

Mathématiques

Calcul scientifique

Lionel Sainsaulieu. Éditions Masson.

Introduction au calcul scientifique

Brigitte Lucquin et Olivier Pironneau. Éditions Masson.

Considérons un problème de nature industrielle : de l'eau se trouve dans un réservoir, serpente dans divers tuyaux, reçoit ou cède de la chaleur, sort par un robinet. Pour prévoir sa température à la sortie, les ingénieurs doivent : (1) écrire toutes les équations qui régissent l'ensemble des phénomènes : c'est la modélisation ; (2) concevoir une méthode de résolution approchée de ces équations (car en général les équations sont beaucoup trop compliquées pour être résolues de manière exacte) ; (3) écrire un programme d'ordinateur qui réalisera cette résolution approchée (beaucoup trop longue et compliquée pour être faite à la main) ; (4) comparer les résultats que donne la machine à ceux que fournit l'expérience : c'est la validation. Ainsi le calcul peut prédire une température de 30 °C quand le thermomètre indique 50 °C : la modélisation est-elle mal faite ? La résolution numérique est-elle défectueuse ? Y a-t-il une erreur dans la programmation de l'ordinateur ? De toute façon, il faut tout recommencer.

Il y a dix ans, la deuxième étape, la résolution approchée du problème une fois qu'il est modélisé, était nommée «analyse numérique» ; elle s'appelle aujourd'hui «calcul scientifique». Le contenu n'a pas changé, mais l'emphase linguistique révèle l'accroissement en importance de la communauté académique qui se préoccupe du sujet. Cet accroissement ne reflète en rien un besoin du marché (qui s'évoque bien davantage sur les trois autres points), mais simplement le mode de recrutement des universitaires, fait sous le principe de la «cooptation» (le terme recouvre des pratiques variées, allant de la constitution de chapelles au népotisme).

Comme le dit avec beaucoup de modestie L. Sainsaulieu, auteur du premier ouvrage dont nous rendons compte, il s'agit de réunir «les principales méthodes employées pour la résolution numérique des problèmes de l'ingénieur».

Le modèle mathématique, une fois décrit, se traduit par une ou plusieurs

«équations aux dérivées partielles». On recherche en général une fonction inconnue, par exemple (dans le cas évoqué) une température. Cette température T dépend du temps t , et aussi de l'endroit où on la mesure. C'est donc une fonction inconnue $T(t, x, y, z)$. Les renseignements que l'on a à son propos sont généralement écrits au moyen des dérivées de T par rapport aux diverses variables. Par exemple, s'il n'y a qu'une seule variable d'espace x (cas d'un barreau infiniment fin), l'«équation de la chaleur» donnera la température de la barre à l'instant t et au point d'abscisse x : le problème sera entièrement résolu, aussi bien dans le temps que dans l'espace, si on sait résoudre l'équation.

Comment fait-on pour écrire les équations, c'est-à-dire pour modéliser le phénomène ? La réponse est plaisante : on fait de son mieux ! On essaie, tant bien que mal, d'écrire les lois de la physique : équations de Maxwell, de Boltzmann, de Navier-Stokes, etc. La physique regorge de lois, mais ces lois sont à la fois empiriques et approximatives. Au laboratoire Système de perception de l'ETCA (Arcueil), David Ruelle a récemment fait un exposé dont nous reprenons les termes :

«Les lois de la physique macroscopique (conduction, rayonnement, etc.) ne résultent pas d'une intégration des lois de la physique microscopique (attractions-répulsions entre électrons, protons, etc.) : la mécanique statistique est à l'heure actuelle incapable de déduire les lois macroscopiques des lois microscopiques, sauf dans le cas particulier (très rare et sans intérêt industriel) des situations en équilibre. Les lois empiriques usuelles ne sont que des approximations : si, par exemple, on écrit $F = mg$, on néglige des termes en g^2 , g^3 , etc. On ne sait pas quel est le domaine de validité de ces approximations. Sont-elles encore valables pour des milieux très chauds, sous forte pression, très raréfiés, etc. ?»

Dans son chapitre V, «Modélisation numérique d'un problème de thermique», L. Sainsaulieu décrit un exemple en apparence très simple : de l'eau séjourne dans un réservoir, puis passe par un unique tuyau rectiligne, avant de sortir par un robinet. La question est : quelle est la température de l'eau à la sortie ? Même dans ce cas très simple, on ne sait pas modéliser correctement le problème ; il faut faire des hypothèses quant à la nature des écoulements (turbulences, etc.) et, ultérieurement, l'expérimentation validera ou non ces hypothèses. Cela fait, on peut mettre en œuvre les méthodes numériques que l'auteur a exposées au préalable, et l'on obtient... des résultats décevants ! Ce chapitre est absolument

remarquable ; le lecteur y découvre le vrai problème de la connaissance scientifique, qui est celui-ci : nous n'avons qu'une vision partielle, simplifiée, insuffisante des phénomènes et, même avec ces simplifications, nous ne parvenons pas à faire des prédictions. L'auteur est ingénieur de recherche chez Renault, et sa présentation sera une découverte – mieux, une révélation ! – pour les étudiants qui n'ont, jusque-là, été exposés qu'au savoir dogmatique et figé que l'Université délivre (et où le second ouvrage saura les replonger, que le lecteur se rassure !).

Quelles sont donc les méthodes numériques dont dispose l'ingénieur ? Il en existe principalement deux : la méthode des différences finies et la méthode des éléments finis. La première consiste à remplacer une dérivée $f'(x)$ par une «différence» $f(x) - f(y)/x - y$. Si on travaille sur un intervalle, par exemple x compris entre 0 et 1, on «discrétise» l'intervalle en introduisant une subdivision $x_0 = 0, x_1, \dots, x_N = 1$, et on remplace $f'(x)$ par $f(x_k) - f(x_{k-1})/x_k - x_{k-1}$. Les nombres inconnus $f(x_k)$ apparaissent alors comme la solution d'un gros système linéaire : on doit résoudre $AX = B$, où A est une matrice inversible, B un vecteur donné.

La seconde méthode – celle des éléments finis – fait appel à une approximation de la fonction inconnue par des fonctions plus complexes, telles des fonctions triangles, mais se ramène finalement aussi à un système linéaire. La méthode des «différences finies» étant conceptuellement plus simple que la méthode des «éléments finis», L. Sainsaulieu choisit très judicieusement de les exposer dans cet ordre, alors que, on ne sait pourquoi, B. Lucquin et O. Pironneau adoptent l'ordre inverse. Quant à la résolution des systèmes linéaires, qui remonte essentiellement à Carl Friedrich Gauss, les diverses méthodes sont extrêmement bien exposées par L. Sainsaulieu, avec leurs avantages et leurs inconvénients. On a enfin un bref aperçu sur une troisième catégorie de méthodes, les méthodes spectrales, utilisées surtout pour les problèmes de vibrations.

Le livre de L. Sainsaulieu est clair, bien écrit et attrayant. Je ne lui ferai qu'un reproche : je ne crois pas qu'il soit adapté au public que l'auteur mentionne – issu du premier cycle universitaire : outre la transformation de Fourier, à laquelle l'auteur fait référence à plusieurs reprises (niveau maîtrise), la méthode des éléments finis requiert en effet une bonne connaissance de la théorie des distributions (niveau maîtrise et souvent DEA). L'auteur sait-il que, par la grâce de réformes successives, les étudiants sortant du premier cycle savent à peine ce qu'est un espace vectoriel ?