Modélisation et Calcul Scientifique

Introduction générale

Philippe Villedieu
Philippe.villedieu@insa-toulouse.fr

INSA INSTITUT NATIONAL DES SCIENCES APPLIQUÉES TOULOUSE

Notion générale de modèle mathématique

Objet ou Système du “Monde réel”

Modélisation ⟹ étapes d’abstraction & de simplification

Modèle = Ensemble d’équations mathématiques

Un modèle mathématique peut avoir un objectif :

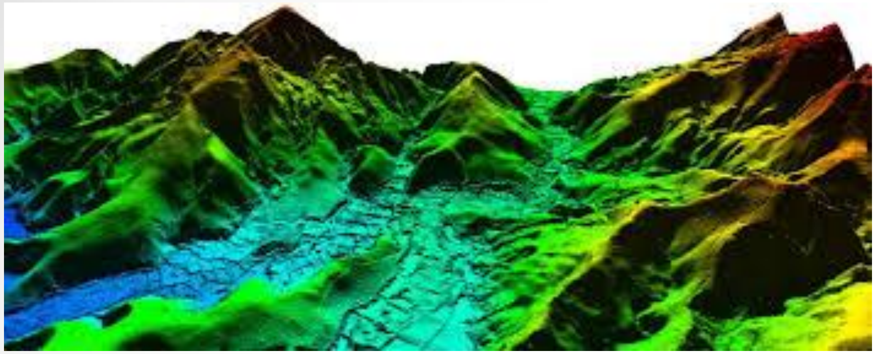
- **Descriptif :** il s’agit de représenter ordinateur un objet du monde réel. par un objet mathématique facilement manipulable avec un ordinateur. Exemple: modèle CAO d’un avion, d’un pont … (ensemble d’équations de courbes et de surface), un modèle numérique de terrain donnant l’altitude z d’un point en fonction de ses coordonnées (x,y) …
- **Prédictif:** il s’agit de prévoir (avec éventuellement une certaine probabilité) la valeur de variables notées Y_j (sorties du modèle) en fonction des valeurs de variables notées X_i (entrées du modèle)

Notion générale de modèle mathématique

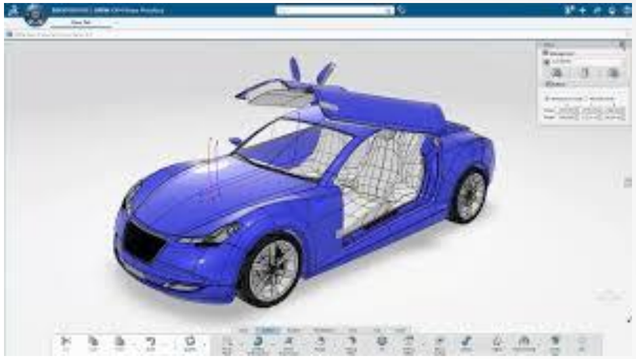
- On peut utiliser les sorties d'un modèle descriptif parmi les entrées d'un modèle prédictif. Exemples: modèle de terrain comme entrée d'un modèle de prévision de crue, modèle CAO d'un pont comme entrée d'un modèle Elément Finis pour un calcul de contraintes …

- Pour un même "objet" (ou un même "système") du monde réel, il peut exister une infinité de modèles mathématiques différents. Le choix d'un modèle dépend :
  - du type d'information que l'on souhaite extraire du modèle,
  - de la précision recherchée,
  - de la quantité de données dont on dispose pour construire le modèle,
  - des connaissances a priori (indépendantes des données disponibles) que l'on peut avoir sur le problème à modéliser (exemple: lois fondamentales de la Physique)

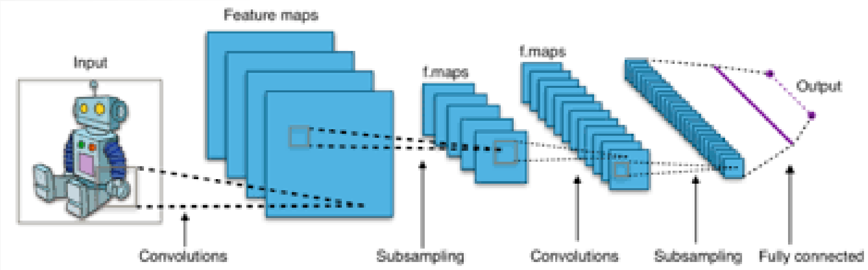
Exemples de modèles mathématiques



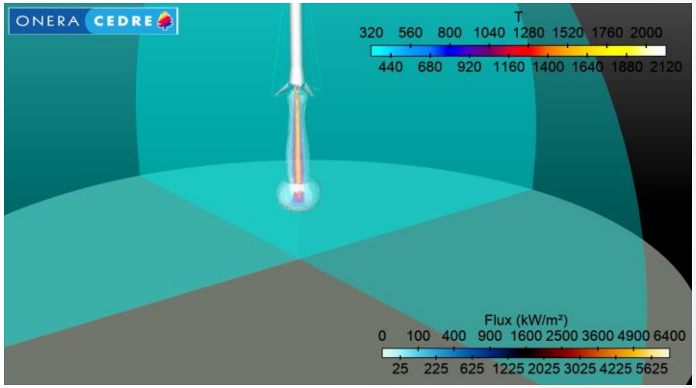
Modèle numérique de terrain



CAO d'une voiiture avec le logiciel CATIA de Dassault Systèmes



Réseau de neurones convolutif pour analyser une image 2D ou 3D



Modèle CFD (volumes finis) du réaterrissage d'une fusée

Un modèle pourquoi faire ?

- **Modèle = Outil d'aide à la conception.** Un modèle permet de prévoir le comportement d'un système sans avoir à réaliser d'essais physiques (ou en réduisant fortement leur nombre). On peut donc facilement faire varier le design du système jusqu'à obtenir les performances désirées → Economie importante de temps et d'argent.

- **Modèle = outil d'aide à la décision**. Par exemple un modèle de prévision de crue ou de feu de forêt permet de décider de zones à évacuer, un modèle de vision artificielle permet à un véhicule autonome de se diriger, un modèle de prévision d'épidémie aide les autorités à décider des mesures sanitaires à adopter, un modèle de prévision de comportement de consommateurs permet de décider d'une politique marketing …

Classification des modèles (1/4)

Les modèles peuvent être regoupés en deux grandes catégories:

- ✓ **Les modèles algébriques** qui peuvent se mettre sous la forme: Y = F(X) où Y est un vecteur de $\mathbb{R}^s$ (regroupant les variables de sortie) et X un vecteur de $\mathbb{R}^e$ (regroupant les variables d'entrée).
- ✓ **Les modèles différentiels (ou intégro-différentiels)** dont les sorties Y_i dépendent de fonctions U_k, dépendant elles même d'une ou plusieurs variables continues (à ne pas confondre avec les variables d'entrée du modèle notées X_j) et solutions d'un sytème d'équations différentielles (edo) ou aux dérivées partielles (edp) associé à des conditions aux limites et / ou initiales.

Au sein de ces deux catégories, on peut faire une sous-distinction entre :

- ✓ **Modèles déterministes,** pour lesquels les entrées, les sorties et le modèle lui même sont de nature déterministe.
- ✓ **Modèles probabilistes**, pour lesquels certaines entrées ou sorties et / ou certains paramètres du modèle sont aléatoires.

Classification des modèles (2/4)

- Les **équations de Navier Stokes** en mécanique des fluides ou bien les **équations de Maxwell** en électromagnétisme sont des **modèles différentiels** (de type edp).
- Un **réseau de neurones,** un **arbre de décision, la loi d'état** d'un fluide sont des **modèles algébriques**,
- Les différences essentielles entre un **réseau de neurones** (ou un **arbre décisionnel**) et un modèle de type **loi d'état** sont:
  - ✓ le **nombre de variables d'entrée**: 3 pour une loi d'état de corps pur jusqu'à plusieurs millions pour certains réseaux de neurones.
  - ✓ la **complexité de la fonction F** qui dans le cas d'une loi d'état dépend au plus de quelques paramètres (un seul, la masse molaire, pour un gaz partait) alors qu'elle peut dépendre de plusieurs millions, voire milliards, de paramètres pour un réseau complexe.

Classification des modèles (3/4)

- Parmi les **modèles différentiels**, on distingue le cas où **les U_i ne dépendent que d'une seule variable continue**, notée t (désignant généralement le temps) et celui où **les U_i dépendent de plusieurs variables continues**, notées t, x_1, x_2 , x_3, …, x_d.

- **Dans le premier cas, le modèle se présente sous la forme d'un système d'équations différentielles ordinaires (edo)** : $\dot{U} = F(U, X)$ associé à une condition initiale $U(0) = G(X)$.

- **Dans le second cas, le modèle se présente sous la forme d'un système d'équations aux dérivées partielles (edp)**: $A(U, X) = F(X)$ associé à des conditions aux limites $B(U, X) = G(X)$, où A et B sont des opérateurs différentiels (éventuellement intégro-différentiels). Lorsque les U_k dépendent du temps, on distingue, parmi les conditions aux limites, celles en *t=0* que l'on appelle conditions initiales.

- Les sorties du modèle dépendent en général des U_k et des entrées X_i: $Y = J(U, X)$.

Classification des modèles (4/4)

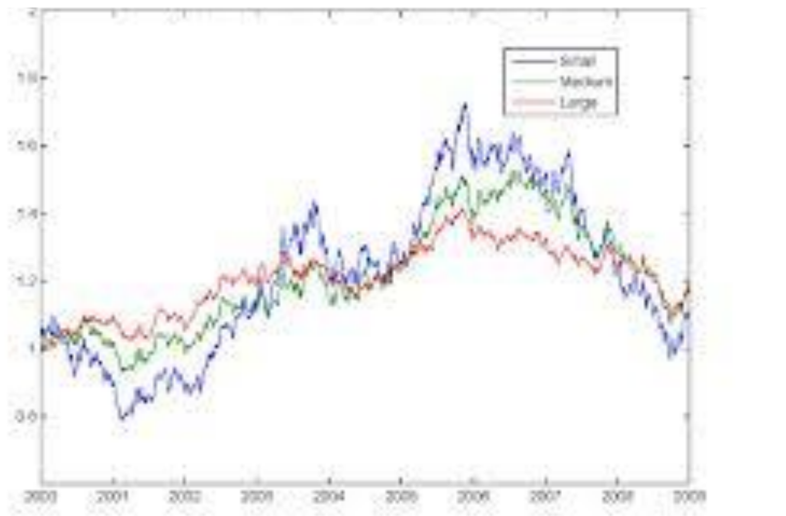
- Dans le cas d'un modèle probabiliste, le système d'edo peut être remplacé par un **système d'équations différentielles stochastiques (eds)** et le système d'edp **par un système d'équations aux dérivées partielles stochastiques (edps).**

- Par exemple, en finance de marché, on utilise parfois le modèle suivant pour l'évolution du cours S_t d'un actif (une action par exemple)

$$dS_t = \mu \, S_t \, dt + \sigma \, S_t \, dB_t$$

où B_t est un mouvement Brownien sur $\mathbb{R}$ et μ et σ deux constantes. Il s'agit d'un exemple simple d'équation différentielle stochastique.

Evolutions possibles du cours d'un actif



Liens entre les différentes classes de modèles

La frontière entre les différentes classes de modèles n'est pas aussi stricte qu'il pourrait paraître:

- Un système d'edp, une fois discrétisé par rapport à toutes les variables sauf une (la variable t en général), devient un système d'edo.
- Une fois discrétisé un système d'edo conduit à un modèle algébrique. Supposons que la sortie Y du modèle soit la variable U(T), corresponant à la variable Y^N pour le système discrétisé. Supposons par ailleurs, à titre d'exemple, que le système discrétisé soit donné par le schéma d'Euler explicite: $U^{n+1} = U^n + \Delta t\, F(U^n, X), U^0 = G(X)$. On a donc: $U^N = U^{N-1} + \Delta t\, F(U^{N-1}, X) = U^{N-2} + \Delta t\, F(U^{N-2}, X) + \Delta t\, F(U^{N-2} + \Delta t\, F(U^{N-2}, X), X) = \cdots$ On voit, en poursuivant le développement, que l'on peut finalement écrire $Y=U^N$ comme une fonction (certe complexe) de X.

Lien entre les différentes classes de modèles

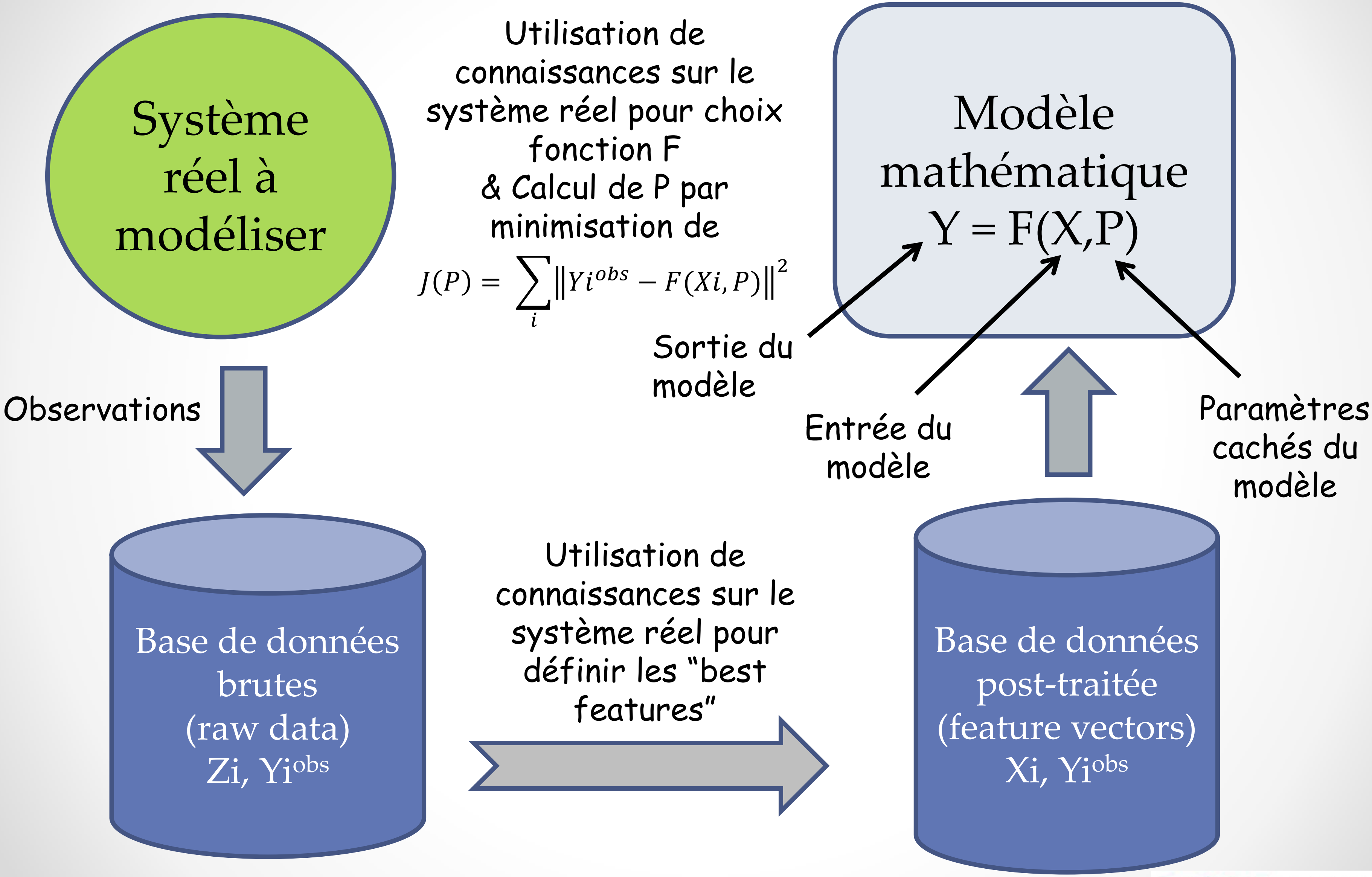
- Il est tout à fait possible (et même courant) de coupler pour un même problème des modèles algébriques, des modèles d'edo et des modèles d'edp.
- Pour être utilisé dans un cycle de conception, a fortiori dans une boucle d'optimisation, le temps de calcul associé à un modèle (le "coût" du modèle) doit être le plus faible possible.
- On distingue les modèles dits "haute fidélité" (HF) des modèles dits "basse fidélité" (BF), les premiers étant très précis mais coûteux, les seconds étant moins précis mais rapides.
- Une tendance actuelle est de construire des modèles réduits (BF), algébriques ou à base d'edo, dérivés de modèles HF basés sur des edp.
- Dans le cas où le modèle réduit est de type algébrique, on peut par exemple utiliser une méthode de krigeage ou d'apprentissage supervisé pour obtenir le modèle réduit en s'appuyant sur des bases de données générées grâce au modèle HF.

Comment construire un modèle ?

De manière schématique, on peut diviser les modèles prédictifs en deux grandes classes selon la manière dont ils sont construits :

- **Les modèles basés uniquement sur des données empiriques** et ne faisant appel à aucune loi de physique, de biologie, d'économie, etc. que l'on pourrait appliquer au système à modéliser (« **Data driven models** »)
- **Les modèles basés au contraire uniquement sur des lois** de la Physique (ou d'un autre domaine) applicables au système considéré (« **Physics based models** »). En réalité, ces modèles font généralement appel à quelques paramètres empiriques (tels que viscosité, module d'Young, volatilité …)

Modèles guidés par les données



Modèles basés sur des lois

Système réel à modéliser

- ✓ Analyse du système, formulation d'hypothèses simplificatrices → choix des inconnues U_i et des variables associées.
- ✓ Application de lois générales et de relations empiriques spécifiques au système étudié

Mise en équations du problème
Nombre d'équations = nombre d'inconnues

Modèle mathématique

$$ALG : Y = F(X)$$

$$EDO : \frac{dU}{dt} = F(U,X) + \mathrm{CI} + Y{=}J(U,X)$$

$$EDP : A(U,X) = F(X) + \mathrm{CL} + Y{=}J(U,X)$$

Modèles hybrides

Système réel à modéliser

Modélisation basée sur un ensemble de lois

Modèle mathématique paramétrable

$ALG : Y = F(X, P)$

$EDO : \frac{dU}{dt} = F(U, X, P) + \mathrm{CI(P)} + Y = J(U,X,P)$

$EDP : A(U, X, P) = F(X,P) + \mathrm{CL(P)} + Y = J(U,X,P)$

P = vecteur de paramètres du modèle

Observations

Base de données Xi, Yi^{obs}

Assimilation de données

Apprentissage

Utilisation d'un algorithme d'optimisation pour déterminer les paramètres P_k minimisant l'écart entre les Y_j et Yi^{obs}

Organisation générale du module

1. Rappels de calcul différentiel
2. Modèles basés sur des EDO et exemple de méthodes numériques associées
3. Modèles basés sur des EDP et exemples de méthodes numériques associées
4. Problèmes au valeurs propres (cas particulier de modèles basés sur des systèmes linéaires d'EDO ou d'EDP)
5. Mini-projet

Plan de la partie 3

1. Exemple de modèles basés sur des edp ou des systèmes d'edp (Ph. Villedieu)

2. Notions théoriques de base sur les edp (Ph. Villedieu)

3. Quelques méthodes de résolution numérique des edp (N. Bertier, Ing. de Recherche ONERA)
   - ✓ Méthode des différences finies
   - ✓ Méthode des volumes finis
   - ✓ Mise en œuvre des méthodes à travers quelques TP