ISSN 0339 - 7521

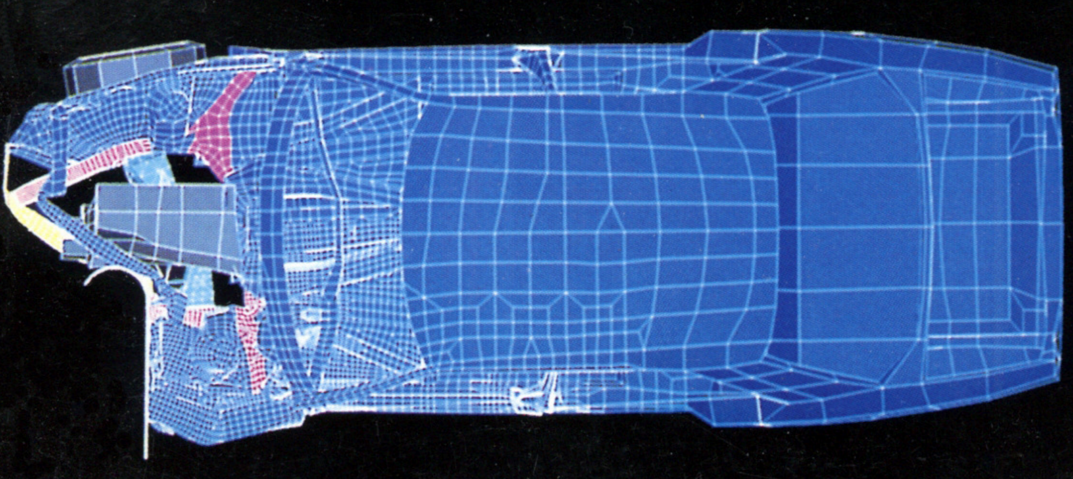
Revue du Palais de la

Découverte

Mensuel Vol.24 N°235 février 1996 - 20F

Le Monitorat d'initiation à l'enseignement supérieur au Palais de la découverte

- **Introduction aux expériences numériques**
- **Sources de France**
- **La pharmacocinétique de l'aspirine**



INTRODUCTION AUX EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES

par Emmanuel DORMY
« AMIES « au département Mathématiques du Palais de la découverte

Les expériences numériques diffèrent de la plupart des expériences proposées au visiteur du Palais de la découverte, en ceci qu'elles ne présentent pas la réalité physique, mais ne font que tenter de la reproduire grâce aux calculs de puissants ordinateurs. On parle d'ailleurs à leur sujet de *simulations numériques*.

La simulation numérique évite des expériences coûteuses, ou en remplace d'impossibles, elle « reproduit la réalité » en résolvant à l'aide d'ordinateurs les équations obtenues à partir des lois physiques.

Avec l'essor grandissant des ordinateurs, la simulation numérique a pris une place importante, tant dans le monde de l'industrie, que dans de nombreuses branches de la recherche scientifique. On la rencontre même dans la vie de tous les jours ; ainsi les prévisions météorologiques que vous consultez sont le résultat d'énormes calculs numériques.

Comment ça marche ? A quoi ça sert ? Quels sont les avantages de ces approches nouvelles par rapport aux expériences traditionnelles ? Quelles en sont les limites ? Nous allons essayer d'apporter un début de réponse à ces questions, et de montrer quels sont les problèmes auxquels se heurtent les chercheurs actuellement dans ce domaine.

Mais commençons par un cas pratique...

Déformation d'une membrane élastique

Etudions le comportement d'une membrane élastique soumise à une déformation. Pour analyser un tel phénomène, l'approche classique passe par la réalisation d'une maquette, puis de « manips » où l'on déforme celle-ci à l'aide d'une baguette (fig.1).

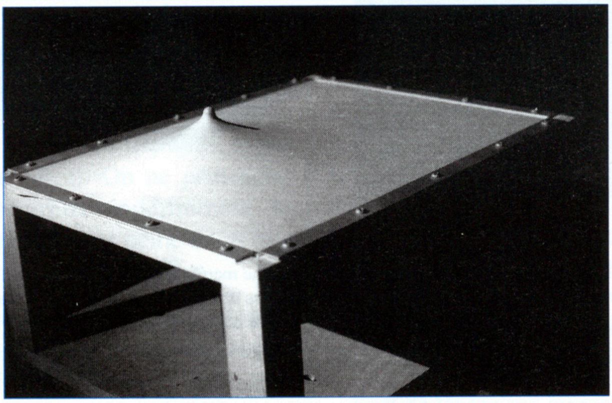


Fig.1.- Déformation d'une membrane élastique.

Pour réaliser une simulation numérique de ce phénomène, il faut surmonter quelques difficultés. Notre objectif est de connaître sans réaliser de « manip » la forme que va prendre la membrane. Or cette membrane est bien sûr constituée d'une infinité de points. Pour calculer numériquement avec un ordinateur la position de cette infinité de points, il faudrait un temps infini et une mémoire infinie... Il faut donc ramener le problème à un nombre fini d'incon-

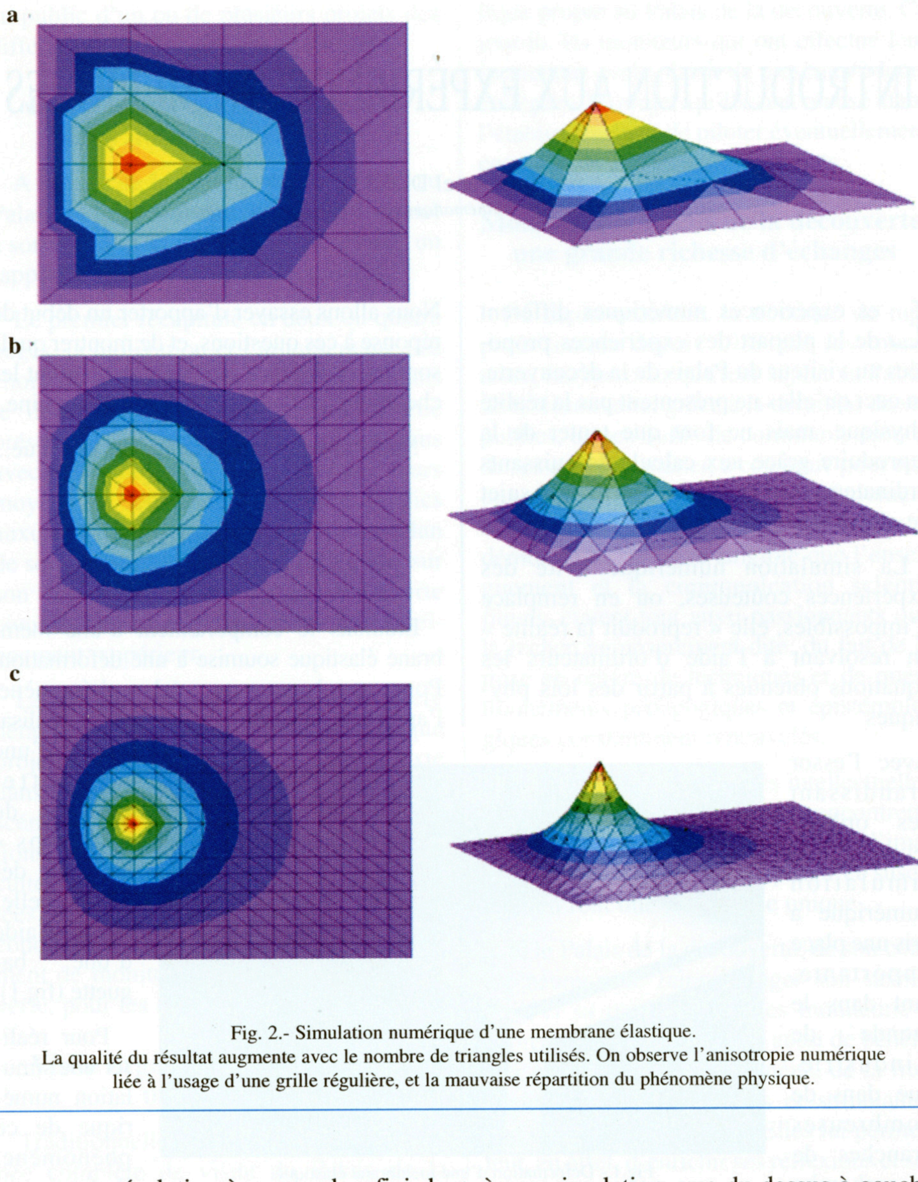


Fig. 2.- Simulation numérique d'une membrane élastique.
La qualité du résultat augmente avec le nombre de triangles utilisés. On observe l'anisotropie numérique liée à l'usage d'une grille régulière, et la mauvaise répartition du phénomène physique.

nues et sa résolution à un nombre fini de calculs. En fait on va chercher une approximation de la position en un certain nombre de points. On va regrouper ces points en triangles, et supposer que la solution varie linéairement sur chaque triangle(1)*.

Un exemple de résolution est donné figure 2. Chaque ligne (a, b, c) correspond à une simulation, vue du dessus à gauche et en perspective à droite. Du haut en bas, le nombre de triangles augmente à chaque simulation. On constate évidemment que la qualité de la solution augmente avec le nombre de triangles.

On peut cependant faire quelques remarques importantes. La première est que, en contrepartie de cette amélioration du résultat, l'augmentation du nombre de

(*) Les notes se trouvent p. 41

Enfin, si l'on augmente encore le nombre de triangles (dernière ligne), on obtient un résultat très proche de la réalité physique, et on ne distingue presque plus les triangles utilisés pour le calcul (leurs contours ont été volontairement supprimés sur cette image).

La modélisation

Avant toute simulation numérique, il est nécessaire de bien comprendre le phénomène que l'on étudie et de l'exprimer clairement en termes mathématiques, c'est la modélisation du problème. Cette étape consiste principalement à définir les variables dont dépend le problème étudié et à établir des équations, c'est-à-dire des relations liant ces grandeurs les unes aux autres. Cela est loin d'être facile ; par exemple, pour la membrane de tout-à-l'heure, quels paramètres prendrait-on ?
- Sa forme ?
- Ses dimensions ? (deux ou trois ?)
- Ses caractéristiques élastiques ?
- Sa couleur ?
- L'inclinaison du plan de travail par rapport à l'horizontale ?
- …

Le choix de ces variables repose souvent sur des hypothèses physiques. Certaines variables n'ont clairement rien à voir avec notre problème, d'autres paraissent essentielles, mais nombreuses sont celles dont l'importance paraît faible... a-t-on le droit de les oublier pour autant ? Que peut-on négliger ? Le choix des paramètres, c'est-à-dire des variables, est difficile, il faut bien voir qu'il repose sur des hypothèses, dont parfois seul le calcul permet de confirmer la validité. Un modèle doit donc être utilisé dans la limite des hypothèses qui ont servi à son élaboration.

Une fois les variables définies, des considérations physiques permettent d'établir une ou plusieurs équations les liant. Comme nous allons le voir, ces équations ont pour solution une fonction (par exemple la fonction décrivant la forme de la membrane), et font partie de la famille des équations différentielles aux dérivées partielles. De nombreux phénomènes physiques, en mécanique des solides, en mécanique des fluides, en thermodynamique, en électromagnétisme,... sont régis par de telles équations.

Les équations aux dérivées partielles

Rappels d'analyse fonctionnelle

Si la membrane était infiniment grande, on sent qu'assez loin de la baguette, elle serait parfaitement plate. En se rapprochant de la baguette, une pente apparaîtrait, pente qui augmenterait au fur et à mesure qu'on s'en approche. Ce que nous donne l'analyse physique du problème, c'est la façon dont cette pente varie. C'est là l'équation de notre membrane. Il faut noter que la pente n'est elle-même que la variation de la hauteur ; et finalement, tout le problème va être, connaissant ces variations, d'en déduire la hauteur en chaque point.

Ce problème — passer des variations d'une grandeur à la grandeur elle-même — est somme toute assez courant. Ainsi, on le rencontre en démographie ; lorsque l'on cherche, connaissant les taux de natalité et de mortalité à extrapoler la population dans cinquante ans. On le trouve encore lorsque, connaissant les variations instantanées d'un titre boursier, on veut en déduire son cours.

Pour la compréhension de ce qui va suivre, nous allons rappeler ici cette notion de dérivée. Le lecteur averti pourra sauter la lecture de cette partie pour passer directement au paragraphe *L'énigme du sphinx,* p. 32.

Pour trouver la position de la membrane, nous allons avoir à résoudre des équations. Dans beaucoup de cas, ce qui nous intéresse (par exemple la forme de notre membrane) ne peut être représenté par un seul nombre, mais par une fonction (c'est-à-dire tout un ensemble de valeurs). Contrairement aux équations que l'on ren-

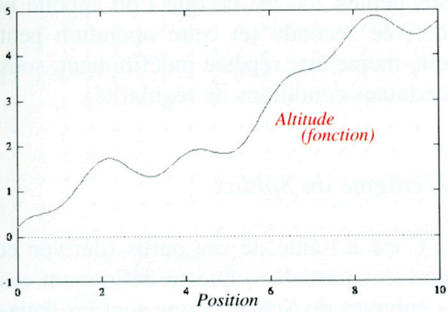


Fig. 4.- La connaissance de l'altitude en chaque point permet de définir de façon unique la forme de ce chemin.

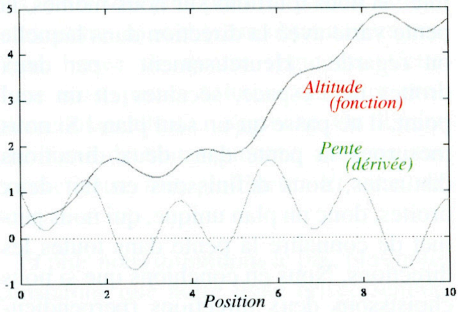


Fig. 5.- La connaissance de la pente en chaque point permet également de définir de façon unique la forme du chemin (pour peu que l'on ait un point de départ).

contre au lycée, dont les inconnues sont des nombres, les inconnues de nos équations seront donc des fonctions.

Imaginez que nous nous promenons sur un chemin à travers champs et collines, notre chemin va toujours tout droit, mais il monte et descend au gré des collines. Comment pourrait-on décrire l'allure de ce chemin ?

La première idée qui vient à l'esprit est de donner à chaque endroit l'altitude à laquelle on se trouve, c'est la notion de fonction. Quelqu'un disposant de cette information peut parfaitement se représenter notre chemin, il peut même le dessiner (fig.4).

Peut-on, comme pour la démographie ou la bourse, définir le chemin par ses variations ? Supposons que nous connaissions en chaque endroit la pente du chemin (c'est-à-dire la façon dont le chemin monte ou descend). Cela ne suffirait-il pas ?

Pour pouvoir utiliser cette notion de variation, il faut d'abord nous mettre d'accord sur une convention pour mesurer la pente. Le plus courant dans la vie de tous les jours est de mesurer une pente en pour cent (0 % pour l'horizontale, 14 % pour une route difficile en montagne) ou en degrés d'angles (0 degrés pour l'horizontale, 90° pour la verticale). La convention adoptée par les mathématiciens peut se définir par : « De combien de pas dois-je monter pour pouvoir avancer d'un pas vers l'avant ? »[2] (ce qui revient à prendre la tangente trigonométrique de l'angle). La pente ainsi définie est nulle pour l'horizontale et infinie pour la verticale. La pente est positive lorsque le chemin monte, négative quand il descend.

Essayons à présent de reconstruire la fonction à partir de l'ensemble de ses pentes. Partons d'un point et avançons en suivant ces informations. Nous pouvons bien dessiner le chemin[3]. Cette idée est explicitée sur la figure 5. Remarquons enfin que la connaissance de l'ensemble des pentes constitue, elle aussi, une fonction : on l'appelle la dérivée.

Voici donc un cas simple, nous savons à présent ce qu'est la dérivée d'une fonction (l'ensemble des pentes en chaque point).

Continuons donc d'avancer sur notre chemin... Voici que tout à coup, on ne sait pourquoi, le chemin vient à disparaître, nous pouvons alors continuer tout droit ou bien changer de direction, en fait nous sommes libres ! Fort bien, mais nous voulons à présent définir le lieu où nous nous trouvons...

Nous pouvons comme tout à l'heure définir en chaque point l'altitude, mais qu'en est-il de notre dérivée, autrement dit de la pente en chaque point. Horreur et stupéfaction ! La pente dépend de la direction. Plaçons-nous en un point de la colline : si nous tournons sur nous-mêmes, la pente varie avec la direction dans laquelle on regarde... Heureusement : par deux droites de l'espace, sécantes en un seul point, il ne passe qu'un seul plan ! Si nous mesurons la pente dans deux directions distinctes, nous définissons en fait deux droites, donc un plan unique, qui nous permet de connaître la pente dans toutes les directions. Nous en concluons que si nous choisissons deux directions (perpendiculaires par exemple), et que nous donnons en chaque point la pente dans chacune de ces deux directions, nous aurons parfaitement défini notre colline(4)... Par exemple, si l'on connaît en un point la pente vers le nord et celle vers l'est, on peut en déduire, en les combinant, la pente dans n'importe quelle direction.

Le point important est donc que, pour caractériser cette infinité de pentes, il suffit de donner la pente selon deux directions distinctes.

Nous avons alors comme pour le chemin deux façons de définir l'endroit où nous sommes, soit de donner en chaque point notre altitude, soit de donner en chaque point les pentes dans les deux directions choisies. Pour le chemin (espace à une dimension) l'ensemble des pentes était unique et s'appellait dérivée, pour la colline (espace à deux dimensions) on parle pour chacune des deux directions de dérivée partielle (puisque chacune prise, indépendamment, ne fournit qu'une information partielle sur la pente).

Il faut cependant ajouter que ces notions peuvent se compliquer à loisir : par exemple, de la même façon que l'on est passé du chemin à la colline, on peut continuer à augmenter la dimension de l'espace, indéfiniment...(le lecteur intéressé par cette notion la trouvera développée dans le livre de Ian Stewart *Dieu joue-t-il aux dés ?* Chapitre 5). Ou encore, puisque la dérivée est elle-même une fonction, pourquoi ne pas la définir non par ses valeurs, mais par ses propres variations, ses pentes ? C'est ce que l'on appelle la dérivée seconde (et cette opération peut elle-même être répétée indéfiniment, sous certaines conditions de régularité).

L'énigme du Sphinx

C'est à l'aide de ces outils (dérivée et dérivées partielles) que se définissent ces « énigmes du Sphinx » que sont les équations aux dérivées partielles. Ce n'est pas un hasard, ni un phénomène surnaturel, si les équations de la physique utilisent ces notions de dérivées (de pente locale) ; en effet, la physique regorge de notions qui sont les dérivées les unes des autres. Ainsi l'accélération d'une voiture n'est en fait que la dérivée de sa vitesse (plus elle accélère, plus sa vitesse augmente « vite », c'est-à-dire plus la pente de la vitesse par rapport au temps est grande), et la vitesse elle même n'est autre que la dérivée de la position...

Passons à un exemple de ces énigmes : *« Quelle est la fonction dont la dérivée vaut zéro partout ? »*. Cela signifie que la pente est partout nulle, c'est-à-dire qu'en chaque point, on ne monte ni ne descend lorsque l'on avance. La réponse à cette énigme est donc la droite horizontale.(5)

A peine plus compliqué *« Quelle est la fonction dont la dérivée vaut 1 partout ? »* En suivant le même raisonnement, lorsque j'avance d'un pas je monte d'un pas, il s'agit donc d'une droite inclinée à 45 degrés avec l'horizontale.

« Quelle est la fonction dont la pente est partout égale à la fonction elle-même ? » Les choses sérieuses commencent...

Une première approche, qui est assez classique en mathématiques, est de se ramener au problème précédent. Supposons que la fonction soit nulle... On se ramène alors à la première énigme que nous avons regardée. La fonction horizontale qui vaut zéro partout est bien de pente nulle, et elle est donc solution de notre problème...

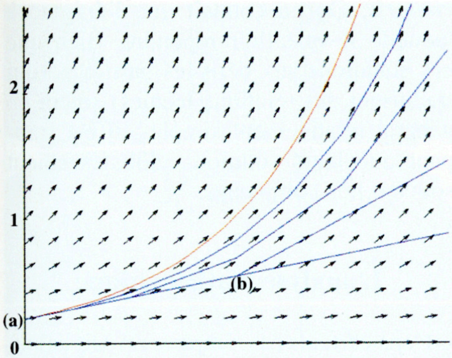


Fig. 6.- Construction de l'exponentielle.

Oui, mais si on part d'un point non nul, peut-on quand même construire une fonction qui satisfasse notre énigme ?

Essayons d'en dessiner une ! Nous allons procéder de manière approchée pour avoir une idée de la solution (fig. 6).

On peut représenter sur le plan des flèches qui indiquent la pente que doit avoir la solution pour satisfaire l'énigme. Celle-ci dépend bien sûr de l'altitude. Le problème est donc de trouver une trajectoire qui passe par (a), qui soit partout tangente aux flèches.

Donnons-nous un point non nul (a) ; si nous comprenons les termes de l'énigme, la valeur en ce point nous donne également la pente de la fonction en ce point. La droite passant par (a) et dont la pente est ainsi définie constitue donc une approximation grossière de la solution. Si nous nous arrêtons en un point (b) de cette droite, nous sommes obligés de constater que nous ne satisfaisons pas aux termes de l'énigme.

Si nous étions bien en un point de la solution, notre pente devrait être plus grande, puisque nous sommes plus haut. Nous avançons donc avec ce nouveau cap, donné par la valeur en (b). On obtient alors une ligne brisée de deux segments, qui est sans doute plus proche de la solution que la droite initiale.

Pour obtenir une meilleure approximation, on peut répeter l'opération avec un pas, deux fois plus petit (le pas est la distance entre (a) et (b)), on obtient alors une ligne brisée de quatre segments. Cette ligne n'est pas la solution de notre problème, mais elle s'en approche. On obtient une ligne de huit segments, avec un pas encore deux fois plus petit. Et ainsi de suite...

Et plus nous diminuons le pas, plus nous constatons que notre ligne brisée semble se rapprocher d'une courbe. On obtient une approximation toujours plus fine de la solution, que ceux qui la connaissent peuvent identifier comme une croissance exponentielle[(6)].

Cette méthode est due à Leonhard Euler[(7)]. Nous n'avons pas réellement résolu l'équation, mais nous connaissons une allure approchée de sa solution. On constate, comme pour la membrane, que plus il y a de points, plus la solution est « bonne ».

Quel est l'intérêt que l'on peut bien trouver à ces énigmes ? Il dépasse le plaisir des mathématiques pures.

Sir Isaac Newton a observé que « la vitesse de refroidissement d'un corps quelconque dans l'air est proportionnelle à la différence entre la température de ce corps et l'air ambiant ».

Si nous plongeons un corps dans de l'air à zéro degré, l'équation devient : « la vitesse de refroidissement d'un corps quelconque dans de l'air à zéro degré est proportionnelle à la température de ce corps ». Donc si nous cherchons à connaître l'évolution de la température au cours du temps, nous voyons que l'équation à résoudre est *grosso modo* la même que celle qui nous intéresse actuellement. Une version simplifiée de l'équation d'évolution de la température de ce corps peut s'exprimer ainsi : « *Quelle est la fonction dont la pente est partout opposée à la fonction elle-même ?* ». Si nous appliquons la même méthode que précédemment pour résoudre cette équation nous obtenons une solution,

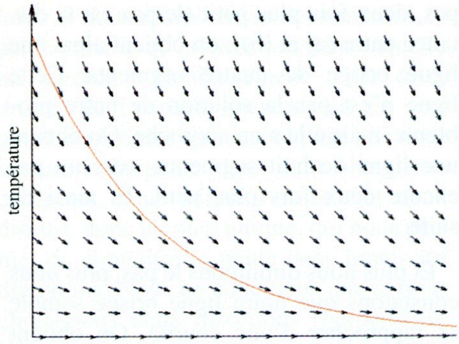


Fig. 7.- Évolution de la température d'un corps plongé dans un milieu plus froid que lui.

c'est-à-dire une relation entre la température et le temps, dont l'allure est la symétrique de l'exponentielle (fig. 7).

C'est-à-dire que plus la différence de température est grande entre le corps et l'air, plus le corps va se refroidir vite.

On remarque au passage que ces énigmes mettent souvent en cause des variations tant spatiales (variations en espace) que temporelles (évolution en temps), le temps n'étant en mathématiques qu'une dimension (un paramètre) possible.

Si je vous demandais enfin *« Quelle est la fonction de deux variables (c'est-à-dire la colline de tout à l'heure) dont la dérivée seconde*[8] *(la dérivée de la dérivée) dans une direction, ajoutée à la dérivée seconde dans l'autre, est nulle ? »*, vous me laisseriez sans doute là avec mes questions tordues, et vous auriez bien raison !

C'est pourtant là l'équation de notre membrane. On comprend donc l'intérêt de traiter le problème à l'aide d'une machine !

Je voudrais insister ici sur un point important, et combattre une idée reçue trop courante : *mettre le problème en équation, ce n'est pas le résoudre. C'est le formaliser.* En d'autres termes *ce n'est pas parce qu'on connaît l'équation d'un phénomène que ce phénomène est connu et compris*. On ne connaît que l'énigme à laquelle il va falloir répondre. Bien que ces équations aux dérivées partielles (qui traduisent des relations locales) soient en général relativement simples, il est frappant que leurs solutions globales soient souvent très complexes.

L'analyse mathématique

Dans certains cas simples, on sait calculer analytiquement les solutions exactes de ces équations (c'est-à-dire résoudre « à la main » avec les outils de l'analyse), mais les calculs sont en général bien trop longs pour un cas réaliste ; et surtout, dans beaucoup de cas, on ne sait pas le faire, il faut alors utiliser des approximations numériques.

L'étude théorique des modèles mathématiques se ramène alors à deux questions fondamentales. Existe-t-il une solution au problème, et si oui cette solution est-elle unique ? Si le problème n'a pas de solution, il est inutile de perdre son temps à chercher à en construire une. S'il en possède plusieurs, il faudra se donner des conditions supplémentaires de façon à en sélectionner une seule, celle qui nous intéresse.

Si l'équation admet plusieurs solutions cela peut être dû au fait que l'on a oublié d'y inclure une partie des contraintes du problème physique, mais cela peut aussi être dû à l'existence effective de plusieurs solutions physiques. Ceci est très facile à comprendre sur l'exemple du « flambage de la poutre ». Si nous prenons une baguette et que nous appuyons sur ses deux extrémités dans la direction de son axe que se passe-t-il ?

Jusqu'à une certaine force il ne se passe rien. Puis si nous continuons à appuyer de plus en plus fort, d'un seul coup la baguette se courbe soit vers le haut, soit vers le bas ; on dit qu'elle « flambe » (fig.8).

En fait, lorsque la force appliquée augmente, la solution rectiligne (où la

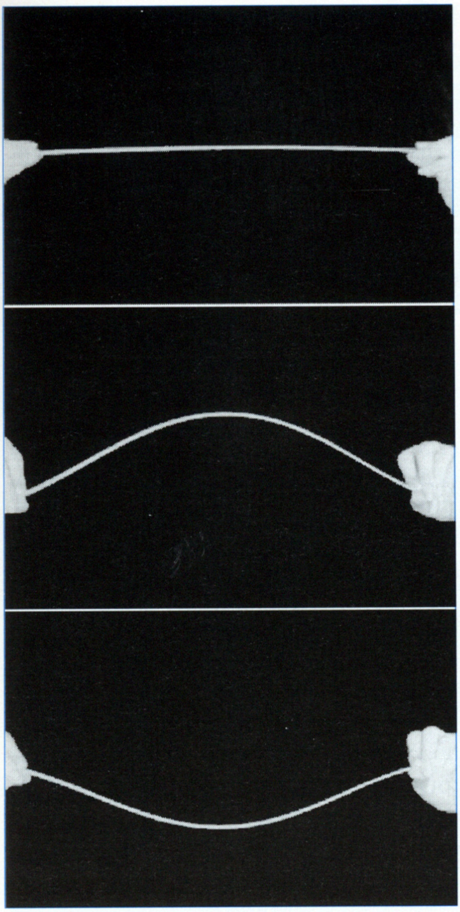


Fig. 8 - Une poutre encastrée soumise à compression, peut « flamber » vers le haut ou vers le bas.

baguette est droite) devient instable (à la manière d'une pièce de monnaie posée sur la tranche). C'est-à-dire que la baguette peut rester dans cette position, mais la moindre perturbation la fera « flamber » dans un sens ou dans l'autre. Ce passage d'un état avec une solution stable vers un état avec deux solutions stables et une solution instable, s'appelle une bifurcation.

Pour une force assez grande, ce problème admet donc, en plus de l'équilibre instable, deux solutions possibles d'équilibre stable. Une vers le haut, l'autre vers le bas... Voici donc un phénomène physique dont on peut attendre que la résolution de son équation admette plusieurs solutions.

Au problème d'existence et d'unicité de la solution s'ajoute celui de savoir si la solution varie continûment en fonction des données (les données regroupent l'ensemble des conditions initiales : forme, forces exercées... et les éventuelles variations en temps de ces grandeurs). Si l'on modifie à peine les données du problème, la solution va-t-elle changer peu ou beaucoup ? Dans le cas où l'équation est « gentille » sa solution variera continûment en fonction des données (c'est le cas de la membrane : si l'on augmente à peine la taille des bâtonnets, la membrane monte à peine plus haut), mais il y a des problèmes, dits *mal conditionnés* ou *mal posés*, où une petite différence dans les paramètres induit un comportement totalement différent de la solution (c'est le cas des phénomènes dits « chaotiques »). Dans ces cas, même si l'on connaît l'existence et l'unicité de la solution, la moindre erreur commise au cours du calcul a une répercussion considérable sur la solution...

Un problème mathématique est dit *bien posé* au sens d'Hadamard(9), s'il répond favorablement aux trois questions que nous venons d'aborder, c'est-à-dire s'il admet une solution, qui est unique, et dépendant continûment des données.

L'approximation numérique

Ici commence l'« à-peu-près »...

Quand on ne sait pas résoudre le problème analytiquement, comme on l'a fait pour la membrane, il faut passer du problème continu à un problème approché, qui n'est défini que sur un nombre fini de points. On parle alors de problème discret. On peut résoudre numériquement un tel problème. De très nombreuses méthodes existent pour formuler le problème discret.

Elles sont techniques et trop ardues pour être présentées dans le cadre de cet article[10]. Néanmoins, l'idée de base est voisine de celle que nous avons utilisée pour dessiner l'exponentielle de tout à l'heure. On sent bien, en effet, qu'une telle démarche, qui consiste à prendre la valeur locale de la dérivée comme une approximation pour tout un intervalle est assez systématique (on pourraît presque dire bête) pour être facilement programmable. On retrouve d'ailleurs l'observation faite au début sur notre modèle de membrane : plus les intervalles sont petits, moins cette approximation est grossière.

Différentes approches permettent de passer d'une équation aux dérivées partielles à un problème numérique. Chacune a ses avantages et ses domaines d'application privilégiés. Pour qu'une méthode soit acceptable, il faut que lorsque l'on augmente le nombre de points de calcul, l'équation discrète se rapproche de plus en plus de l'équation aux dérivées partielles que l'on cherche à simuler, jusqu'à lui être identique pour un nombre de points infini. Une telle approximation est dite *consistante*. Bien sûr, on ne peut pas étudier numériquement cette propriété, puisque, comme on l'a dit, il est impossible d'utiliser une infinité de points dans un programme. C'est donc analytiquement (à la main) que cette propriété est étudiée.

Evidemment, bien que la résolution du problème discret ait le mérite de nécessiter un nombre fini de calculs, ce nombre est grand, très grand. La résolution numérique des équations discrètes est en général très lourde. Elle nécessite en pratique l'usage des ordinateurs, et même dans certains cas de ce que l'on appelle les « super-ordinateurs », tant le volume de calculs est impressionnant !

Et pourtant, au début du siècle, alors qu'il ne disposait pas d'ordinateurs, un précurseur de ces méthodes, le météorologue anglais Lewis Richardson, a envisagé d'utiliser des centaines de calculateurs humains pour effectuer les calculs numériques nécessaires à la prévision du temps.

Reste qu'en pratique, de nos jours, l'essor des ordinateurs a ôté à tout le monde l'idée de faire ces calculs à la main. L'utilisation de l'ordinateur est donc incontournable, dans la plupart des cas, mais elle soulève un nouveau problème : celui de la précision des calculs.

Les ordinateurs n'aiment pas l'infini... Vous connaissez sûrement le nombre π, illustre représentant de ces nombres que l'on appelle « réels ». Si vous regardez π (vous pouvez au moins en regarder le début sur les murs de la salle du Palais qui porte son nom) vous constatez qu'il a une infinité de décimales (une infinité de nombres après la virgule). Une infinité... Notre ordinateur a déjà la migraine ! La façon dont on note ce nombre en mémoire est très simple, on écrit un certain nombre de chiffres, et quand il n'y a plus la place on arrête[11]. Ce qu'on mémorise n'est donc qu'une approximation de π et chaque fois que l'on fera un calcul, le même type d'amputation lui sera appliqué. L'erreur qui en découle s'appelle *erreur d'arrondi*[12].

La résolution des équations aux dérivées partielles, qu'elles fassent ou non intervenir le temps, conduit à des calculs itératifs. La machine effectue un grand nombre d'opérations élémentaires (+, -, *, /) lors de la résolution, les erreurs d'arrondis de calculs peuvent s'accumuler et s'amplifier. Et, parce qu'on a négligé au cours du calcul des choses insignifiantes, le résultat peut devenir aberrant.

Un autre type d'erreur est encore plus important, il s'agit de l'*erreur de troncature*, c'est-à-dire l'erreur qui résulte de l'approximation de l'équation initiale par un problème discret. On l'a vu, si l'approximation utilisée est consistante, cette erreur tend vers zéro quand le nombre de points tend vers l'infini. Mais lors d'une simulation numérique avec un nombre fini de triangles cette erreur est non nulle (et

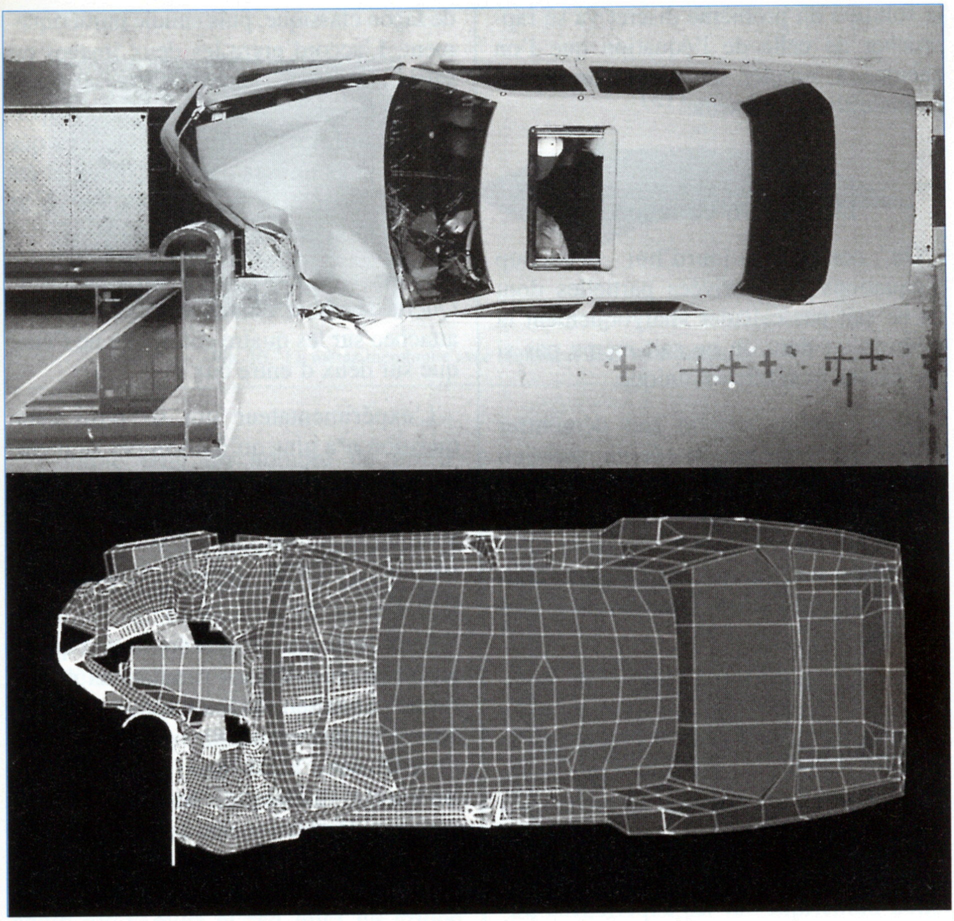


Fig. 9.- Test de collision à 55 km/h, et simulation numérique.

en général plus importante que les erreurs d'arrondis). Le même problème se pose alors : ces erreurs vont-elles être amplifiées ou non par le processus de calcul ?

Il faut noter que ces approximations deviennent redoutables si le problème est mal posé ; par exemple, si le phénomène observé est chaotique, la moindre erreur mène alors à un résultat faux. La difficulté est alors double, en effet nos calculs sont imprécis et n'ont donc que peu de sens, mais même s'ils étaient assez précis, il serait impossible de contrôler assez finement les paramètres d'une expérience physique pour qu'elle corresponde exactement aux simulations (ce qui complique la validation des expériences numériques dans ce cas).

Un processus de calcul est dit *stable* si les erreurs d'arrondis et de troncature ne s'amplifient pas au fur et à mesure que les calculs progressent. Cette propriété peut s'étudier numériquement (si le processus est instable la solution devient vite aberrante et très grande), ou bien analytiquement, comme la consistance.

Si toute ces conditions sont remplies et que le problème est bien posé alors la méthode est *convergente*, c'est-à-dire que la solution du problème discret va se rapprocher de celle de l'équation que l'on cherche à simuler quand le nombre de points utilisés augmente[13].

Discussion-conclusion

On connaît aujourd'hui beaucoup d'équations aux dérivées partielles dont on ne sait pas calculer analytiquement la solution, et dont on ne sait même pas si elle existe, et si elle est unique.

Dans certains cas on sait démontrer l'existence et l'unicité de la solution (c'est par exemple le cas de la membrane, si elle est assez régulière). Dans d'autres cas, on ne sait encore rien dire de la solution théorique, ce qui rend l'interprétation des simulations numériques très difficile.

Tout ceci constitue le thème de nombreuses recherches mathématiques actuelles en analyse (P.-L. Lions a reçu la médaille Fields en 1994 pour ses travaux dans ce domaine), ainsi qu'en techniques numériques.

L'un des avantages notoires de la simulation numérique sur les expériences traditionnelles est la différence de coût. Les simulations numériques (on parle parfois en aéro ou hydrodynamique de soufflerie numérique) coûtent en général beaucoup moins cher que les essais correspondants (moteurs de voitures, ailes d'avions, coques de bateau...), ceci bien que les programmes coûtent cher, ainsi que l'usage des super-calculateurs. Mais, dans beaucoup de domaines, elles sont devenues complémentaires des essais sans pour autant les remplacer (on peut se référer à Les défis aérodynamiques des avions de combat par J.-D. Marion dans la *Revue du Palais de la Découverte*, vol. 23, n° 222).

L'efficacité des simulations numériques est souvent spectaculaire. On peut voir figure 9 un test de collision sur une voiture lancée à 55 km/h, ce test est réalisé d'abord de façon classique, puis simulé numériquement. L'accord entre les deux images est saisissant. Cette simulation a nécessité plus de trois heures de calculs sur un superordinateur CRAY Y-MP. On peut noter que les éléments utilisés pour le calcul ont été adaptés pour être plus denses là où la déformation est importante.

Mais revenons à notre membrane. Quelle serait sa forme si, au lieu d'être attachée sur les quatre côtés, elle ne l'était que sur deux d'entre eux ?

L'expérimentateur qui se pose cette question n'a plus qu'à découper sa membrane, ou à construire une autre maquette ; alors qu'un programme de simulation numérique ne demande bien souvent qu'une petite modification (fig. 10).

Sans doute encore plus important que le problème du coût, les simulations numériques permettent de lire toutes les valeurs des différents paramètres sans perturber l'expérience. Dans une expérience en laboratoire classique, pour mesurer la variation de pression due au passage d'une onde, on utilise une sonde, qui va perturber l'onde, et donc les mesures que l'on pourra en faire par la suite. Lors d'une simulation numérique on a un accès direct aux valeurs sans perturber le phénomène observé. On peut également modifier à loisir les paramètres et essayer différentes possibilités mêmes non physiquement réalisables pour observer « ce qui se passerait si... »

Outre la compréhension de phénomènes physiques par une étude fine de leur comportement, l'un des attraits majeurs des simulations numériques est de permettre à moindres frais de réaliser plusieurs fois de suite la même expérience en faisant varier l'un ou l'autre de ces paramètres et d'en observer l'effet.

On peut par exemple observer l'amélioration aérodynamique apportée par la variation de la forme d'une aile d'avion.

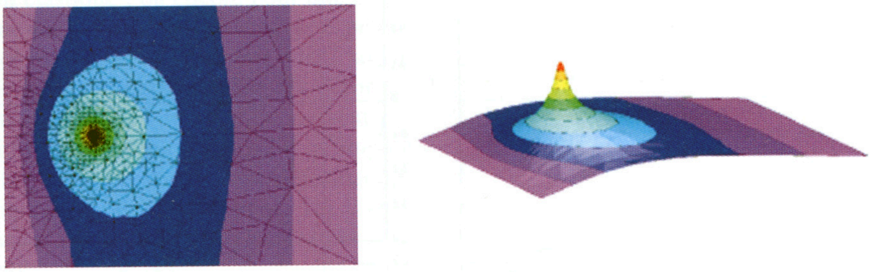


Fig. 10.- La même membrane avec seulement deux bords attachés.

Compte tenu du nombre de profils d'ailes possibles on imagine le travail que demanderait la construction de maquettes pour l'essai systématique de toutes les possibilités. Même numériquement, il est énorme, d'où la nécessité d'envisager une approche scientifique du problème. C'est l'optimisation de forme (science assez récente, environ 1950), dont l'objet est de déterminer comment modifier des paramètres contrôlant un modèle pour en obtenir une caractéristique optimale.

Il faut cependant se garder de certains pièges : la simulation numérique doit intervenir en complément des expériences traditionnelles (qui servent de validation). Il faut rester conscient que l'on ne manipule que des approximations, ce qui pose le problème de l'adéquation avec le monde réel. Comme on l'a dit précédemment, un modèle repose en fait sur une série d'hypothèses, et n'est valable que tant que ces hypothèses le sont.

Ainsi, l'on peut très bien simuler numériquement le flambage de la poutre, dont nous avons déja parlé. La figure 11 représente les simulations correspondantes aux photographies de la figure 8. Le modèle numérique y apparaît comme tout-à-fait valable.

Mais, si l'on augmente la force exercée et que l'on s'intéresse aux deux solutions

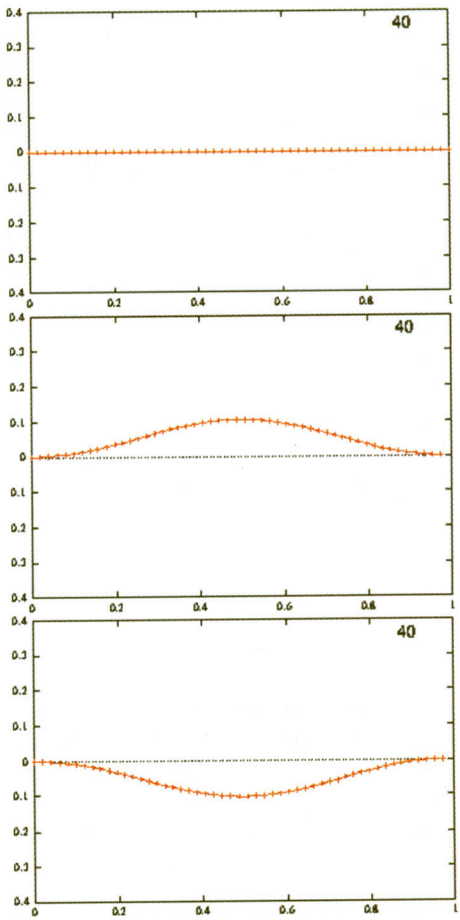


Fig. 11.- Simulation d'une poutre encastrée qui « flambe ». En haut, la solution rectiligne, qui devient instable ; en dessous, les deux autres solutions stables. On représente ici par des croix les 50 points de calculs. Ces croix sont supprimées sur les figures suivantes pour mettre en évidence la qualité de l'approximation.

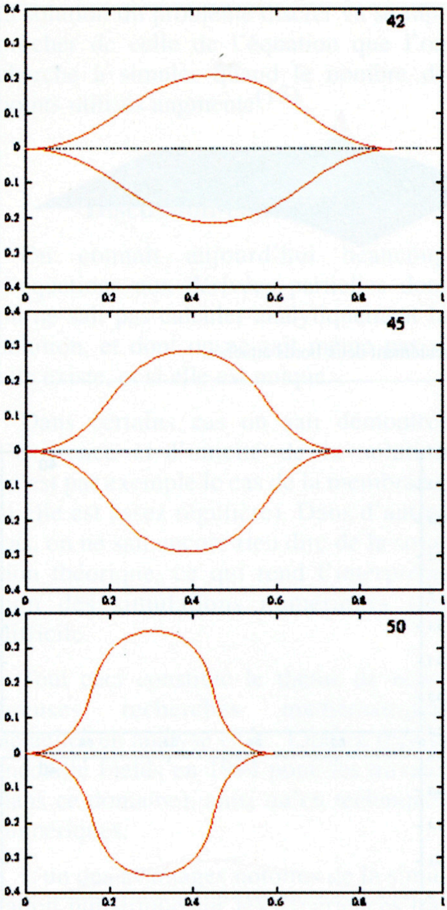


Fig. 12.- Même modèle, en augmentant la force exercée. On représente à présent sur la même image les deux solutions stables.

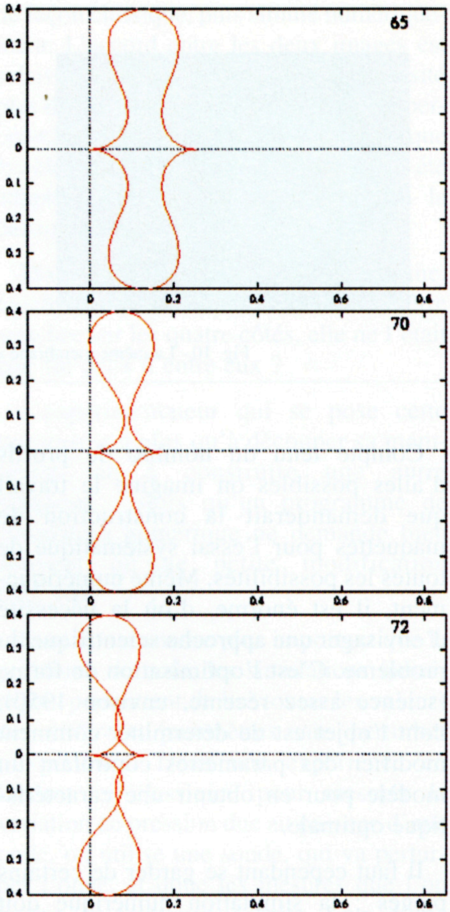


Fig. 13.- Si l'on augmente encore la force exercée, on sort clairement des limites du modèle, qui ne correspond plus alors à la réalité physique. En particulier, sur la dernière image, la poutre « immatérielle » s'auto-intersecte !

stables, on s'aperçoit vite que le modèle numérique continue à flamber, là où une vraie poutre se serait sans doute cassée (fig. 12). Et, en exagérant vraiment, on finit même par obtenir une poutre qui s'auto-intersecte (fig. 13) !

Cela met bien en évidence la notion de domaine de validité d'un modèle, et souligne les dangers d'une trop grande confiance en un résultat purement numérique.

E.D.

Note aux lecteurs attentifs

Avec un peu d'attention, on constate que la simulation de la membrane (fig. 3) ne reproduit pas précisément la position de la membrane réelle (fig.1). Il ne s'agit pas là d'une erreur de programmation, mais d'un problème que nous avons déjà évoqué au cours de cet article : la limite de validité des modèles.

L'équation que les physiciens utilisent pour la membrane, et que nous avons utilisée pour cette simulation numérique est valable pour une membrane idéale, infiniment élastique ; ou encore pour une membrane réelle mais dans le cas de « petites déformations ». Pour qu'elles soient visibles sur la photographie, les déformations que nous avons imposé ne sont pas petites. Le déplacement localisé qu'impose la baguette provoque des déformations importantes de la membrane. En conséquence, le modèle n'est localement plus valable, et la membrane s'écarte de la position théorique prédite par le modèle.

Remerciements

L'auteur tient à remercier Claude Basdevant, Jean Brette, Vincent Courtillot, et Albert Tarantola pour leur aide précieuse lors de la préparation comme de la relecture de ce manuscrit.

Les simulations d'accident de voiture (fig. 9) ont étés réalisées par Thomas Frank et Karl Gruber de Mercedes-Benz AG sur ordinateurs CRAY. Extrait de « Numerical simulation of frontal impact and frontal offset collisions », *Gray Channels*, Winter 1992.

Les simulations de la membrane ont étés réalisées à l'aide d'un court programme écrit par l'auteur, utilisant la librairie PLTMG, de Randolph E. Bank.

Les simulations de flambage de poutre ont été réalisées avec un programme écrit par Elisabeth Pichelin et l'auteur ; les résultats en ont été visualisés grâce au logiciel Gnuplot de Colin Kelley et Thomas Williams.

Notes

(1) Trois points dans l'espace définissent un plan unique. On approchera sur chaque triangle la solution par le plan défini par ses trois sommets.

(2) Si la fonction peut être considérée comme affine à l'échelle des pas, cette définition est bien indépendante de la taille des pas.

(3) Il faut néanmoins connaître l'altitude du point de départ ; on dit que le chemin est connu « à une constante près ».

(4) Évidemment à une constante près.

(5) Ou plutôt une droite horizontale définie à une constante près. Par la suite nous oublierons cette subtilité pour simplifier l'exposé.

(6) C'est d'ailleurs par cette propriété que l'on définit mathématiquement la fonction exponentielle. Le mot de croissance exponentielle a aussi un sens commun (moins précis) par exemple lorsque l'on parle de la démographie, ou de l'inflation... Il caractérise alors simplement une croissance qui s'accélère.

(7) Leonhard Euler, né à Bâle (1707-1783), à partagé l'essentiel de son activité entre Berlin et Saint-Pétersbourg.

(8) Au sens de la dérivée partielle.

(9) Jacques Hadamard, Mathématicien français (1865-1963).

(10) Pour mémoire, celle utilisée lors des simulations de la membrane, s'appelle la méthode des éléments finis.

(11) En fait le système utilisé, appelé notation à virgule flottante, est celui que l'on décrit avec une amélioration faisant que si un nombre est « tout petit » il ne soit pas pour autant compté comme nul : on ne note les décimales qu'à partir du moment où elles deviennent non nulles (mantisse), et on note aussi bien sûr la position de la virgule (exposant).

(12) On peut observer aisément l'impact de ces erreurs d'arrondis sur une calculette. Bien que cela dépende des modèles. Il est courant qu'en prenant dix fois de suite la racine carrée de 70, puis en élevant le résultat dix fois au carré, on n'obtienne que 69,999997.

(13) Théorème de Lax : *Pour un problème linéaire, et bien posé, la consistance et la stabilité sont nécessaires et suffisantes pour assurer la convergence.*