatorname{div} \sigma + F_{\text{ext}}, \\ \rho \left(\frac{\partial e}{\partial t} + u \cdot \nabla e \right) = \sigma : d - \operatorname{div} q_{\text{th}}. \end{cases} \quad (3.7)$$

où ρ est la masse volumique, u la vitesse macroscopique du fluide, σ le tenseur des contraintes, F_{ext} les forces extérieures, e la densité d'énergie interne, d le tenseur taux de déformation défini par

$$d(t, x) = \frac{1}{2} (\nabla_x u(t, x) + \nabla_x u(t, x)^T),$$

et q_{th} le flux de chaleur.

3.3 Fluides newtoniens

3.3.1 Fluides newtoniens, le cas général

Un fluide newtonien est par définition un fluide simple isotrope pour lequel

1. la loi constitutive donnant σ est linéaire en ∇u ;
2. le flux de chaleur est linéaire en ∇T .

On peut alors montrer, en utilisant les symétries du système, que σ et q_{th} sont nécessairement de la forme

$$\sigma = [-p(\rho, T) + \lambda(\rho, T) \operatorname{div} u] I + 2\mu(\rho, T) d \quad (3.8)$$

et

$$q_{\text{th}} = -\kappa(\rho, T) \nabla T, \quad (3.9)$$

où on rappelle que $d = (\nabla u + \nabla u^T)/2$.

Dans les équations ci-dessus,

- $p(\rho, T)$ est la pression hydrostatique : quand le fluide est au repos, le tenseur des contraintes est donné par $\sigma = -p(\rho, T) I$;
- $\lambda(\rho, T)$ et $\mu(\rho, T)$ sont les coefficients de viscosité de Lamé ;
- $\kappa(\rho, T)$ est la conductivité thermique.

En combinant le système universel (3.7) avec les lois de comportement (3.8) et (3.9), on obtient les équations de Navier-Stokes compressibles :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \\ \rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) = -\nabla p + \nabla (\lambda \operatorname{div} u) + 2 \operatorname{div}(\mu d) + F_{\text{ext}}, \\ \rho \left(\frac{\partial e}{\partial t} + u \cdot \nabla e \right) = -p \operatorname{div} u + \lambda (\operatorname{div} u)^2 + 2\mu d : d + \operatorname{div}(\kappa \nabla T). \end{cases} \quad (3.10)$$

En utilisant (3.8), on calcule en effet que

$$\operatorname{div} \sigma = 2 \operatorname{div}(\mu d) + \sum_{\ell=1}^d e_{\ell} \partial_{x_{\ell}} [-p + \lambda \operatorname{div} u] = 2 \operatorname{div}(\mu d) - \nabla p + \nabla (\lambda \operatorname{div} u).$$

On voit aussi que $I : d = \sum_{i,j=1}^d I_{ij} d_{ij} = \sum_{i=1}^d d_{ii} = \operatorname{div} u$, si bien que

$$\sigma : d = [-p + \lambda \operatorname{div} u] I : d + 2\mu d : d = -p \operatorname{div} u + \lambda (\operatorname{div} u)^2 + 2\mu d : d.$$

Enfin, grâce à (3.9), on a $-\operatorname{div} q_{\text{th}} = \operatorname{div} \kappa \nabla T$. En insérant ces relations dans (3.7), on trouve (3.10).

3.3.2 Fluides newtoniens, le cas incompressible

On considère un fluide visqueux et incompressible. Dans ce cas, la masse volumique ρ est une constante, indépendante du temps et de l'espace. La première ligne de (3.10) donne donc $\operatorname{div} u = 0$. On insère cette équation dans la deuxième

ligne de (3.10), ce qui donne (en supposant que μ est constant, ce qui est licite car μ est une fonction de ρ , elle-même constante, et de la température T , qu'on peut supposer constante, cf. la remarque 34)

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) = -\nabla p + 2\mu \operatorname{div} d + F_{\text{ext}}.$$

On vérifie ensuite que

$$\begin{aligned} (\operatorname{div} d)_\ell &= \sum_{i=1}^d \partial_{x_i} d_{\ell i} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d \partial_{x_i} \left(\frac{\partial u_\ell}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_\ell} \right) = \frac{1}{2} \Delta u_\ell + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_\ell} \sum_{i=1}^d \partial_{x_i} u_i \\ &= \frac{1}{2} \Delta u_\ell + \frac{1}{2} \frac{\partial(\operatorname{div} u)}{\partial x_\ell}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

En utilisant ici le fait que $\operatorname{div} u = 0$, et en notant Δu le vecteur dont la composante ℓ est Δu_ℓ , on obtient

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) = -\nabla p + \mu \Delta u + F_{\text{ext}},$$

ce qu'on peut écrire (se souvenir que ρ et μ sont simplement des constantes) sous la forme

$$\partial_t u + (u \cdot \nabla) u + \nabla p - \nu \Delta u = f.$$

L'écoulement de ce fluide est donc décrit par deux fonctions de l'espace et du temps, le champ de vitesse $u : [0, +\infty[\times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ et le champ de pression $p : [0, +\infty[\times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$. Ces fonctions sont régies par les équations dites de Navier–Stokes incompressibles,

$$\partial_t u + (u \cdot \nabla) u + \nabla p - \nu \Delta u = f, \quad (3.12)$$

$$\operatorname{div} u = 0, \quad (3.13)$$

où $\nu > 0$ désigne la viscosité du fluide et $f : [0, +\infty[\times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ les efforts volumiques appliqués au fluide. Les équations (3.12) et (3.13) expriment, respectivement, la conservation de l'impulsion et de la masse dans l'écoulement.

Remarque 34. *L'écriture du principe de conservation de l'énergie n'est, en général, pas nécessaire afin de décrire l'écoulement. Cette observation se fonde sur le fait que la capacité calorifique des fluides généralement considérés dans les applications est très élevée, si bien que l'écoulement est pratiquement isotherme (en l'absence de sources ou puits de chaleur extérieurs). Dans ces conditions, le bilan d'énergie se réduit au bilan d'énergie mécanique et ce dernier résulte directement de l'équation de conservation de l'impulsion et de la masse.*

Dans certaines applications, on préfère écrire les équations de Navier–Stokes incompressibles sous forme adimensionnée ; dans ce cas, il convient de remplacer

Matériau	Viscosité dynamique (Pa.s)
Air	10^{-5}
Eau	10^{-3}
Huile d'olive	10^{-1}
Miel liquide	10
Polymères fondus	10^3
Bitume	10^8
Verre fondu	10^{12}
Verre	10^{40}

TABLE 3.1 – Viscosité dynamique ν de quelques fluides newtoniens

la viscosité ν par l'inverse du nombre de Reynolds. Ce nombre, sans dimension, représente l'importance relative des effets convectifs dus au terme $(u \cdot \nabla)u$ par rapport aux effets visqueux dus au terme $\nu \Delta u$. Lorsque le nombre de Reynolds est suffisamment petit (la valeur numérique du seuil dépend de l'application considérée), il est légitime de négliger le terme $(u \cdot \nabla)u$ dans (3.12). On obtient alors les équations dites de Stokes, qui s'écrivent sous la forme

$$\partial_t u + \nabla p - \nu \Delta u = f, \quad (3.14)$$

$$\operatorname{div} u = 0. \quad (3.15)$$

On peut également considérer la version stationnaire des équations de Stokes sous la forme

$$\nabla p - \Delta u = f, \quad (3.16)$$

$$\operatorname{div} u = 0. \quad (3.17)$$

On observera que la viscosité n'intervient pas dans les équations de Stokes stationnaires. En effet, celle-ci peut être éliminée par changement d'échelle en vitesse.

Remarque 35. *On considère moins fréquemment la version stationnaire des équations de Navier–Stokes incompressibles car la présence du terme convectif $(u \cdot \nabla)u$ conduit en général à l'apparition de structures turbulentes dans l'écoulement qui sont incompatibles avec l'établissement d'un régime stationnaire.*

Remarque 36. *Quand on résout le système de Stokes (3.16)–(3.17), on cherche typiquement la pression p comme une fonction dans $L^2(\Omega)$ à moyenne nulle (le système d'EDP ne la détermine qu'à une constante additive près). Il n'est donc pas possible, ni en fait nécessaire, d'imposer des conditions aux limites (de type Dirichlet) sur p . On cherche typiquement u comme une fonction dans $(H^1(\Omega))^d$, et il est donc possible (et nécessaire !) d'imposer des conditions aux limites sur u . Un choix usuel est d'imposer $u = 0$ sur $\partial\Omega$.*

3.4 Elasticité linéaire

3.4.1 Elastodynamique

On considère un milieu continu en dimension d (typiquement, $d = 2$ ou $d = 3$) déformable qui, au repos, occupe le volume Ω . Le milieu est soumis à un champ d'efforts volumiques $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$, qui peut éventuellement dépendre du temps. Sous l'action de ce chargement, le milieu se déforme. L'état du milieu déformé est décrit par le champ de déplacements $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$, qui peut lui aussi dépendre du temps. Un point x du milieu dans la configuration initiale Ω est translaté du vecteur $u(x)$ dans la nouvelle configuration. On note v la vitesse associée : $v(t, x) = \partial_t u(t, x)$.

Afin de déterminer l'équation satisfaite par le champ u , on rappelle la notion de tenseur de contraintes $\sigma : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}$, déjà introduite à la section 3.2.2. En un point x du milieu, on considère une facette centrée en x et de surface dS . Celle-ci sépare le milieu en deux parties, notées conventionnellement 1 et 2. On désigne par n la normale unitaire à la facette orientée de 1 vers 2. Alors, les efforts intérieurs (dus à la déformation) exercés par 2 sur 1 sont donnés par le vecteur $(\sigma n) dS$.

Dans le cadre de l'hypothèse des petits déplacements, le terme nonlinéaire dans la deuxième ligne de (3.7) peut être négligé, ce qui conduit à

$$\rho \partial_{tt} u = \operatorname{div} \sigma + F_{\text{ext}}. \quad (3.18)$$

On introduit le tenseur des déformations linéarisées

$$\varepsilon(u) = \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla u^T). \quad (3.19)$$

On postule que le milieu est régi par une loi de comportement élastique (en l'absence d'efforts, le système revient à sa configuration d'origine, il n'y a pas de déformation résiduelle), linéaire et isotrope (il n'y a pas de direction privilégiée), ce qui permet de relier le tenseur des contraintes au tenseur des déformations linéarisées par la relation

$$\sigma = 2\mu \varepsilon(u) + \lambda \operatorname{tr}(\varepsilon(u)) I, \quad (3.20)$$

où λ et μ désignent les coefficients phénoménologiques de Lamé et I est la matrice identité de $\mathbb{R}^{d \times d}$.

Remarque 37. *Il est logique que σ s'exprime comme une fonction de $\varepsilon(u)$ et non pas comme une fonction de u . En effet, lorsqu'on impose une translation uniforme sur le matériau, cela ne crée aucun effort dans le matériau. Il est donc normal que l'ajout d'une constante à u n'ait aucun effet sur σ . De la même manière, lorsqu'on fait tourner le matériau, σ doit rester nul. Dans le cas simple d'un problème en deux dimensions, une rotation d'angle θ s'exprime par le déplacement u donné par*

$$u(x) + x = \text{position courante} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} x.$$

Dans l'hypothèse des petits déplacements, θ est proche de 0, donc

$$u(x) + x \approx \begin{pmatrix} 1 & \theta \\ -\theta & 1 \end{pmatrix} x = x + M x,$$

où la matrice $M = \begin{pmatrix} 0 & \theta \\ -\theta & 0 \end{pmatrix}$ est antisymétrique. On voit donc que $\nabla u = M$, ce qui donne que $\varepsilon(u) = 0$.

On peut en fait montrer (en 2D comme en 3D) que $\varepsilon(u) = 0$ dans un ouvert Ω connexe si et seulement si u est un mouvement rigidifiant dans Ω , i.e. il existe un vecteur b constant et une matrice M constante et antisymétrique tels que $u(x) = b + M x$ pour tout $x \in \Omega$.

En combinant (3.19) et (3.20), on obtient

$$\sigma = \mu (\nabla u + \nabla u^T) + \lambda \operatorname{div} u I,$$

ce qui donne

$$\operatorname{div} \sigma = \operatorname{div}(\mu(\nabla u + \nabla u^T)) + \nabla(\lambda \operatorname{div} u),$$

puisque $[\operatorname{div}(\lambda \operatorname{div} u I)]_\ell = \sum_{i=1}^d \partial_{x_i} [(\lambda \operatorname{div} u) I_{i\ell}] = \partial_{x_\ell} [(\lambda \operatorname{div} u)]$. Lorsque λ et μ sont constants, cette relation se simplifie. On calcule en effet

$$\begin{aligned} [\operatorname{div} \sigma]_\ell &= \mu \sum_{i=1}^d \partial_{x_i} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_\ell} + \frac{\partial u_\ell}{\partial x_i} \right] + \lambda \partial_{x_\ell} (\operatorname{div} u) \\ &= \mu \partial_{x_\ell} (\operatorname{div} u) + \mu \Delta u_\ell + \lambda \partial_{x_\ell} (\operatorname{div} u), \end{aligned}$$

ce qui donne

$$\operatorname{div} \sigma = \mu \Delta u + (\lambda + \mu) \nabla(\operatorname{div} u). \quad (3.21)$$

En insérant ceci dans (3.18), on obtient

$$\rho \partial_{tt} u - \mu \Delta u - (\lambda + \mu) \nabla(\operatorname{div} u) = F_{\text{ext}}. \quad (3.22)$$

On reconnaît une équation des ondes. En supposant par exemple que le matériau occupe un domaine Ω bi-dimensionnel et que $u(x, y)$ est porté par e_z (modélisation typique du déplacement vertical d'une membrane), on trouve, en écrivant la troisième composante de (3.22) et en utilisant le fait que $\operatorname{div} u = 0$, que

$$\rho \partial_{tt} u - \mu \Delta u = f,$$

où cette fois-ci u est à valeur scalaire. C'est bien l'équation des ondes déjà rencontrée à la section 1.4 (cf. l'équation (1.39)).

3.4.2 Equilibre élastique

On peut chercher des solutions stationnaires du problème précédent, i.e. résoudre l'équation $-\operatorname{div} \sigma = F_{\text{ext}}$. L'expression (3.21) donne

$$-\mu \Delta u - (\lambda + \mu) \nabla(\operatorname{div} u) = F_{\text{ext}}, \quad (3.23)$$

ce qui s'écrit, composante par composante, sous la forme

$$-\mu \Delta u_\ell - (\lambda + \mu) \partial_\ell(\operatorname{div} u) = F_\ell.$$

On peut compléter le problème par plusieurs types de conditions aux limites (sur la frontière $\partial\Omega$ du milieu) :

— si la frontière du milieu est maintenue fixe, on impose

$$u|_{\partial\Omega} = 0. \quad (3.24)$$

— une autre possibilité consiste à imposer les efforts sur la frontière. Dans ce cas, on se donne une fonction $g : \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ et on impose

$$(\sigma n)|_{\partial\Omega} = g, \quad (3.25)$$

où n désigne la normale extérieure à Ω . En repensant à la modélisation des efforts, on comprend que ceci signifie qu'on impose les forces (par unité de surface) sur le bord de Ω .

Dans le cas (3.24) de conditions aux limites de Dirichlet homogènes, on peut établir la formulation variationnelle du problème (3.23). L'équation (3.23) est satisfaite au sens des distributions, donc, pour tout $v \in (\mathcal{D}(\Omega))^d$, on a

$$\langle -\mu \Delta u_\ell - (\lambda + \mu) \partial_\ell(\operatorname{div} u), v_\ell \rangle = \int_{\Omega} v_\ell F_\ell.$$

On fait passer les dérivées sur la fonction test v_ℓ et on obtient (on peut alors identifier les crochets de distribution avec des intégrales car les objets sont assez réguliers)

$$\mu \int_{\Omega} \nabla v_\ell \cdot \nabla u_\ell + (\lambda + \mu) \int_{\Omega} \partial_\ell v_\ell (\operatorname{div} u) = \int_{\Omega} v_\ell F_\ell.$$

En sommant sur les composantes, ceci donne

$$\mu \int_{\Omega} \nabla v : \nabla u + (\lambda + \mu) \int_{\Omega} (\operatorname{div} v) (\operatorname{div} u) = \int_{\Omega} v \cdot F,$$

et on peut montrer que ceci revient exactement à écrire

$$\int_{\Omega} \sigma(u) : \varepsilon(v) = \int_{\Omega} v \cdot F \quad (3.26)$$

pour tout $v \in (\mathcal{D}(\Omega))^d$. On procède ensuite par densité, et on obtient finalement que la formulation variationnelle du problème (3.23)–(3.24) consiste à chercher $u \in (H_0^1(\Omega))^d$ tel que (3.26) est vrai pour tout $v \in (H_0^1(\Omega))^d$.

Dans le cas (3.25) de conditions aux limites de Neumann, on procède de la manière formelle (toutes les fonctions sont supposées assez régulières pour que le calcul ci-dessous ait un sens) suivante pour obtenir la formulation variationnelle du problème (3.23). On cherche $u \in (H^1(\Omega))^d$ tel que, pour tout $v \in (H^1(\Omega))^d$,

$$-\int_{\Omega} v_{\ell} [\operatorname{div} \sigma(u)]_{\ell} = \int_{\Omega} v_{\ell} F_{\ell},$$

soit, en utilisant la définition de l'opérateur divergence,

$$-\int_{\Omega} v_{\ell} \operatorname{div} \sigma_{\ell}(u) = \int_{\Omega} v_{\ell} F_{\ell},$$

et donc

$$\int_{\Omega} \nabla v_{\ell} \cdot \sigma_{\ell}(u) - \int_{\partial\Omega} v_{\ell} n \cdot \sigma_{\ell}(u) = \int_{\Omega} v_{\ell} F_{\ell},$$

ce qu'on peut écrire sous la forme

$$\int_{\Omega} \sum_i \partial_i v_{\ell} \sigma_{\ell i}(u) - \int_{\partial\Omega} \sum_i v_{\ell} n_i \sigma_{\ell i}(u) = \int_{\Omega} v_{\ell} F_{\ell}.$$

On somme sur ℓ et on utilise le fait que σ est symétrique :

$$\int_{\Omega} \varepsilon(v) : \sigma(u) - \int_{\partial\Omega} v \cdot (\sigma(u) n) = \int_{\Omega} v \cdot F.$$

La condition aux limites (3.25), qui est motivée physiquement, est *exactement* celle qui apparait dans l'intégration par partie ci-dessus. On a donc

$$\int_{\Omega} \varepsilon(v) : \sigma(u) = \int_{\partial\Omega} v \cdot g + \int_{\Omega} v \cdot F.$$

On remarque que, si cette formulation variationnelle admet une solution, alors, en prenant $v = e_{\alpha}$ pour n'importe quelle direction $1 \leq \alpha \leq d$, on trouve que $\int_{\partial\Omega} g + \int_{\Omega} F = 0$. Pour qu'il y ait une solution au problème d'équilibre (mécanique), il faut que la somme des forces appliquées au système soit nulle. On retrouve les conditions de compatibilité usuelles pour les problèmes avec conditions aux limites de Neumann, dont on connaît la motivation mathématique, et qu'on vient d'interpréter en terme mécanique.

Remarque 38. La forme bilinéaire $(u, v) \mapsto \int_{\Omega} \varepsilon(v) : \sigma(u)$ est symétrique, donc on peut aussi considérer le problème sous forme énergétique, avec l'énergie interne

$$E_{\text{el}}(u) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \varepsilon(u) : \sigma(u) = \int_{\Omega} \frac{\mu}{4} (\nabla u + \nabla u^T) : (\nabla u + \nabla u^T) + \frac{\lambda}{2} (\operatorname{div} u)^2.$$

Par ailleurs, l'énergie potentielle du milieu induite par les forces extérieures s'écrit

$$E_{\text{ext}}(u) = \int_{\Omega} F \cdot u$$

si on se place dans le cas de la condition aux limites (3.24), et

$$E_{\text{ext}}(u) = \int_{\Omega} F \cdot u + \int_{\partial\Omega} g \cdot u$$

si on se place dans le cas de la condition aux limites (3.25).

La minimisation de l'énergie totale $E_{\text{el}}(u) - E_{\text{ext}}(u)$ conduit à résoudre l'équation aux dérivées partielles (3.23) avec la condition aux limites (3.24) ou (3.25).

3.4.3 Module d'Young et coefficient de Poisson (et leur interprétation)

On considère le cas où on met le matériau en traction uni-dimensionnelle. On cherche une solution sous la forme

$$u(x) = x_1 e_1 - \nu \sum_{i=2}^d x_i e_i.$$

Cette expression est motivée par le fait que, lorsqu'on étire dans la direction 1, il est souvent observé un rétrécissement dans les autres directions.

On imagine une éprouvette en dimension d dont les deux faces perpendiculaires à la direction e_1 subissent un déplacement imposé, tandis que, pour toutes les autres faces, on laisse relaxer (ce qui correspond à imposer une force nulle).

On a donc $\text{div } u = 1 - (d-1)\nu$, et

$$\sigma = 2\mu e_1 \otimes e_1 - 2\mu\nu \sum_{i=2}^d e_i \otimes e_i + \lambda(1 - (d-1)\nu) I.$$

On voit donc que σ est une constante.

Pour tout $i > 1$, on a $\sigma e_i = 0$ sur les faces latérales du système, ce qui donne

$$-2\mu\nu + \lambda(1 - (d-1)\nu) = 0,$$

et donc

$$\lambda = \nu(2\mu + (d-1)\lambda),$$

soit

$$\nu = \frac{\lambda}{2\mu + (d-1)\lambda}.$$

Pour $i = 1$, on voit que le vecteur σe_1 est porté par e_1 , on pose $\sigma e_1 = E e_1$, ce qui donne

$$2\mu + \lambda(1 - (d-1)\nu) = E,$$

et donc

$$E = 2\mu + 2\mu\nu = \frac{2\mu(2\mu + (d-1)\lambda) + 2\mu\lambda}{2\mu + (d-1)\lambda} = \frac{2\mu(2\mu + d\lambda)}{2\mu + (d-1)\lambda}.$$

Par construction, le module d'Young E correspond à la raideur dans la direction de e_1 (car $\sigma_{11} = E\varepsilon_{11}$), tandis que le coefficient de Poisson ν correspond à la contraction relative. On vient d'obtenir leur expression, en dimension d , en fonction des coefficients de Lamé μ et λ .

En dimension $d = 3$, on a donc

$$\nu = \frac{\lambda}{2(\mu + \lambda)}, \quad E = \frac{\mu(2\mu + 3\lambda)}{\mu + \lambda}.$$

et réciproquement

$$\lambda = \frac{\nu}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} E, \quad \mu = \frac{1}{2(1 + \nu)} E.$$

Lorsque $\nu \rightarrow 1/2$, on voit que $\lambda \gg \mu$. Dans la loi de comportement, le terme $\nabla(\operatorname{div} u)$ est pénalisé, il tend donc vers 0 lorsque $\lambda/\mu \rightarrow \infty$, ce qui correspond à $\operatorname{div} u$ uniforme. Les conditions aux limites imposent typiquement que $\operatorname{div} u = 0$, donc, en dérivant par rapport au temps, on arrive à $\operatorname{div} v = 0$ et donc un matériau incompressible. La limite $\nu \rightarrow 1/2$ correspond donc à la limite d'un matériau incompressible.

Matériau	Module d'Young (MPa)	Coefficient de Poisson
Acier (20°)	200 000	0.3
Béton (20°)	30 000	0.2
Plexiglass (20°)	3 000	0.4
Caoutchouc (20°)	2	0.5

TABLE 3.2 – Module d'Young E et coefficient de Poisson ν de quelques matériaux

Chapitre 4

Système de particules en interaction

On considère une particule ponctuelle de masse m évoluant, dans l'espace $\mathbb{R}^3$, selon les lois de la mécanique classique dans un potentiel extérieur V , qui peut dépendre du temps. Pour simplifier, on suppose que le potentiel V est de classe C^1 par rapport à la variable x et qu'il existe deux constantes réelles positives α et β telles que

$$\forall t > 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^3, \quad |V(x, t)| \leq \alpha |x|^2 + \beta.$$

A tout instant t , la particule occupe une position $x(t) \in \mathbb{R}^3$, dont la loi d'évolution est donnée par l'équation de Newton

$$m \ddot{x}(t) = -\nabla V(x(t), t). \quad (4.1)$$

A tout instant t , l'état de la particule est complètement décrit par le couple position-vitesse $(x(t), \dot{x}(t))$: si on connaît ces deux grandeurs physiques, on peut prévoir le résultat de la mesure de n'importe quelle autre grandeur physique (impulsion, moment cinétique, énergie potentielle, énergie cinétique, énergie totale, etc) associée à la dynamique de la particule. On peut en outre (en théorie) décrire le passé et le futur de la particule en intégrant l'équation de Newton.

4.1 Principe de moindre action

Les lois de la mécanique classique peuvent être reformulées, comme d'ailleurs toute la physique classique, en un principe de moindre action, comme nous le présentons maintenant.

Pour un système décrit à l'instant t dans l'espace position-vitesse par le

couple $(x(t), \dot{x}(t)) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$, on définit l'action associée à un chemin

$$\begin{array}{ccc} q : [t_0, t_1] & \longrightarrow & \mathbb{R}^3 \\ t & \longmapsto & x(t) \end{array}$$

(qui peut être ou non une trajectoire physiquement admissible) par

$$S(q) = \int_{t_0}^{t_1} L(t, x(t), \dot{x}(t)) dt,$$

où L désigne le lagrangien du système. Dans le cas que nous examinons (un point matériel de $\mathbb{R}^3$ de masse m soumis à un potentiel extérieur V), le lagrangien est défini comme l'application

$$\begin{array}{ccc} L : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ (t, x, v) & \longmapsto & \frac{1}{2} m v^2 - V(x, t). \end{array} \quad (4.2)$$

Le principe de moindre action¹ stipule que les trajectoires physiquement admissibles sont les points critiques de l'action. Donc, si on a observé le système au point x_0 à l'instant t_0 , puis au point x_1 à l'instant t_1 , celui-ci aura emprunté entre ces deux instants une trajectoire $x \in H^1([t_0, t_1]; \mathbb{R}^3)$ vérifiant $x(t_0) = x_0$, $x(t_1) = x_1$ et

$$\forall h \in H_0^1([t_0, t_1]; \mathbb{R}^3), \quad dS(x) \cdot h = 0,$$

où $dS(x)$ est la différentielle de S évaluée au point x . Calculons la différentielle de S . Soit $h \in H_0^1([t_0, t_1]; \mathbb{R}^3)$. On voit que

$$\begin{aligned} & S(x+h) \\ &= \int_{t_0}^{t_1} L(t, x(t)+h(t), \dot{x}(t)+\dot{h}(t)) dt \\ &= S(x) + \sum_{i=1}^3 \int_{t_0}^{t_1} \left[\frac{\partial L}{\partial x_i}(t, x(t), \dot{x}(t)) h_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}(t, x(t), \dot{x}(t)) \dot{h}_i \right] dt + o(h) \\ &= S(x) + \sum_{i=1}^3 \int_{t_0}^{t_1} \left[\frac{\partial L}{\partial x_i}(t, x(t), \dot{x}(t)) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}(t, x(t), \dot{x}(t)) \right) \right] h_i dt + o(h), \end{aligned}$$

où on a utilisé à la dernière ligne une intégration par parties et le fait que h_i est nul en t_0 et en t_1 . De manière plus compacte, on a donc

$$\forall h \in H_0^1([t_0, t_1]; \mathbb{R}^3), \quad \sum_{i=1}^3 \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) \right) h_i = 0,$$

et donc

$$\forall 1 \leq i \leq d, \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0. \quad (4.3)$$

1. Qu'il faudrait en toute rigueur appeler principe d'action stationnaire.

Les équations (4.3) ne sont autres que les équations d'Euler qui découlent du principe de moindre action. En utilisant la définition (4.2) du lagrangien, on obtient

$$\frac{d}{dt}(m \dot{x}) + \nabla V = 0.$$

On retrouve ainsi la loi de Newton (4.1).

Un des intérêts de la formulation lagrangienne est qu'elle permet de dériver simplement les équations du mouvement dans un système quelconque de coordonnées ou pour des systèmes mécaniques dont le mouvement est soumis à des contraintes géométriques (comme un bras de robot).

4.2 Formulation hamiltonienne

Nous allons maintenant présenter une troisième formulation des équations de la mécanique, elle aussi très utile tant sur le plan théorique que sur celui des applications. Il s'agit de la formulation hamiltonienne, qui s'obtient à partir de la formulation lagrangienne de la façon suivante. Au lieu de travailler dans l'espace position-vitesse $(x, \dot{x}) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$, on va maintenant travailler dans l'espace des phases $(x, p) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$, où p est la variable impulsion (encore appelée moment cinétique), qui est définie par

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}. \quad (4.4)$$

On introduit ensuite l'hamiltonien du système

$$H = p \cdot \dot{x} - L(t, x, \dot{x}). \quad (4.5)$$

La fonction H qui dépend *a priori* de x , $\dot{x}$, p et t , ne dépend en fait que de x , p et t :

$$\begin{aligned} dH &= \dot{x} dp + p d\dot{x} - \frac{\partial L}{\partial x} dx - \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} d\dot{x} - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \dot{x} dp - \frac{\partial L}{\partial x} dx - \frac{\partial L}{\partial t} dt. \end{aligned}$$

Dans la suite, on considère donc H comme une fonction de t , x et p . La relation ci-dessus indique que

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{x}, \quad \frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial L}{\partial x}, \quad \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}.$$

En utilisant (4.3) puis (4.4), la deuxième relation donne

$$\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial L}{\partial x} = -\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = -\frac{dp}{dt}.$$

On en déduit les relations

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \end{cases} \quad (4.6)$$

qui fournissent une dynamique sur les variables (x, p) . Pour la particule décrite par le lagrangien (4.2), la définition (4.4) conduit à

$$p = m \dot{x} \quad (4.7)$$

et on déduit de (4.5) que

$$H(x, p, t) = \frac{p^2}{2m} + V(x, t). \quad (4.8)$$

Les équations du mouvement (4.6) s'écrivent alors

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{p}{m}, \\ \dot{p} = -\frac{\partial V}{\partial x}. \end{cases} \quad (4.9)$$

En éliminant la variable p , on retrouve bien l'équation de Newton (4.1). On voit, en combinant (4.7) et (4.8), que l'hamiltonien correspond à l'énergie totale du système :

$$H(x, p, t) = \frac{p^2}{2m} + V(x, t) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + V(x, t) = E(t).$$

Ceci est une règle générale. En revanche, la relation $p = m \dot{x}$ de proportionnalité entre la vitesse $\dot{x}$ et l'impulsion p est une spécificité du système considéré.

La formulation hamiltonienne présente l'avantage d'avoir une structure géométrique très profonde, dite symplectique, de laquelle découle un grand nombre de propriétés très intéressantes. Ceci est lié à l'écriture de (4.9) sous la forme suivante :

$$\dot{y} = J \nabla_y H, \quad (4.10)$$

où $y = \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix}$ est la variable permettant de décrire le système, $J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ est une matrice antisymétrique constante, et $\nabla_y H = \begin{pmatrix} \partial_x H \\ \partial_p H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_x V \\ p/m \end{pmatrix}$ est le gradient du hamiltonien par rapport à y . La spécificité de (4.10) est liée au fait que n'importe quel vecteur n'est pas le gradient d'une certaine fonction.

Faute de place, nous ne pouvons pas nous étendre plus sur ce sujet dans ces notes, et renvoyons aux notes de cours [3] et au livre de référence [4].

4.3 Formulation liouvillienne

Enfin, il existe une quatrième formulation des équations de la mécanique classique, dite liouvillienne. Considérons en effet la distribution $f(t)$ sur l'espace des phases $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ définie par

$$f(t) = \delta_{(x(t), p(t))},$$

où $(x(t), p(t))$ sont les solutions des équations du mouvement (4.9) avec pour conditions initiales $(x(0), p(0)) = (x_0, p_0)$, (x_0, p_0) étant un vecteur donné de $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$. Un calcul simple laissé en exercice au lecteur montre que f est solution au sens des distributions dans $\mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ (espace temps–position–impulsion) de l'équation aux dérivées partielles linéaire

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{p}{m} \cdot \nabla_x f - \nabla V \cdot \nabla_p f = 0, \quad (4.11)$$

avec condition initiale $f(0, \cdot, \cdot) = f_0 = \delta_{(x_0, p_0)}$. Dans le cas que nous avons considéré pour dériver l'équation (4.11), l'état du système à l'instant initial est supposé parfaitement connu et la donnée initiale f_0 est donc représentée par une masse de Dirac au point (x_0, p_0) .

Un des intérêts de l'équation (4.11) est qu'elle est encore valable lorsque l'état du système à l'instant initial n'est connu qu'en probabilité. La donnée initiale f_0 est alors une probabilité sur $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ (c'est-à-dire, rappelons-le, une mesure positive sur $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ telle que la mesure de $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ soit égale à 1). Notons que ceci est consistant avec ce qui précède puisque la masse de Dirac $\delta_{(x_0, p_0)}$ est une probabilité sur $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ particulière (correspondant en fait à une certitude sur la position et l'impulsion de la particule). C'est essentiellement dans le cadre de la physique statistique qu'on est amené à considérer des systèmes dont l'état n'est connu qu'en probabilité. Ainsi, par exemple, si la particule est à l'équilibre thermique avec un thermostat à la température T , la densité de probabilité de trouver la particule dans l'état (x, p) est stationnaire et est donnée par la loi de Boltzmann

$$g(x, p) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(x, p)}$$

où $\beta = 1/(k_B T)$ (où k_B est la constante de Boltzmann), $H(x, p)$ l'hamiltonien du système, et Z la constante de normalisation

$$Z = \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} e^{-\beta H(x, p)} dx dp.$$

Notons que g ne définit une densité de probabilité que si Z est fini, autrement dit si

$$\int_{\mathbb{R}^3} e^{-\beta V(x)} dx < +\infty.$$

On laisse le lecteur vérifier en exercice que la fonction $e^{-\beta H(x, p)}$ est bien une solution stationnaire de l'équation (4.11).

4.4 Système de particules

Considérons maintenant un système isolé composé de N particules ponctuelles de masses $m_1, m_2, \dots, m_N$, en interaction via le potentiel $V(x_1, \dots, x_N)$. Dans le formalisme hamiltonien, l'état du système à l'instant t est décrit par un

point $(\{x_i(t)\}_{1 \leq i \leq N}, \{p_i(t)\}_{1 \leq i \leq N})$ de l'espace des phases $\mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N}$. L'hamiltonien est autonome (il ne dépend pas explicitement du temps) et s'écrit

$$H(\{x_i\}, \{p_i\}) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + V(x_1, \dots, x_N).$$

Les équations du mouvement sont alors données par

$$\forall 1 \leq i \leq N, \quad \begin{cases} \dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m_i}, \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -\nabla_{x_i} V. \end{cases}$$

Par ailleurs, le lagrangien du système est défini sur l'espace position-vitesse $\mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N}$ par

$$\mathcal{L}(\{x_i\}, \{v_i\}) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i v_i^2 - V(x_1, \dots, x_N).$$

Enfin, l'équation de Liouville correspondante est posée sur l'espace temps-position-impulsion $(\mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N})$ et s'écrit

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{p_i}{m_i} \cdot \nabla_{x_i} f - \sum_{i=1}^N \nabla_{x_i} V \cdot \nabla_{p_i} f = 0. \quad (4.12)$$

Bibliographie

- [1] V. Ehrlacher et F. Legoll, Problèmes d'évolution (Cours de deuxième année de l'ENPC, 2020, notes de cours disponibles à http://cermics.enpc.fr/~legoll/pbevol/poly_PbEvol_mars-2020.pdf).
- [2] L.C. Evans, Partial differential equations (Graduate Studies in Mathematics, 19, American Mathematical Society, Providence, RI, 1998).
- [3] E. Hairer, Numerical Geometric Integration (Notes de cours de l'Université de Genève, 1999, disponibles à <https://www.unige.ch/~hairer/polycop.html>).
- [4] E. Hairer, C. Lubich et G. Wanner, Geometric Numerical Integration (Springer, 2006).
- [5] F. Legoll, Partial differential equations : variational approaches (Cours de première année de l'ENPC, 2022, notes de cours disponibles à http://cermics.enpc.fr/~legoll/edpef/poly_EDP.pdf).
- [6] J.T. Oden, An introduction to mathematical modeling (a course in mechanics), Wiley, 2011.