

# L'analyse numérique

Pour la plupart des objets et services du quotidien, la phase de conception s'est appuyée sur la simulation numérique. En effet, l'essai sur maquette ou sur prototype laisse de plus en plus place à des réponses obtenues à partir de calculs sur ordinateur. Par exemple, dans les domaines de l'aérospatiale et de la sûreté nucléaire, les réponses obtenues lors de simulations numériques sont désormais reconnues comme résultats validant certaines expériences. Le calcul numérique sur ordinateur est un outil d'étude ayant un large champ d'applications : prévisions météo, construction de structures mécaniques (avions, carrosseries automobiles), médecine (valves cardiaques, prothèses, imagerie, répétition virtuelle de gestes opératoires).

La démarche du numéricien commence par la mise en équation du problème, ou modélisation. Pour un phénomène à étudier, cette étape passe par l'identification de différents termes, et des équations régissant leurs comportements et leurs interactions. Par exemple, pour étudier la dynamique d'un gaz, on choisira la pression, la température et la vitesse, appelées les inconnues du problème, que l'on mettra en équation. On écrira les équations vérifiées par ces inconnues : conservation de la masse du gaz dans un certain volume, conservation de la quantité de mouvement et conservation de l'énergie fournie par le système. Il s'agit d'Equations dites aux Dérivées Partielles (E.D.P.). En général, ce sont les spécialistes du problème qui sont, plus que les numériciens, aptes à établir cette mise en équation, et à procéder à des simplifications quand le phénomène est trop complexe, c'est-à-dire à négliger des termes dont l'influence est faible par rapport aux autres.

Une analyse mathématique permet ensuite d'étudier le problème, de déterminer sous quelles conditions (choix des paramètres), il existe une solution, si elle est unique et, sinon, de choisir celle qui correspond à la réalité physique du problème. Le cas échéant, il faut aussi donner une caractérisation mathématique de cette solution, c'est-à-dire un autre ensemble d'équations équivalentes au problème original mais plus simples à résoudre.

Comme on ne peut pas calculer un nombre très grand ou même infini de valeurs, il faut alors approcher le problème, par exemple calculer les valeurs des inconnues en certains points, choisis auparavant. C'est là l'étape de discrétisation, qui doit être accompagnée d'une mesure de l'erreur commise. Cette mesure donne la distance entre la solution approchée et la véritable solution du problème original, en fonction de différents paramètres comme la taille du problème numérique et la régularité de la solution.

Les problèmes discrétisés peuvent encore être trop complexes à résoudre numériquement. Une étape de simplification, telle que la linéarisation pour des problèmes non linéaires, permet alors d'obtenir des problèmes pour lesquels on dispose de méthodes de résolution numérique performantes : résolution de systèmes linéaires, optimisation par une méthode de gradient, recherche de valeurs propres.

On peut subséquemment aborder l'aspect algorithmique, c'est-à-dire la mise en œuvre efficace sur ordinateur de la méthode de résolution. On commence par choisir une représentation des données en mémoire, qui soit économe et facilement utilisable. Dans le cas d'une méthode itérative, on doit construire les différentes étapes pour aller d'une solution de départ choisie « arbitrairement » à la solution du problème, ou au moins à une solution acceptable selon des critères préalablement définis. De plus, dans le cas où des formulations mathématiquement équivalentes seraient numériquement différentes, il faut choisir la plus stable, afin d'obtenir des résultats fiables. Il reste à écrire le programme correspondant, qui soit efficace (qui utilise toutes les ressources des ordinateurs et permette d'obtenir les meilleurs résultats le plus rapidement possible), modulable (réutilisable pour différentes applications), transférable d'une machine à l'autre, facilement compréhensible et exploitable par des tiers. A noter que la difficulté d'un algorithme ne concerne pas la durée de son développement mais plutôt le temps de calcul nécessaire à la résolution du problème étudié.

Quand on a obtenu les résultats du calcul par ordinateur, il convient cependant d'être circonspect et d'étudier les sources d'erreur : les données elles-mêmes, l'arrondi, la méthode utilisée. Une autre source d'erreur est liée à la nature même du problème, c'est le conditionnement : une quantité qui mesure l'amplification des erreurs initiales. Sur un problème mal conditionné, une petite perturbation

des données peut conduire à des solutions très différentes. En météo, cette amplification est plus généralement connue sous le nom d'effet papillon : les battements d'ailes d'un papillon au Brésil peuvent provoquer une tornade au Texas. Elle est due à la nature même des équations de la météo, qui sont hautement non linéaires. Voilà pourquoi les prévisions météo ne peuvent pas être fiables au-delà de cinq jours en 2000.

Certains problèmes, et certaines méthodes, étaient déjà étudiés avant l'avènement des ordinateurs. Toutefois, au cours des dernières décennies, on s'est focalisé sur la vitesse d'obtention des résultats, sur leur qualité (précision), ainsi que sur le traitement de problèmes de plus en plus complexes et de tailles de plus en plus grandes. En effet, on prend en compte de plus en plus de paramètres afin de représenter plus fidèlement la réalité du phénomène étudiée.

La démarche qui vient d'être présentée est celle que suit le numéricien en charge de la simulation numérique d'un problème. Pour illustrer le propos, voici quelques exemples concrets de problème :

-Quand on cherche à déterminer le point de chute d'un objet lancé en l'air et retombant sous la seule action de la force de gravitation, on est amené à résoudre une équation polynomiale de degré deux, dont les racines sont bien connues dès l'enseignement secondaire. Si, en revanche, on cherche les racines d'une équation polynomiale quelconque, la seule possibilité de les obtenir est de les approcher par des calculs numériques (méthodes de Newton). En effet, Galois a montré que pour des polynômes de degré supérieur ou égal à cinq, il n'existe pas de formules explicites donnant les racines en fonction des coefficients.

-La résolution des Equations aux Dérivées Partielles passe souvent, après discrétisation et simplification, par la résolution d'un système linéaire. Une première méthode consiste à utiliser les formules de Cramer. Cependant pour résoudre un problème à 25 inconnues sur un PC à 1 GHz, il faut attendre  $0,5 \cdot 10^{18}$  années avant d'obtenir le résultat. Le nombre d'opérations effectuées est supérieur au nombre d'atomes de l'univers ! En revanche, avec la méthode de Gauss, un tel système est résolu en 16 micro-secondes. La taille maximale que l'on sait traiter par cette méthode est environ 50 000 inconnues. La simulation de l'écoulement de l'air autour d'un avion conduisant à résoudre des systèmes à 20 millions d'inconnues, il faut donc développer de nouvelles méthodes, aussi bien du point de vue algorithmique (gradient conjugué, méthodes de Krylov, méthodes multigrilles, méthodes stables) que du point de vue de l'implantation, par exemple sur super-ordinateur.

-Les images du pont de Tacoma (état de Washington, 1940) se balançant jusqu'à rupture sous l'effet du vent sont restées dans les mémoires. Un accident similaire, montrant l'effondrement d'un pont au passage d'une colonne d'infanterie, a conduit à inclure, dans les règlements militaires, l'interdiction de marcher au pas sur un pont. L'étude des valeurs propres, indiquant les fréquences amplifiées, aurait donné la réponse du pont à une oscillation forcée, et aurait permis de prédire son effondrement. Leur calcul est donc incontournable dans des nombreux domaines : constructions anti-sismiques, études statistiques des données, chimie quantique.

-Un gestionnaire veut choisir la capacité et l'emplacement de ses dépôts, en minimisant ses coûts de fonctionnement, et en respectant certaines contraintes telles que la satisfaction des commandes de ses clients. Il se trouve confronté à un problème d'optimisation sous contraintes.

-Tout un chacun a pu remarquer que sa calculatrice est bien incapable de représenter le nombre  $1/3$  puisque ce nombre s'écrit avec une infinité de «3» après la virgule. Par conséquent, la somme  $1/3 + 1/3 + 1/3$  ne vaut pas 1. Il s'agit là d'une rencontre quotidienne avec le problème des erreurs d'arrondi !

En réalité, les chercheurs en analyse numérique, et en particulier ceux du laboratoire d'Analyse Numérique et Optimisation (ANO) de l'Université des Sciences et Technologies de Lille, ne peuvent pas être des experts dans toutes les phases présentées ci-dessus. Ainsi, ils développent leurs travaux dans une ou plusieurs directions privilégiées.

Le problème de la résolution efficace de grands systèmes linéaires a été abordé et le laboratoire ANO a obtenu des résultats de pointe sur le développement d'algorithmes parmi les plus utilisés, et l'étude de leur qualité. Parmi les autres thèmes de recherche, on trouve, outre l'analyse numérique de certaines E.D.P, la mécanique des fluides et l'optimisation sur super-ordinateur, l'accélération de convergence, l'approximation rationnelle et l'extrapolation, les polynômes orthogonaux etc... On parle de convergence d'une suite pour indiquer que les valeurs prises sont des approximations de plus en plus satisfaisantes de la solution cherchée. L'accélération de la convergence permet d'obtenir plus rapidement de bonnes valeurs. Par exemple, la suite  $1, 1/2, 1/3, 1/4$  converge vers 0. Dans de nombreux cas, la convergence est trop lente pour permettre de deviner la limite. On va alors la transformer en une autre suite qui devra converger plus vite vers la même limite. Il n'existe pas de méthode universelle pour accélérer la convergence de toutes les suites. Il est donc nécessaire de disposer d'une panoplie de procédés, très utilisés dans de nombreux domaines des mathématiques appliqués. Par exemple, la suite qui converge vers «log 2» en donne une approximation à  $10^{-16}$  près (c'est la précision machine actuelle), c'est-à-dire avec  $10^{16}$  termes. En accélérant cette suite, on peut obtenir la même précision avec 22 termes seulement !

Un autre domaine dans lequel le laboratoire ANO a prouvé son excellence est celui de l'approximation rationnelle. Pour de nombreux problèmes physiques, on trouve la solution sous forme d'un développement en série. Naturellement, en pratique, on ne connaît que les premiers coefficients de cette série. On essaie alors de la représenter approximativement par une fraction rationnelle, c'est-à-dire le rapport de deux polynômes, tel que son développement coïncide avec la série aussi loin que possible. Une telle fraction rationnelle s'appelle un approximant de Padé. Elle fournit une approximation des quantités physiques inconnues de qualité. Ces approximants sont très utilisés en mécanique des fluides, physique théorique, contrôle, et sont souvent à la base du calcul des fonctions exponentielles et trigonométriques des calculatrices et ordinateurs.

Une technique permettant de résoudre des problèmes de plus en plus complexes, et de taille de plus en plus grande, consiste à exécuter le calcul sur un ordinateur parallèle. Il s'agit d'un ordinateur disposant de plusieurs unités de calcul entre lesquelles le travail doit être réparti le plus équitablement possible afin d'obtenir un temps d'exécution court. Idéalement, avec 100 processeurs, on devrait calculer en un temps 100 fois plus court. Cependant, à cause des inévitables coordinations, ce rendement n'est que rarement atteint. Un rendement de 80 % à 95 % est un objectif réaliste. Une autre motivation pour l'emploi de tels ordinateurs est qu'ils offrent une capacité mémoire supérieure à celle des ordinateurs classiques, et permettent de résoudre des problèmes de taille inaccessible autrement. La contrepartie de cet accroissement des performances est une algorithmique beaucoup plus sophistiquée, dont certains aspects sont étudiés à l'ANO.

Pour terminer, il faut citer cette justification de P. Lascaux, Professeur au CNAM (Paris), concernant la nécessité d'enseigner l'analyse numérique : *«On objectera que les calculatrices ou les micro-ordinateurs sont accompagnés de programmes de calculs faciles à mettre en œuvre, et que l'utilisateur n'a pas besoin de connaître les algorithmes employés, qui ont été conçus une fois pour toutes par des spécialistes. Nous croyons, au contraire, qu'il est très instructif d'étudier certains de ces algorithmes pour comprendre les notions de stabilité, précision, complexité qui permettent de choisir, pour un problème donné, la méthode la plus efficace. C'est-à-dire celle assurant la meilleure précision à coût donné, qu'il s'agisse de coût en temps de calcul, ou en place mémoire nécessaire. De plus, seule cette étude permet de comprendre les limites de validité des méthodes, qu'il ne faut jamais perdre de vue».*