

Chapitre 1

Introduction

L'observation du monde qui nous entoure nous amène à constater qu'il est régi par le principe de causalité. Ce principe est au coeur de la science moderne, et il permet aux scientifiques d'énoncer des lois décrivant les phénomènes physiques, biologiques, chimiques... Les mathématiques trouvent naturellement leur place, puisque nombre de ces lois peuvent être décrites de manière quantitative en termes mathématiques. En particulier, les systèmes dynamiques et les équations aux dérivées partielles sont omniprésents dans la modélisation de nombreux phénomènes. L'objet de ce cours est de présenter quelques problèmes classiques d'équations aux dérivées partielles. On introduira les problèmes, les cadres théoriques et quelques méthodes de résolution numérique.

1.1 L'équation de la chaleur

On considère un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^N$, occupé par un matériau homogène, isotrope et conducteur de la chaleur. On note x la variable d'espace et t la variable de temps. La source de chaleur est donnée par une fonction $f(x, t)$ dépendant du temps et de l'espace. La température est l'inconnue $u(x, t)$. La quantité de chaleur est proportionnelle à la température u et vaut cu , où c est une constante physique dépendant du matériau, appelée chaleur spécifique. En écrivant la loi de la conservation de l'énergie, dans un volume élémentaire $V \subset \Omega$, on obtient que,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V cu(x, t) dx = \int_V f dx - \int_{\partial V} q \cdot n ds \quad (1.1)$$

où, ∂V est le bord de V , n est la normale extérieure unité de Ω et q est le vecteur flux de chaleur. Cette équation traduit donc que, dans le volume élémentaire V , la variation de la quantité de chaleur est égale au bilan de la quantité instantanée

de chaleur produite et de la quantité de chaleur sortante ou entrante. D'après le théorème de la divergence, on a,

$$\int_{\partial V} q \cdot n ds = \int_V \nabla \cdot q dx,$$

l'équation (1.1) devient,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V cu(x, t) dx = \int_V f dx - \int_V \nabla \cdot q dx$$

où

$$\nabla \cdot q = \sum_{i=1}^N \frac{\partial q_i}{\partial x_i} \text{ et } q = (q_1, \dots, q_N)^t,$$

ou encore,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V cu(x, t) dx - \int_V f dx + \int_V \nabla \cdot q dx = 0$$

Le volume V étant arbitraire, on en déduit que,

$$c \frac{\partial}{\partial t} u - f dx + \nabla \cdot q = 0$$

Suivant la loi de Fourier, on a,

$$q = -\kappa \nabla u$$

où κ est la conductivité thermique, et,

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

Ce qui conduit à l'équation,

$$c \frac{\partial}{\partial t} u - \kappa \nabla \cdot \nabla u = f,$$

ou encore,

$$c \frac{\partial}{\partial t} u - \kappa \Delta u = f,$$

où,

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

Il faut ajouter à cette équation, une condition au bord ainsi qu'une condition initiale. La condition initiale est la donnée d'une fonction $u_0(x)$ vérifiant,

$$u(0, x) = u_0(x).$$

La condition au bord caractérise ce qui se passe à la frontière du domaine. Par exemple, si le domaine est plongé dans un thermostat à température constante, la condition au bord sera une condition de type Dirichlet,

$$u = 0 \text{ sur } \partial\Omega.$$

Si le domaine est thermiquement isolé de l'extérieur, on aboutit à une condition au bord de Neumann,

$$\frac{\partial u}{\partial n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega$$

Remarque 1. *L'équation de la chaleur est linéaire. C'est un problème parabolique. Lorsque la source chaleur f dépend elle-même de u , l'équation n'est plus linéaire, et est appelée équation de réaction-diffusion. Les équations de réaction-diffusion apparaissent dans de nombreux domaines, comme par exemple la combustion, la dynamique des populations ou encore les neurosciences.*

Si la chaleur se propage à travers un fluide en mouvement, il faut ajouter un terme de convection proportionnel à la vitesse du fluide. L'équation devient alors,

$$c \frac{\partial}{\partial t} u + cV \nabla u - \kappa \Delta u = f.$$

Le nombre de Peclet défini par,

$$Pe = \frac{cVL}{\kappa},$$

mesure le rapport entre l'effet de diffusion et de convection, où L représente le diamètre de Ω . Lorsque le nombre est très petit on peut négliger le terme de convection, s'il est très grand on peut négliger le terme de diffusion et on obtient l'équation d'advection,

$$\frac{\partial}{\partial t} cu + cV \nabla u = f.$$

1.2 L'équation des ondes

L'équation des ondes modélise des phénomènes de propagation d'ondes telles que les vibrations des cordes d'une guitare ou de la peau d'un tambour. Sous l'action d'une force notée f , la membrane, se déplace, et on note u , la déformation

verticale. Alors, si la membrane est fixée aux extrémités, u est solution de l'équation,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \Delta u = f \text{ sur } \Omega \times \mathbb{R}^+ \quad (1.2)$$

$$u = 0 \text{ sur } \partial\Omega \times \mathbb{R}^+ \quad (1.3)$$

$$u(x, 0) = u_0(x) \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = u_1(x). \quad (1.5)$$

C'est un problème hyperbolique.

1.3 L'équation de Laplace

Supposons que dans l'équation de la chaleur, le second terme ne dépende pas du temps, et que lorsque t tend vers plus l'infini, la solution tend vers un état stationnaire, alors on obtient l'équation suivante,

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f \text{ sur } \Omega \\ u &= 0 \text{ sur } \partial\Omega \end{aligned}$$

C'est un problème elliptique.

Remarque 2. Soit l'équation aux dérivées partielles d'ordre deux suivante :

$$a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + d \frac{\partial u}{\partial x} + e \frac{\partial u}{\partial y} + fu = g$$

alors l'équation est dite parabolique si $b^2 - 4ac = 0$, elliptique si $b^2 - 4ac < 0$, hyperbolique si $b^2 - 4ac > 0$.

1.4 L'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger décrit l'évolution de la fonction d'onde d'une particule soumise à un potentiel V . Rappelons que $u(x, t)$ est une fonction de $\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^+$ à valeurs dans \mathbb{C} et que son module au carré s'interprète comme la probabilité pour détecter que la particule se trouve au point (x, t) . Le potentiel $V(x)$ est une fonction à valeur réelle. La fonction d'onde est solution de,

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + \Delta u - Vu = 0 \text{ sur } \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^+ \quad (1.6)$$

$$u(0, x) = u_0(x) \text{ sur } \mathbb{R}^N. \quad (1.7)$$

1.5 Equations issues des neurosciences

En 1952, après des expériences sur l'axone géant du Calmar, Hodgkin et Huxley proposent le premier modèle mathématique élaboré d'écrivant la propagation du potentiel d'action dans un neurone :

$$(HH) \left\{ \begin{array}{l} C \frac{dV}{dt} = -\bar{g}_K n^4 (V - E_K) - \bar{g}_{Na} m^3 h (V - E_{Na}) - \bar{g}_L (V - E_L) + I + V_{xx} \\ \frac{dm}{dt} = \alpha_m(V)(1 - m) - \beta_m(V)m \\ \frac{dn}{dt} = \alpha_n(V)(1 - n) - \beta_n(V)n \\ \frac{dh}{dt} = \alpha_h(V)(1 - h) - \beta_h(V)h \end{array} \right.$$

C'est un modèle basé sur l'analogie électrique. En utilisant la loi de Kirchoff, on suppose que le courant sortant de la cellule est égal, à la somme des courants ioniques et d'un courant de capacitance. Les courants ioniques sont déduits de la loi d'Ohm, mais en introduisant une conductance variable. C'est l'hypothèse principale du modèle de Hodgkin et Huxley : les courants ioniques sont variables, car ils dépendent de l'ouverture ou de la fermeture de canaux ioniques. Le courant de capacitance, vient du fait que la membrane cellulaire joue le rôle d'un condensateur. Dans l'équation, la variable V représente le potentiel de membrane, c'est à dire la différence de potentiel entre l'intérieur et l'extérieur de la cellule, la constante I représente le courant externe, E_K , E_{Na} , E_L représentent les valeurs d'équilibre électrochimique pour chaque ion, obtenues grâce à l'équation de Nernst. Les quantités $\bar{g}_K n^4$, $\bar{g}_{Na} m^3 h$, \bar{g}_L représentent les conductances associées au potassium, au sodium et au courant de fuite, essentiellement constitué d'ions chlorure. Les conductances du potassium et du sodium peuvent varier selon l'ouverture ou la fermeture des canaux. Cela est modélisé par les variables m , h et n . Ce sont des variables portes variant entre 0 et 1. Elles représentent respectivement les variables d'activation et d'inactivation du sodium, et d'activation du potassium. Le taux d'ouverture des canaux sodium dépend de la probabilité d'ouverture des trois composantes de la porte d'activation du sodium (probabilité m^3) de la probabilité de fermeture de la porte d'inactivation (probabilité h). Le taux d'ouverture des canaux potassium dépend de la probabilité d'ouverture des quatre composantes de la porte d'activation du potassium (n^4). Les constantes \bar{g}_K , \bar{g}_{Na} et \bar{g}_L sont les conductances maximales. La constante C est la capacitance. Les fonctions α et β dépendent de V , elles représentent les taux de transferts, des états ouverts vers les états fermés et vice versa. Elles ont été expérimentalement déterminés par Hodgkin et Huxley selon la technique du "Patch-clamp".