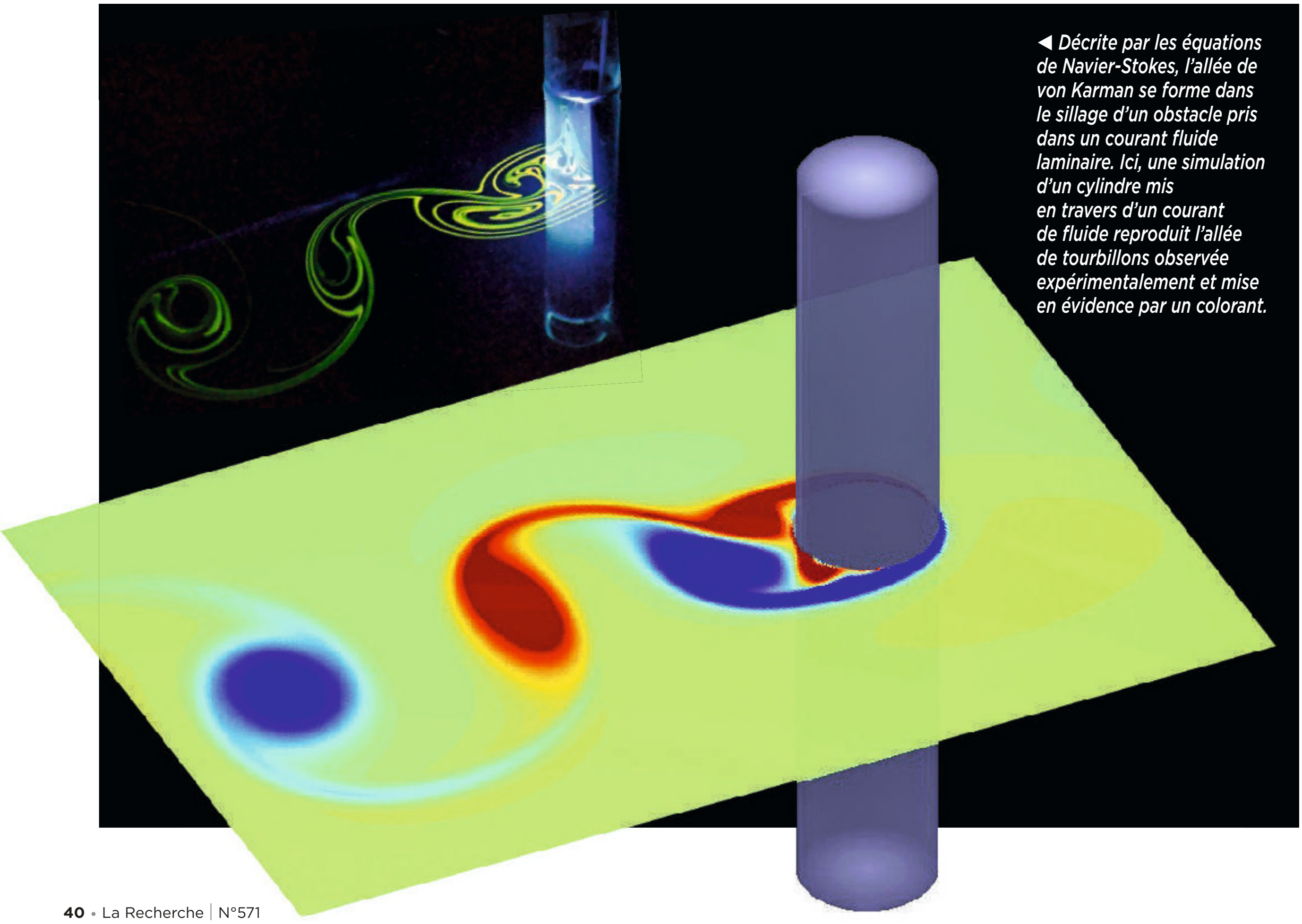
Simulations numériques : entre théorie et monde réel

Quand l'expérience fait défaut ou lorsque les équations ne peuvent pas être résolues analytiquement, chercheurs et ingénieurs ont recours à un substitut du réel : les simulations numériques. D'une efficacité incomparable – portée par les capacités de calcul d'ordinateurs de plus en plus puissants –, ces simulations sont un élément essentiel de la recherche scientifique dans de très nombreux domaines. Mais elles ont également leurs limites, dont il faut être conscient.



◀ *Décrite par les équations de Navier-Stokes, l'allée de von Karman se forme dans le sillage d'un obstacle pris dans un courant fluide laminaire. Ici, une simulation d'un cylindre mis en travers d'un courant de fluide reproduit l'allée de tourbillons observée expérimentalement et mise en évidence par un colorant.*

EMMANUEL DORMY / J. SOMMER, E. OTT ET T. TEL

Emmanuel Dormy
MATHÉMATICIEN, ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE, PARIS
Directeur de recherche CNRS, il travaille au département de mathématiques et applications à l'École normale supérieure (ENS-PSL).

Conception de voitures, d'avions, de fusées ; prévisions météorologiques ou climatiques ; recherche fondamentale allant de la structure de la matière à celle de l'Univers : la simulation numérique occupe une place essentielle dans notre société. En recherche, elle est devenue un complément indissociable de l'approche expérimentale et de la théorie. Elle permet en effet une large variation des conditions d'une expérience souvent difficile, voire impossible, à réaliser en laboratoire (comme une expérience en impesanteur, qui nécessite un vol parabolique ou l'usage de la Station spatiale internationale). Elle permet aussi des mesures globales ne perturbant pas l'expérience – par exemple, une mesure de la vitesse en tout point d'un écoulement. Ces expériences « virtuelles », si elles ne remplacent pas les expériences de laboratoire, les complètent déjà dans presque toutes les branches de la physique.

Le point de départ de toute simulation numérique est le même : un modèle mathématique. Pour construire celui-ci, il est nécessaire de formuler des hypothèses sur les mécanismes fondamentaux que l'on cherche à reproduire. Ceux-ci peuvent être exprimés sous la forme d'une ou de plusieurs équations mathématiques décrivant le comportement du système étudié. Il s'agit souvent de lois de conservation – la conservation de la quantité de mouvement et celle de la masse mènent, par exemple, aux équations de Navier-Stokes, qui modélisent les écoulements fluides.

DR

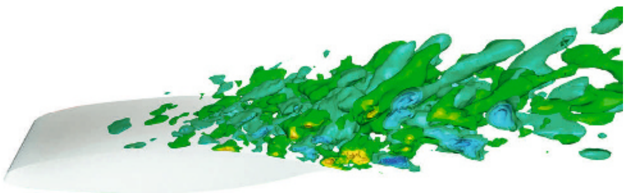
Les modèles mathématiques sont par essence simplificateurs : ce sont des modèles ! Par exemple, ils ne reproduisent pas des effets trop rapides ou de petite amplitude. Pour simuler un écoulement d'air autour d'une balle de tennis, on négligera généralement les ondes sonores. À grande échelle, comme celle d'une galaxie, on ne prendra pas en compte les effets de dissipation. Quant aux lois de la physique sur lesquelles s'appuient les modèles, elles sont souvent issues elles-mêmes de l'expérience et de la théorie, donc perfectibles. Ainsi, même d'un point de vue mathématique, le modèle ne cherche pas à être exact, mais plutôt à rendre compte, aussi précisément que possible, de certains phénomènes.

UN RÉALISME PARFOIS ÉPOUSTOUFLANT

La puissance des modèles mathématiques et leur capacité à expliciter des phénomènes extrêmement complexes sont néanmoins fascinantes, presque inquiétantes ! Ils ont d'ailleurs leur existence propre et font l'objet d'études mathématiques poussées afin d'en connaître les propriétés (existence d'une solution, unicité et régularité de celle-ci en fonction des paramètres et des conditions initiales). Les équations dites « aux dérivées partielles », auxquelles ils font appel, ne reflètent que des équilibres locaux (comme des bilans de forces sur de petits volumes élémentaires). Pourtant, leur intégration numérique permet d'obtenir des images d'un réalisme époustouflant, allant de la dynamique des tourbillons dans l'atmosphère ou l'océan à la formation des galaxies et des grandes structures de l'Univers ! Ces solutions sont souvent elles-mêmes compliquées,

Contes et légendes du numérique

Un peu à l'image des légendes urbaines, des « légendes numériques » se sont installées et circulent à propos des simulations numériques. Cette mythologie est dommageable, car elle biaise le sens critique. Selon l'une de ces légendes, on serait à présent capable d'effectuer des prédictions météorologiques avec une précision aussi grande que souhaité sur une région donnée. Selon une autre, on serait capable de concevoir des avions uniquement sur la base de simulations numériques, sans aucun essai en soufflerie… Dans les deux cas, ce sont, au mieux, des exagérations. La raison: la présence de processus à toute petite échelle qui ne peuvent être résolus de manière exacte dans une simulation de grande échelle (dite globale). Les effets de ces petites échelles sont pris en compte de manière ad hoc (on parle de paramétrisation). Il peut s'agir de la condensation de petites gouttelettes d'eau à l'origine de la formation des nuages, qui sont fortement dépendantes de la concentration en aérosols et qui s'accompagnent de dégagement de chaleur latente modifiant l'écoulement fluide. Il peut aussi s'agir de tourbillons de toute petite échelle, bien en dessous de ce qui peut être résolu dans un modèle global, et pour lesquels une paramétrisation sous forme de modèles de turbulence doit être utilisée. Dans le cas des prévisions météorologiques, plusieurs simulations numériques sont réalisées à l'aide de grands centres de calcul. Ce sont des prévisionnistes, connaissant les spécificités des simulations (leurs points forts et leurs points faibles en fonction des conditions météorologiques), qui réalisent les prévisions. Lorsqu'un ouragan menace les côtes américaines, le North American Model employé pour la prévision du temps aux États-Unis, utilisant des cellules dont la taille varie de 12 à 3 km, ne permet en général de rendre compte de son intensité qu'à un facteur 2 près! Il faut donc utiliser d'autres modèles dédiés aux ouragans. Pour la conception d'avions, ce sont les essais en soufflerie qui permettent d'ajuster les modèles de turbulence en fonction du profil étudié. La simulation numérique est utilisée pour optimiser le profil, autour d'un profil donné déjà testé en soufflerie. E. D.



▲ *Pour concevoir des avions, les simulations (ici, celle de tourbillons d'air sur une aile) doivent être complétées par des essais en soufflerie.*

en raison de la non-linéarité des lois qui gouvernent les équilibres locaux – c'est le cas en particulier pour les écoulements fluides, modélisés par les équations de Navier-Stokes.

Dans certains cas, toutefois, les modèles mathématiques, s'ils permettent de rendre compte de la réalité des phénomènes observés, ne préservent pas toutes les propriétés du phénomène physique que l'on cherche à modéliser. Un exemple frappant est celui de la conduction de la chaleur, introduite par Joseph Fourier au début du XIXe siècle. Celle-ci exprime comment la chaleur se transmet sans déplacement de matière. Intuitivement, on imagine que l'agitation thermique des molécules se propage de proche en proche à vitesse finie: une molécule située à plusieurs mètres d'une bougie que l'on allume ne sera pas instantanément informée de l'augmentation de la température; il faudra un certain temps avant que cette information ne puisse atteindre ce point éloigné. Pourtant, l'équation de conduction de chaleur mène à une description apparemment paradoxale: tout point de l'espace environnant est instantanément affecté par cette modification locale. Autrement dit, la vitesse de propagation de l'information est, dans le modèle, infinie! Cette remarque, à elle seule, semble inciter à la prudence lorsque l'on utilise les résultats issus d'un tel modèle pour décrire la réalité. Pourtant, celui-ci est remarquablement efficace pour expliciter la conduction thermique. L'apparente propagation de l'information à vitesse infinie n'est pas en contradiction avec l'observation. L'augmentation instantanée de température loin d'une perturbation localisée (comme une bougie que l'on allume dans une pièce) devrait être rigoureusement nulle ; celle prédite par le modèle ne l'est pas, mais elle reste extrêmement faible et n'augmente que lentement au cours du temps. Le modèle rend donc compte de l'observation physique, même si l'une des propriétés de la description physique (la propagation de proche en proche à vitesse finie) a été perdue lors de la modélisation.

RESTER PRUDENT FACE AUX EFFETS DE LA DISCRÉTISATION

Depuis Isaac Newton, à la fin du XVII^e siècle, les modèles mathématiques ont été résolus de manière analytique : on cherchait à trouver des solutions exactes des équations. Une grande partie de la physique et des mathématiques a progressé de cette manière. Mais une résolution exacte n'est pas toujours possible. Dans l'essentiel des cas, cela est simplement dû à la complexité inhérente de ces équations.

Quand il n'existe pas de solution analytique, on peut tenter une résolution approchée sur ordinateur : c'est le domaine de la simulation numérique. On ne cherche alors plus de solution exacte, mais une approximation de celle-ci sous forme discrète (par exemple en échantillonnant le domaine étudié avec une grille de points). Avec l'augmentation de la puissance de calcul, ces solutions approchées fournissent des images de plus en plus réalistes. On pourrait presque parler d'expérience virtuelle !

La prudence reste de mise, néanmoins. Malgré le réalisme des images produites par simulation numérique, il faut rester particulièrement vigilant dans l'analyse des résultats obtenus. En effet, l'étape dite de discrétisation, qui consiste à transformer le modèle mathématique en un nombre fini d'inconnues (ou un nombre fini de points où l'on cherche à approcher la solution), n'est pas sans conséquences. Nous l'avons vu, les modèles mathématiques traduisent souvent des lois de conservation (de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie…). Ces quantités conservées par le modèle mathématique le sont-elles nécessairement par le modèle discret ? Hélas, ce n'est pas le cas en règle générale. Les lois de conservation peuvent être préservées au niveau discret, mais ce n'est pas vrai pour toutes les méthodes numériques.

Prenons par exemple les équations de Maxwell, qui décrivent l'électromagnétisme. Celles-ci préservent la divergence (*) du champ magnétique. L'absence initiale de monopôle magnétique (*) signifie que la résolution de ces équations ne peut pas en créer (c'est l'équation $\mathrm{div}\vec{B} = 0$). En d'autres termes : l'existence, ou non, de monopôles ne dépend que de leur présence initiale. Cela n'est malheureusement pas toujours le cas pour les modèles discrets utilisés en simulation numérique. Nombreux sont les modèles utilisés en astrophysique qui ne conservent pas la divergence du champ magnétique. Pour obtenir une solution réaliste, les monopôles doivent alors être artificiellement supprimés de la simulation (ils sont « filtrés »). Un autre exemple est la conservation de la masse, qui n'est pas toujours satisfaite au niveau discret dans les simulations d'océanographie. Un problème important lorsqu'il s'agit d'évaluer avec précision l'évolution du niveau des océans avec le changement climatique. Parfois, l'effet de la discrétisation va « dans le bon sens ». Ainsi, pour l'équation de la chaleur évoquée ci-dessus, la discrétisation nécessaire à la simulation numérique peut restaurer la propagation à vitesse finie de l'information.

Dans le modèle de conduction de la chaleur, la vitesse de propagation de l'information est infinie

Les simulations numériques sont-elles plus proches du modèle mathématique ou de la réalité ? Difficile d'y répondre ! Mais devant leur efficacité dans le monde scientifique et industriel d'aujourd'hui, ne pas les utiliser serait en définitive aussi absurde que de leur accorder une confiance aveugle… ■

(*) **La divergence** d'un champ vectoriel mesure si le flux tracé par les vecteurs « entre » dans un volume (la divergence est alors négative) ou s'il en « sort » (elle est alors positive). Pour un écoulement à divergence nulle, autant de fluide entre dans le volume qu'il n'en sort.

(*) **Un monopôle magnétique** est un point de l'espace autour duquel jaillirait un champ magnétique de symétrie radiale (toutes les lignes de champ jaillissant de, ou convergeant vers ce point auraient la même valeur, quelle que soit la direction).