



# Guide de modélisation

Version 1.4

©France Caron, 2019

Le présent Guide se veut une carte routière permettant à l'étudiant de se repérer dans l'activité complexe que constitue la pratique du génie par simulation. En formulant les questions typiques que se pose l'expert aux différentes étapes du processus de modélisation-simulation, il cherche à aider l'étudiant à considérer l'ensemble des éléments nécessaires à chaque moment de prise de décision.

Ces questions, mais surtout les éléments de réponse et les stratégies à considérer, gagneront à être précisés selon les enjeux du cours suivi et le niveau de connaissances des étudiants. Ainsi, le Guide peut aussi servir de cadre commun pour expliciter la contribution des différents cours s'inscrivant dans la formation au génie par simulation (GPS) et en faciliter la coordination.

Je remercie les professeurs et les étudiants du programme GPS à Polytechnique Montréal, ainsi que les membres du Bureau d'appui pédagogique, pour les discussions qui ont alimenté la réflexion ayant mené à ce document.

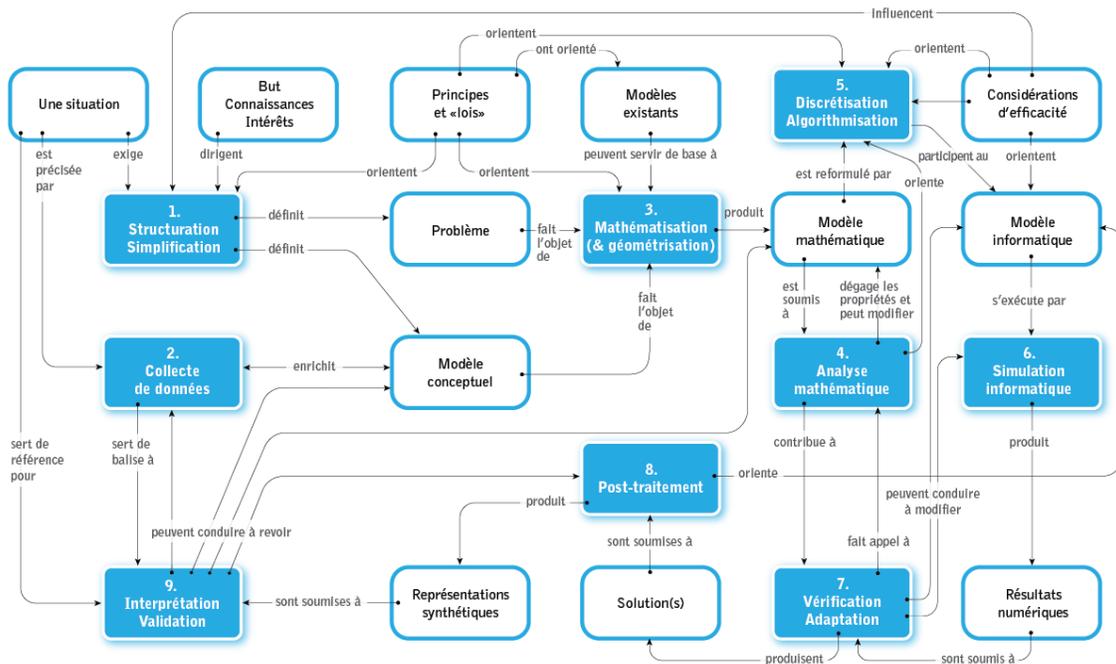
France Caron  
Département de didactique  
Université de Montréal  
Septembre 2019

# Le cycle de modélisation-simulation

La résolution de problèmes complexes en ingénierie passe souvent par une modélisation mathématique de la situation et la simulation du phénomène associé. La simulation permet à la fois de traiter des problèmes qui ne sont résolubles de façon analytique et d'éviter le recours à des expérimentations risquées ou dont le coût serait prohibitif.

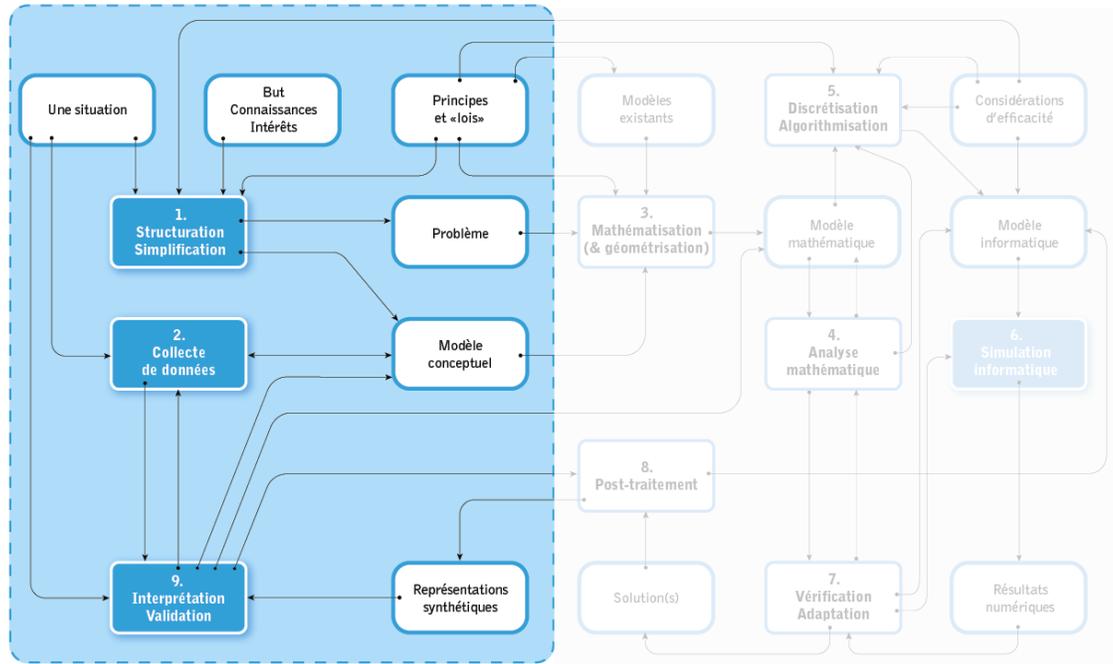
Bien que plusieurs logiciels puissent contribuer à la modélisation et la simulation de différents phénomènes, leur utilisation contrôlée demande une compréhension en profondeur du problème à résoudre, des méthodes numériques utilisées ou utilisables, des hypothèses sur lesquelles les modèles mathématiques reposent, des paramétrisations possibles de logiciel, des choix d'implémentation informatique, etc. Une telle analyse peut aider à utiliser et paramétrer adéquatement un logiciel pour modéliser la situation et simuler le phénomène considéré; dans bien des cas, elle peut aussi conduire à développer des programmes informatiques adaptés, et complémentaires à l'outillage informatique disponible, pour mieux répondre aux besoins spécifiques de la situation considérée.

L'activité de modélisation-simulation est un processus complexe qui est loin d'être linéaire. On la schématise souvent par un diagramme cyclique, dont le niveau de détail peut varier. Pour l'étudiant qui s'intéresse à cet aspect de la pratique du génie, le diagramme suivant, avec ses neuf phases, se révèle suffisamment détaillé pour être aidant dans la prise de décision à chaque étape importante. Une version pleine page est donnée à la fin de ce document.

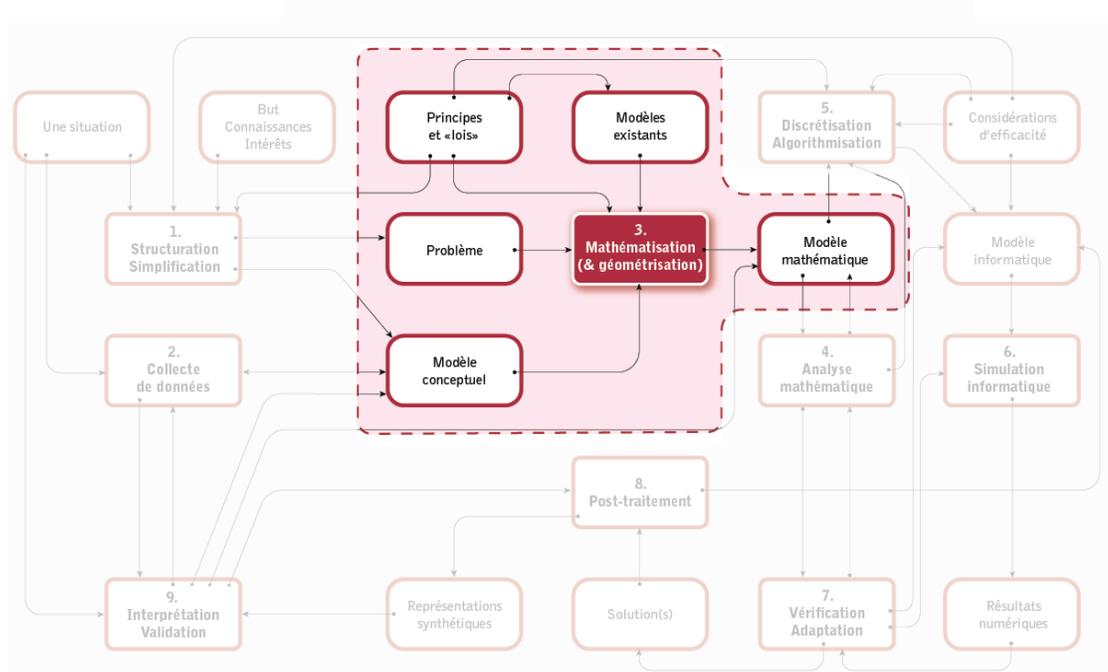


On peut diviser ce vaste chantier en quatre zones distinctes.

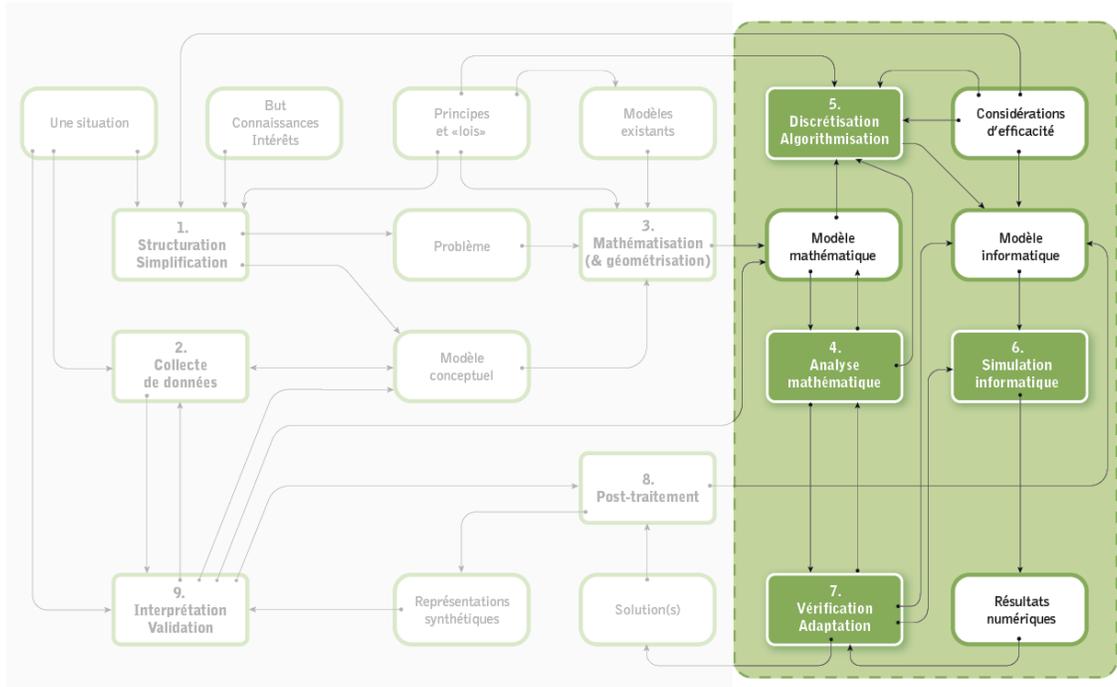
I. La recherche d'adéquation entre la réalité, le modèle et sa solution



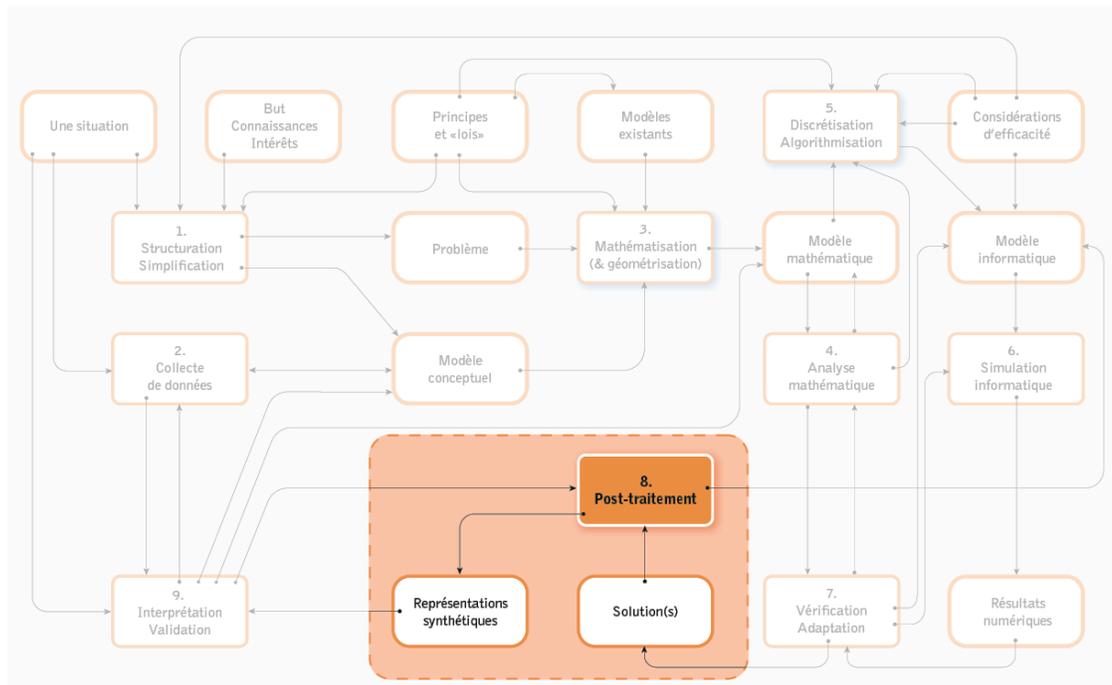
II. La phase de mathématisation



### III. La résolution numérique



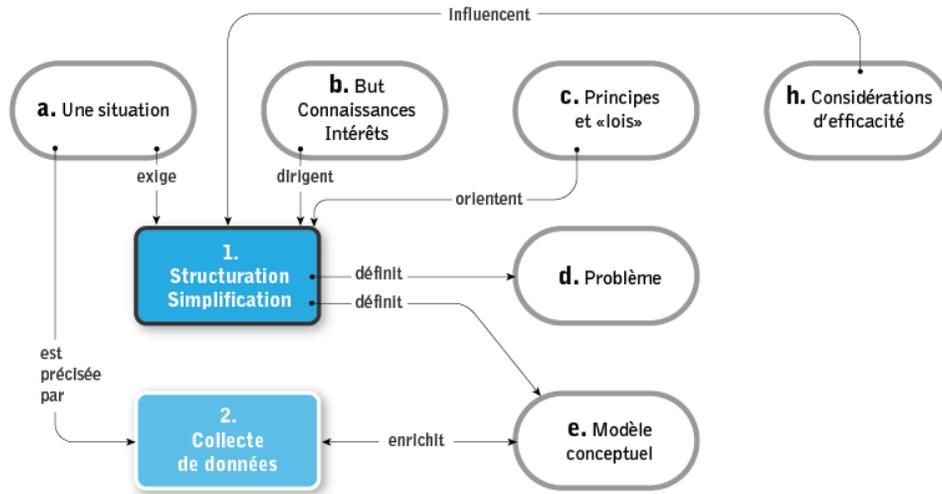
### IV. Le post-traitement



Nous allons à présent zoomer sur les neuf phases typiquement impliquées dans le processus de modélisation-simulation, avec leurs intrants (ressources) et leurs extrants (produits). Il convient de noter qu'un extrant à une étape devient typiquement un intrant à l'étape suivante.

# 1. Structuration et simplification

Extraction de l'essentiel de la situation au regard du but qu'on s'est donné et des éléments qui peuvent y participer ou permettre de juger du progrès. Cet « essentiel » (ou système) est constitué des composantes importantes (physiques ou abstraites) de la situation, avec une ébauche des interactions entre ces composantes et des hypothèses qui permettent d'en simplifier l'étude. La structuration et la simplification conduisent à une représentation de la situation en un « modèle conceptuel », et transforment le but en un problème à résoudre à partir de ce modèle.



## Questions à se poser

**LE DOMAINE :** À quelles échelles de temps et/ou d'espace se situe-t-on? À l'intérieur de quelles conditions, sur quels éléments et dans quelle géométrie (dimensions) choisit-on de limiter la situation à étudier? Peut-on justifier ces choix au regard du but visé? Est-ce réalisable ?

**LE(S) PHÉNOMÈNE(S) :** Quels sont les phénomènes physiques, chimiques ou biologiques à considérer ici? Quelles interactions à l'intérieur du système et avec le milieu qui lui est extérieur devrait-on prendre en compte?

Quelles variables devrait-on considérer? Quels liens peut-on déjà énoncer entre elles de façon qualitative? Quels principes et lois s'appliquent pour les phénomènes en jeu?

**SIMPLIFICATION(S) :** Peut-on s'appuyer partout sur la continuité? Peut-on tirer parti de la symétrie pour réduire le domaine à considérer? Quelles hypothèses peut-on poser? Que pourrait-on supposer constant? Que choisit-on de négliger? Ces choix et ces simplifications sont-ils compatibles avec le but visé et les conditions précisées ci-haut? Devrait-on considérer différents scénarios? Quels en seraient les paramètres, le cas échéant?

## Éléments de réponse

Ex. en régime transitoire ou permanent  
2D ou 3D

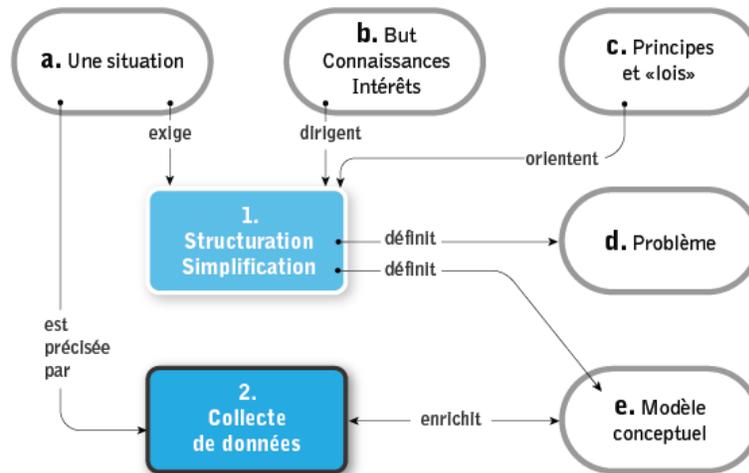
Ex. écoulement laminaire, fluide incompressible, milieu multiphasique avec réaction chimique, ...

Ex. Vitesse, pression, ...  
Ex. Conservation de l'énergie

Ex. configuration axisymétrique

## 2. Collecte de données

Collecte d'informations (numériques, graphiques ou qualitatives) sur les différentes variables d'intérêt et les relations qui les lient, en fonction de certaines conditions du système qu'on pourra lier aux paramètres; dans le cas où ces informations n'existent pas, ne sont pas accessibles ou sont peu fiables et qu'une expérimentation est envisageable, prise de mesures sur la situation ou à l'aide d'un milieu comparable avec le système à étudier.



### Questions à se poser

Dispose-t-on de données sur la situation? Ces données sont-elles fiables?  
 Peut-on les associer aux variables et aux paramètres qui nous intéressent, dans les conditions qui nous intéressent?  
 Pourrait-on/devrait-on générer de nouvelles données par une prise de mesures sur la situation?  
 Ou par des expériences sur un milieu matériel comparable avec le système à étudier? Quels changements d'échelle devrait-on alors considérer?  
 Quels en seraient les impacts?  
 En quoi les données nous permettent-elles (ou nous permettront-elles) de qualifier ou de préciser les relations entre les variables?

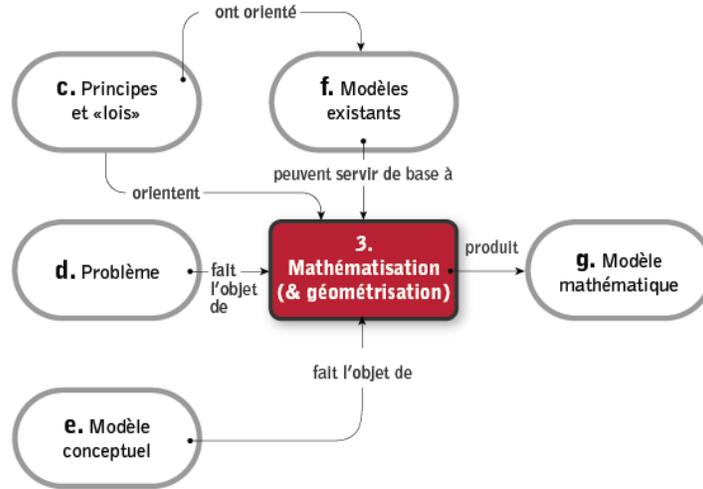
### Éléments de réponse

### Stratégies à considérer

Recherche dans des bases de données  
 Recherche dans la littérature scientifique  
 Mise à contribution de vidéos et de logiciels de traitement d'images  
 Contacts dans des milieux de pratique  
 Conception d'un modèle réduit  
 Définition d'un protocole expérimental

### 3. Mathématisation et géométrisation

Utilisation d'objets mathématiques pour décrire et synthétiser en un modèle mathématique les relations entre les composantes du modèle conceptuel, et formuler mathématiquement le problème à résoudre.



#### Questions à se poser

Quels modèles existent pour formuler mathématiquement un problème semblable (ou connexe)?  
 Sur quels principes et lois s'appuient-ils? Où retrouve-t-on l'application de ces principes et lois au sein des équations?  
 Sur quelles hypothèses reposent ces différents modèles?  
 Ces hypothèses et les variables impliquées sont-elles compatibles avec la situation considérée et le modèle conceptuel qu'on en a dégagé? Peut-on tirer parti des particularités du modèle conceptuel pour simplifier le modèle mathématique?  
 Pourrait-on adapter ou combiner des modèles existants pour mieux refléter les particularités du modèle conceptuel tout en respectant les principes et les lois qui s'appliquent?  
 Comment peut-on décrire mathématiquement la géométrie de la situation considérée?  
 Comment peut-on décrire mathématiquement les conditions aux frontières?

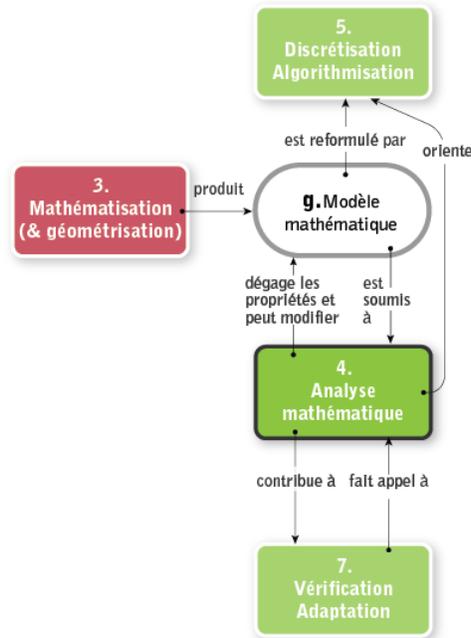
#### Éléments de réponse

Ex. Équations de Navier-Stokes  
 Ex. Conservation de la masse, conservation du mouvement, ...  
 Ex. Fluide newtonien, constance de la viscosité, continuité de...  
 Ex. On considère telle variable constante  
 Ex. Décomposition en objets plus simples, réunion ou différence d'objets, prise en compte de la symétrie

#### Stratégies à considérer

## 4. Analyse mathématique

Étude des propriétés du modèle mathématique (existence ou unicité d'une solution), et de l'algorithme de résolution (ex. potentiel et ordre de convergence). Transformation possible du modèle mathématique en une nouvelle version en tirant parti de ses propriétés et de théorèmes mathématiques.



### Questions à se poser

*Quelles propriétés mathématiques caractérisent (ou devraient caractériser) le modèle et/ou la solution au problème?*

*S'agit-il d'une formulation faible ou forte du problème? Peut-on passer de l'une à l'autre?*

*Dans quel espace fonctionnel se situe-t-on?*

*Quel devrait être l'ordre de convergence de l'algorithme?*

### Éléments de réponse

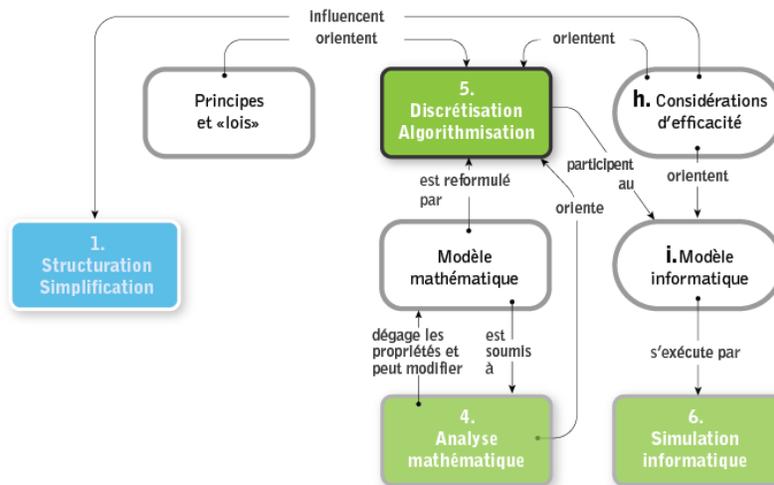
### Stratégies à considérer

*Considération des conditions aux frontières*

## 5. Discrétisation et algorithmisation

**Discrétisation** : Utilisation de méthodes pour transformer un modèle continu en un modèle discret s'appliquant sur un nombre fini de points ou d'éléments. La discrétisation concerne d'abord le domaine de calcul (utilisation de grille, maillage ou réseau), ainsi que les équations, où le recours à des fonctions d'interpolation ou de distribution de probabilité permet de transformer des équations différentielles ou intégrales en un système d'équations algébriques.

**Algorithmisation** : Choix et configuration des méthodes de calcul pour résoudre le système algébrique, en tirant parti des outils et langages informatiques disponibles.



### Questions à se poser

#### ALGORITHMISATION :

Quelle famille de méthodes numériques se révèle particulièrement appropriée pour ce type de problème (ou de modèle) ? En vertu de quelle caractéristique du problème, du modèle ou de ces méthodes ? Le transfert d'information numérique réplique-t-il le déploiement du phénomène physique ?

Dispose-t-on d'outils où ces méthodes ont été implémentées ? Le modèle mathématique utilisé y est-il explicite ? De quelle marge de manœuvre dispose-t-on pour paramétrer ces méthodes ?

Devrait-on envisager un code maison pour tirer parti des particularités du modèle mathématique qu'on a défini ? Ou pour mieux contrôler l'efficacité de la simulation ? Pourrait-on envisager un calcul en parallèle ? Faudrait-il modifier l'algorithme ? Serait-ce rentable au regard de la structure du modèle et de la communication requise ? Faudrait-il restructurer ?

#### DISCRÉTISATION :

Comment devrait-on discrétiser le domaine ? Quelle finesse de maillage ? Quel devrait être le pas de temps ?

Faudrait-il revoir à la baisse la taille du problème ?

Quel devrait être le degré du polynôme d'interpolation pour les variables considérées ? ou

Quelle fonction de distribution de probabilité devrait-on considérer pour la direction des vecteurs-vitesse ?

### Éléments de réponse

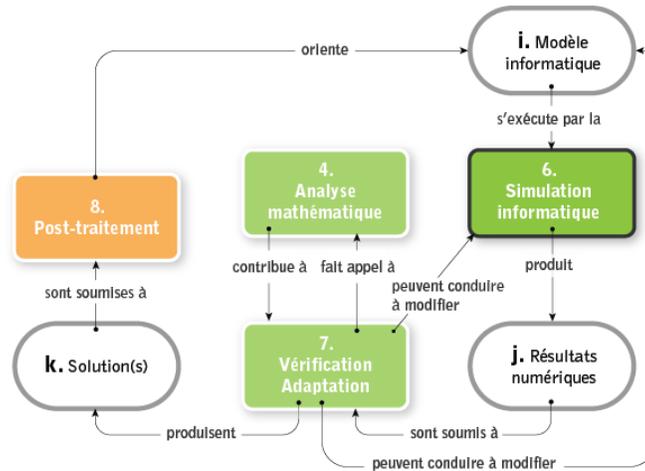
Différences finies, éléments finis, volumes finis, éléments discrets, ...  
Transport, diffusion, ...

Variables globales  
Utilisation des GPU  
Risques de concurrence

Identifier les zones de perturbation, de grande concentration, là où les contraintes varient rapidement.

## 6. Simulation

Reproduction du phénomène à l'intérieur de certaines conditions avec l'instanciation du modèle algébrique pour un choix particulier de paramètres (conditions aux frontières, conditions initiales, propriétés physiques, choix du maillage) et son déploiement dans le temps par la mise en œuvre de l'algorithme de résolution associé.



### Questions à se poser

*Quels scénarios gagnerait-on à considérer ici?  
Quels paramètres conviendrait-il de varier alors?  
À l'intérieur de quels intervalles?*

*Sous quelles formes (structures) souhaite-t-on  
faire produire les résultats numériques (en  
considérant notamment le post-traitement  
envisagé)? Quelles variables souhaite-t-on  
examiner? À quelle fréquence?*

*Comment pourrait-on contrôler la durée des  
simulations ?*

### Éléments de réponse

Ex. Transformée de Fourier rapide

### Stratégies à considérer

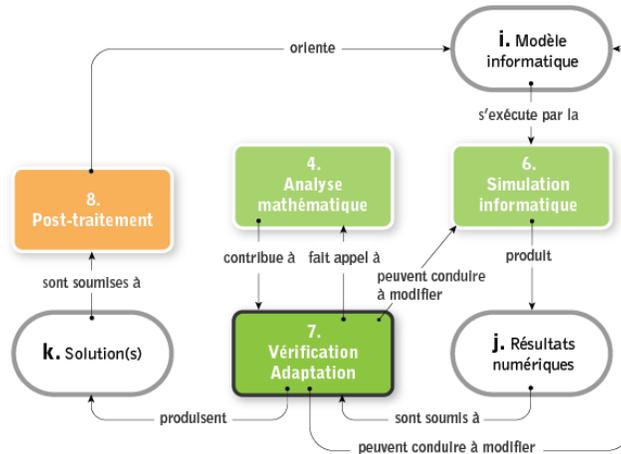
*Inclure un nombre maximal d'itérations dans les critères d'arrêt des différentes boucles pour les premières passations et relaxer progressivement cette contrainte.*

*Générer une suite de simulations qui fasse varier certains paramètres, incluant le pas de temps ou la discrétisation du domaine géométrique, de façon systématique ou même automatique.*

*Choisir des noms éclairants pour les fichiers des différents résultats numériques, qui reflètent le choix des différents paramètres.*

## 7. Vérification

Synthèse des résultats obtenus par simulation et retour au modèle mathématique pour s'assurer que chaque ensemble de résultats correspond bien à une solution des équations, qu'ils vérifient bien les propriétés du modèle, à l'intérieur d'une marge d'erreur numérique qu'on a réussi à contrôler.



### Questions à se poser

*Les équations associées aux principes et aux lois sont-elles vérifiées avec la solution obtenue?*  
*Les conditions aux frontières sont-elles respectées?*  
*Arrive-t-on à contrôler l'erreur avec des stratégies numériques? À combien peut-on chiffrer la marge d'incertitude sur la solution?*  
*Les propriétés du modèle conceptuel se reflètent-elles dans la solution?*

### Éléments de réponse

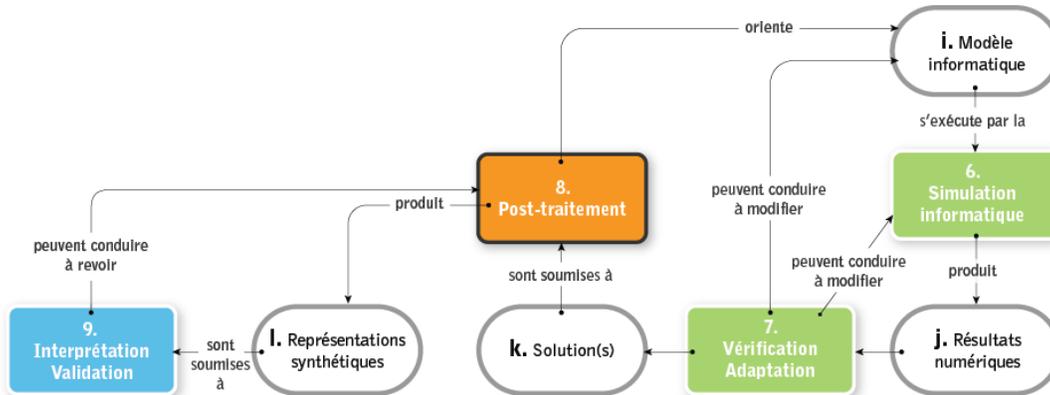
*Ex. Conservation d'énergie, ...*  
*Ex. Vitesse nulle sur la paroi*  
*Ordre de précision d'une méthode numérique*  
*Ex. Symétrie*

### Stratégies à considérer

*Raffinement du maillage, du réseau*  
*Analyse d'erreur et de convergence : ex. extrapolation de Richardson, ...*  
*Comparaison avec des solutions analytiques sur des cas simplifiés*  
*Construction d'une solution manufacturée et comparaison avec les résultats simulés*  
*Changement du système de coordonnées*

## 8. Post-traitement

Génération de représentations synthétiques de la (ou des) solution(s), en mettant l'accent sur les variables les plus significatives, les moments les plus importants, les conditions les plus typiques ou les plus critiques. Cela peut inclure la génération d'un graphique, d'une animation ou la construction d'un indice numérique, composé à partir de différentes variables ou faisant possiblement appel à une intégration sur l'ensemble du domaine et/ou à travers le temps.



### Questions à se poser

Quelle(s) solution(s) souhaite-t-on documenter?  
 Quelles variables souhaite-t-on représenter?  
 Quelle nouvelle variable ou quel indice pourrait-on construire pour résumer la solution et/ou son évolution?  
 Avec quel type de représentation?  
 Sous quelle forme les résultats numériques devraient-ils avoir été produits pour permettre une telle représentation?  
 À quelle fréquence serait-il souhaitable de produire des résultats numériques?  
 Quels sont les moments critiques à représenter?  
 Quelles sont les zones du domaine où les résultats doivent être documentés de façon plus précise?  
 Quels résultats se sont révélés (ou pourraient se révéler) particulièrement éclairants ou étonnants?

### Éléments de réponse

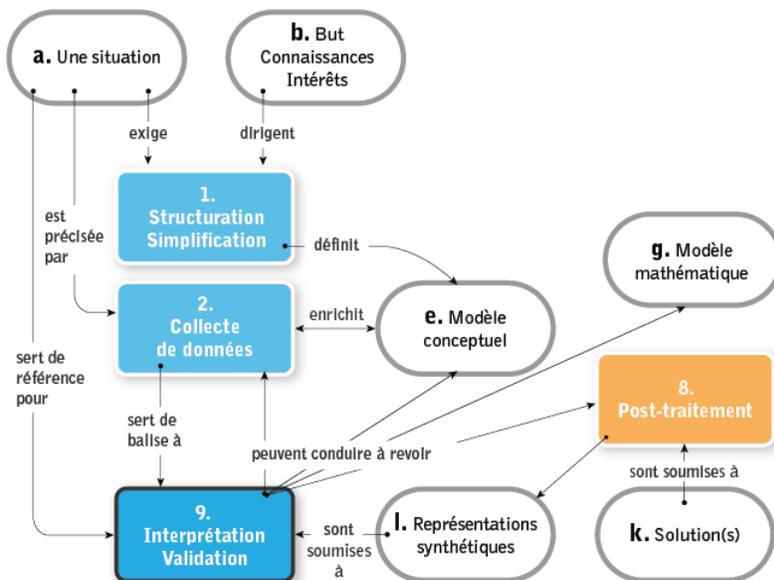
Ex. Champ de pression à l'équilibre  
 Ex. Isothermes  
 Ex. Flux de chaleur total à une paroi,  
 Force agissant sur un objet (coefficient de traînée, coefficient de portance)  
 Ex. Numérique, graphique (image ou animation d'un champ de vecteurs ou d'une variable scalaire avec code de couleur)

### Stratégies à considérer

Écrire des scripts automatiques pour appliquer de façon efficace le même post-traitement à des solutions obtenues avec des intrants différents.

## 9. Interprétation – validation

Retour à la situation de départ pour interpréter la solution obtenue et s'assurer qu'elle est cohérente avec la situation et les données qu'on a déjà ou qu'on pourrait vouloir obtenir.



### Questions à se poser

Les conditions aux frontières sont-elles compatibles avec la situation?  
 La continuité est-elle conforme à ce qui est attendu?  
 Peut-on produire des résultats conformes aux données qu'on avait? Dans un même ordre de grandeur? Les instruments de collecte des données étaient-ils fiables?  
 Peut-on envisager une nouvelle expérience avec une nouvelle prise de données?  
 La marge d'incertitude produite pour la solution est-elle acceptable pour la situation? Et dans les zones les plus à risque?  
 A-t-on sur-simplifié la situation? En a-t-on bien pris en compte tous les paramètres et variables à considérer?  
 Quels nouveaux liens peut-on dégager entre les variables? Quelles implications peut-on tirer des résultats et de la solution au regard de la situation et du but visé?

### Éléments de réponse

Ex. Examen des isothermes et de leur angle d'entrée à la paroi, ...

### Stratégies à considérer

Redondance dans les dispositifs de prise de mesures afin de permettre leur validation entre elles, avant de chercher à valider la simulation avec ces mesures.  
 Étude ciblée des zones de perturbation maximale où l'écart entre les valeurs expérimentales et simulées risque d'être le plus élevé (ne pas se contenter de moyennes sur le domaine pour étudier l'erreur de modélisation).

## Définition des intrants et extrants aux différentes phases

a. **Situation** : La *situation* est une portion du monde réel (actuel, futur ou passé) dont on peut décrire le contexte et auquel peut être associé un certain phénomène (observé ou anticipé). Elle peut être unique ou appartenir à une classe de situations semblables qui ont peut-être déjà été modélisées ou qui pourraient bénéficier de ce travail de modélisation. Pour mieux comprendre une situation, on peut chercher à répondre aux questions suivantes :

- Qu'est-ce qui caractérise cette situation ? Où se manifeste-t-elle ? Dans quel contexte ou dans quelles circonstances ?
- De quelles autres situations se rapproche-t-elle ? Qu'est-ce qui la distingue de situations semblables ?
- Pourquoi cette situation paraît-elle importante à considérer ? Son importance a-t-elle évolué dans le temps ? Est-elle appelée à le faire ? Si oui, pourquoi ? De quelles données dispose-t-on déjà ?
- Où (ou auprès de qui) pourrait-on avoir plus d'informations ?

b. **But, connaissances et intérêts**: Ces éléments expliquent pourquoi on s'intéresse à cette situation, ce qu'on cherche à faire et comment on pense aborder le travail. Ils sont typiquement le produit d'une négociation entre le modélisateur, souvent plus près de la théorie, et son « client », souvent plus près de la réalité de la situation. Ils peuvent renvoyer autant aux aspects théoriques qu'aux aspects pratiques de la situation. On peut les cerner à l'aide des questions suivantes :

- Qu'est-ce qui nous interpelle dans la situation ? Pourquoi souhaite-t-on en construire un modèle et le simuler ?
- Cherche-t-on à évaluer, à prédire, ou à comprendre ? À améliorer, à optimiser, à contrôler, à identifier, à généraliser, à développer ? Et quoi au juste ?
- Que connaît-on sur cette question ? Que dit la littérature sur la question ou sur des questions connexes ?

c. **Principes et lois**: Ce sont les propriétés partagées par différentes instances de la matière en fonction de certaines caractéristiques générales et de la situation dans laquelle elle se trouve. Elles traitent de relations entre différentes grandeurs, d'interactions entre objets, et s'expriment souvent par la mise en évidence d'un invariant en situation de changement (ex. conservation de l'énergie).

d. **Problème** : Reformulation du but qu'on s'était donné au départ, en fonction des variables et des paramètres qu'on a choisi d'examiner, des conditions à l'intérieur desquelles on a choisi de limiter la situation considérée et des hypothèses sur lesquelles on a choisi de s'appuyer.

e. **Modèle conceptuel** : Représentation du système considéré, de façon graphique (schéma, figure, ...) et/ou verbale, où les éléments essentiels (composantes) de la situation sont bien mis en évidence avec leurs interactions entre eux et avec la partie du monde qui leur est extérieure. Le modèle conceptuel peut inclure un milieu matériel (ex. modèle réduit) censé représenter la situation, au regard de certaines des variables considérées, mais ce milieu matériel ne s'intègre

au modèle que dans la mesure où l'on explicite les composantes et les relations qui lient ce milieu à la situation de départ, incluant les changements d'échelle.

f. **Modèles existants** : Modèles déjà validés pour des situations semblables ou connexes, qu'on peut vouloir utiliser, adapter, et/ou combiner.

g. **Modèle mathématique** : Représentation en langage mathématique du modèle conceptuel, typiquement à l'aide d'équations, en distinguant bien objets, variables et paramètres.

h. **Considérations d'efficacité** : Prise en compte des exigences en mémoire et en temps des algorithmes considérés, des outils disponibles et volonté d'optimiser l'utilisation des ressources (ex. avec le parallélisme) dans l'explicitation du modèle informatique (programme) et la mise en œuvre des simulations.

i. **Modèle informatique** : Résultat de la transposition de l'algorithme et de la géométrie du problème en code exécutable compatible avec les différents scénarios qu'on voudra tester, la structuration des informations, des traitements prévus, et du flux d'information entre les entités logicielles. Celles-ci peuvent inclure des logiciels commerciaux, des logiciels libres et/ou du code maison.

j. **Résultats numériques** : Ensemble des valeurs calculées pour les différentes variables du modèle mathématique et pour toute la durée du temps simulé, en fonction de la méthode numérique implémentée et des différents scénarios considérés (durée de la simulation, conditions initiales et aux frontières).

k. **Solution** : Ensemble des valeurs des variables qui vérifient, à l'intérieur d'une marge d'erreur qu'on devrait idéalement quantifier, les équations du modèle mathématique, pour un scénario jugé pertinent (durée de la simulation, conditions initiales et aux frontières).

l. **Représentations synthétiques** : Représentations de la (ou des) solution(s), en mettant l'accent sur les variables les plus significatives, les moments les plus importants, les conditions les plus typiques ou les plus critiques. Cela peut inclure le graphique d'une variable globale en fonction du temps, la représentation selon un code couleur d'une variable scalaire sur différents plans de la géométrie du système, la représentation d'un champ de vecteurs, le tracé de lignes de courant, le déplacement de particules ou de tourbillons, une animation de ces représentations en fonction du temps, etc. Cela peut aussi inclure un indice numérique composite, construit à partir de différentes variables ou faisant possiblement appel à une intégration sur une partie ou l'ensemble du domaine et/ou à travers le temps.

## Références :

Garon, A (2016) Notes du cours MEC3230. Polytechnique Montréal.

Vidal, D. (2017) Notes du cours GCH 2535. Polytechnique Montréal.

Blais, B. (2016) Présentation du cours GCH 6935. Polytechnique Montréal.

Caron, F. (2018) Modelling Mathematical Modelling. *Proceedings of the 2017 Annual Meeting of the Canadian Mathematics Education Study Group*, 137-144.

Caron, F., & Garon, A. (2013). Tackling the challenges of computational mathematics education of engineers. In *Educational Interfaces between Mathematics and Industry* (pp. 365-374). Springer, Cham.

Dancea, I. (1994) *Simulations et modèles*. Montréal : Guérin Universitaire.

Oberkampf, W. L., Trucano, T. G., & Hirsch, C. (2004). Verification, validation, and predictive capability in computational engineering and physics. *Applied Mechanics Reviews*, 57(5), 345-384.

Pelletier, D. (2010). Verification, validation, and uncertainty in Computational Fluids Dynamics. *Canadian Journal of Civil Engineering*, 37(7), 1003-1013.

Roache, P. J. (1998). *Verification and validation in computational science and engineering*. Albuquerque: Hermosa Publishers.

Thacker, B. H., Doebeling, S. W., Hemez, F. M., Anderson, M. C., Pepin, J. E., & Rodriguez, E. A. (2004). *Concepts of model verification and validation* (No. LA--14167). Los Alamos National Lab.

Varenne, F. (2007) *Du modèle à la simulation informatique*. Paris : Vrin.

