L'APPROCHE NUMÉRIQUE : SIMULATION OU SIMULACRE DES PHÉNOMÈNES ?

par Marie FARGE

RÉSUMÉ

Dans une première partie nous ferons un bref historique de l'approche numérique en essayant de retracer l'origine de l'utilisation des ordinateurs en mathématiques et en physique à des fins de simulation. Dans une seconde partie nous donnerons une idée des techniques employées en nous centrant, à titre d'exemple, sur la méthode des différences finies pour la résolution des équations aux dérivées partielles, et discuterons l'incidence des erreurs inhérentes à l'emploi de l'ordinateur. Dans une troisième partie nous défendrons l'idée que la simulation numérique relève plus de l'approche expérimentale que de l'approche théorique, en prenant comme exemple le cas de la simulation directe de la turbulence bidimensionnelle.

> « On ne peut échapper au sentiment que ces formules mathématiques ont une existence qui leur est propre, qu'elles sont plus savantes que nous ne sommes, plus savantes même que ceux qui les ont découvertes, que nous pouvons en extraire plus de science qu'il n'en a été mis à l'origine. »
>
> Heinrich HERTZ

I. — ESQUISSE HISTORIQUE...

L'approche numérique est bien antérieure à l'apparition des premiers ordinateurs. Dans une note présentée en 1822 [1], Charles Babbage proposait déjà d'utiliser des machines numériques pour calculer les tables astronomiques : celles-ci se composaient d'un « grenier » où étaient stockées les données et d'un « moulin » où s'effectuaient les calculs. Toutefois il ne s'agissait là que d'évaluer numériquement les valeurs de solutions connues sous forme analytique, et non à proprement parler de simulation numérique. La simulation numérique consiste à intégrer les équations décrivant la physique du système que l'on étudie à l'aide d'algorithmes numériques. On peut faire remonter son origine à l'année 1899 avec

les travaux de W.F. Sheppard [2] concernant la méthode des différences finies. Cette méthode fut développée par L.F. Richardson [3] qui l'utilisa dès 1910 pour calculer les contraintes d'un barrage. Richardson envisagea ensuite de résoudre numériquement les équations de la dynamique atmosphérique afin de prédire le temps. Il mit au point un schéma numérique, dit de Richardson, et l'appliqua au calcul des champs atmosphériques pour la journée du 20 mai 1910 en choisissant un pas de temps de 6 heures. Après six semaines de travail il n'avait obtenu le nouvel état de l'atmosphère que pour deux colonnes verticales du maillage, et les valeurs qu'il avait calculées pour les champs de vent et les champs de pression différaient déjà sensiblement de celles observées. Il réalisa alors que si l'on voulait faire les calculs à la main à la même vitesse que l'évolution atmosphérique il faudrait 64 000 personnes pour avoir une prédiction toutes les 3 heures en supposant un maillage de 200 par 200 km sur l'ensemble du globe. Dans un ouvrage de 1922 [4] il alla même jusqu'à imaginer une ville au centre de laquelle se dresserait un immense théâtre où travailleraient des « *myriades de calculateurs [...], chacun d'eux ne résolvant qu'une équation ou une partie d'équation* » en un point de grille, l'ensemble des exécutants étant placé sous la direction d'un coordinateur chargé de faire avancer les calculs de façon synchrone « *tel le chef d'un orchestre dont les instruments seraient des règles à calcul et des machines à calculer !* ». Ce projet ne vit jamais le jour, ce qui fut une bonne chose dans la mesure où O'Brien *et al.* [5] montrèrent en 1950 que le schéma de Richardson est inconditionnellement instable. La justification mathématique de l'approche numérique fut apportée par R. Courant, R. Friedrichs et H. Lewy dans un article de 1928 [6] où ils démontrent que les équations discrétisées constituent bien une approximation des équations aux dérivées partielles à condition de vérifier certains critères de stabilité.

La simulation numérique dans son acception moderne sous-entend l'utilisation d'ordinateurs effectuant les calculs. Ceux-ci apparurent au début des années 40. Les premiers furent le Z2 et le Z3 construits en Allemagne par Konrad Zusse, en 1939 et 1941, mais détruits au cours de la guerre. Indépendamment Türing en Angleterre mettait au point des calculateurs utilisés pour le décodage, malheureusement l'information concernant ses travaux est encore en grande partie « classifiée ». Le premier ordinateur construit outre-atlantique fut le Mark I achevé par Howard Aiken en 1944 à l'Université d'Harvard avec le concours d'I.B.M. Pendant ce temps à l'Université de Pennsylvanie, John Mauchly et J.P. Eckert réalisaient l'E.N.I.A.C., (installé en 1946 au Ballistic Research Laboratories d'Aberdeen, Maryland), puis fondaient la compagnie Univac qui, en 1951, fut la première à commercialiser un ordinateur. Pour donner un ordre de grandeur, l'Univac I était 3 fois plus rapide et 1 000 fois plus lourd que les micro-ordinateurs actuels.

Les deux premières personnes qui réalisèrent l'incidence que pouvaient avoir les ordinateurs en mathématique et en physique furent John von Neumann et Stan Ulam. Ce dernier raconte dans son autobiographie [7] que : « *Presque immédiatement après la guerre John et moi avons commencé à discuter des possibilités d'utiliser les ordinateurs heuristiquement pour essayer d'obtenir quelques lumières sur des questions de mathématiques pures. En produisant des*

exemples et en observant les propriétés de certains objets mathématiques on peut espérer obtenir des éléments de réponse quant au comportement des lois générales. » Il poursuit en montrant, à titre d'exemple, comment des expériences numériques pourraient permettre d'étudier la régularité des solutions d'équations différentielles et termine en rappelant que : « *Lors des années qui ont suivi j'ai suggéré, et dans certains cas résolu, une variété de problèmes de mathématiques pures en expérimentant ou même tout simplement en observant* », sous-entendu numériquement. On voit ainsi se préciser clairement, dès l'origine, la contribution de l'ordinateur à la recherche en mathématiques et en physique, à savoir : la possibilité d'expérimenter et de « voir » les solutions des équations que l'on étudie. Nous illustrerons ces deux points dans la troisième partie.

Pendant la guerre les travaux de von Neumann à Los Alamos portèrent sur la mise au point de schémas numériques satisfaisants et sur l'établissement d'un critère de stabilité, dit de von Neumann, permettant de choisir les pas d'espace et de temps quand on discrétise des équations paraboliques dans un schéma aux différences finies. John von Neumann ne publia jamais ce travail (on peut cependant le consulter dans ses œuvres complètes [8]) qu'il jugeait trop approximatif puisqu'il ne tenait compte ni des termes non linéaires ni des conditions aux limites. Toutefois cette méthode est toujours largement employée et fait encore l'objet de développements donnant lieu à des extensions très générales où intervient la discrétisation des conditions aux limites. En 1949 J. Von Neumann et R.D. Richtmyer mirent au point une technique numérique permettant de calculer les chocs qui apparaissent dans les écoulements compressibles [9], problème à l'époque hors d'atteinte par la voie analytique à cause de l'apparition de singularités. La méthode adoptée consistait à introduire des termes dissipatifs dans les équations afin d'étaler légèrement les chocs en créant des couches limites au moins égales à la maille de calcul et lisser ainsi les discontinuités. Cette technique est toujours d'usage courant. John von Neumann entreprit ensuite avec J.G. Charney et R. Fjörtoft d'intégrer numériquement un modèle de circulation atmosphérique barotrope (c'est-à-dire négligeant les variations de température le long des surfaces isobares). Ce modèle utilisait l'équation du tourbillon, au lieu des équations primitives en vitesse-pression, et supposait l'écoulement quasi-géostrophique (i.e. stratification horizontale stable en moyenne) et non divergent (i.e. incompressible). La grille de calcul était de 15 points sur 18 et ne couvrait que les États-Unis, ce qui correspondait à un pas spatial de 736 km. La résolution numérique, effectuée en 1950 sur l'E.N.I.A.C. d'Aberdeen, permit de calculer sur une durée de 24 h l'évolution météorologique des 5, 30, 31 janvier et 13 février 1949. Les auteurs dans leur article [10] précisent : « *Il est intéressant de remarquer que le temps de calcul pour une prévision sur 24 h était d'environ 24 h, c'est-à-dire que nous étions juste capables d'avancer à la même vitesse que l'évolution atmosphérique. Cependant, la plus grande partie de ce temps était occupée à des opérations manuelles ou mécanographiques.* ». Les auteurs ensuite comparent les champs prévus avec ceux observés et tentent d'expliquer les erreurs de prévision constatées, dues d'après eux à l'emploi d'une maille de calcul trop grande et au fait que les effets baroclines (c'est-à-dire la variation de la pression en fonction de la température) aient été négligés. Cette première simulation numérique, à laquelle

collaborèrent également J. Smagorinsky et Mme K. von Neumann, est à l'origine des modèles de prévision météorologiques actuels de type dynamique, tels ceux dits de « Circulation Générale » couvrant l'ensemble du globe (Figure 1).

Au début des années 50 John von Neumann acheva à l'Institute for Advanced Studies de Princeton la construction de son ordinateur, baptisé MANIAC, dont un second exemplaire fut installé par Metropolis à Los Alamos où il resta en service jusqu'en 1971. C'est sur cette dernière machine que von Neumann et Fermi entreprirent les simulations nécessaires à la mise au point de la bombe à hydrogène, avec en particulier l'étude d'instabilités hydrodynamiques telle celle de Taylor [11] ainsi que des calculs de cascades neutroniques. À cette occasion Stan Ulam découvrit la méthode de Monte-Carlo où, pour résoudre certains problèmes mettant en jeu un grand nombre de particules, l'on choisit d'effectuer les calculs à partir d'échantillons statistiques plutôt que d'essayer d'examiner toutes les configurations possibles. Cette technique, aujourd'hui très largement utilisée, ne permet pas d'obtenir une solution exacte, seulement une estimation dans une marge d'erreur connue, mais permet de résoudre des problèmes inaccessibles par les autres méthodes.

Enrico Fermi sut très tôt discerner l'usage que l'on pouvait faire des ordinateurs et il entreprit avec Ulam et Pasta d'étudier numériquement l'évolution d'un système de particules en interaction faiblement non linéaire. À leur surprise ils découvrirent que le système, au lieu de tendre vers l'équipartition de l'énergie, présentait au contraire des solutions quasi-périodiques, ce qui remettait en cause l'hypothèse ergodique de la mécanique statistique [12]. Au début des années 60 Kruskal et Zabusky reprirent ce travail en choisissant un terme non linéaire, quadratique au lieu de cubique, et montrèrent que le système était gouverné par l'équation de Korteveg-deVries. Ils l'intégrèrent ensuite numériquement et mirent en évidence des solutions du genre onde, dont le comportement rappelait toutefois celui des particules (préservation de la forme et de la vitesse après interaction), solutions qu'ils appelèrent solitons [13], [14], [15]. Ces expériences numériques ouvrirent ainsi la voie à toute une classe de problèmes nouveaux concernant les systèmes dynamiques non ergodiques.

Pour conclure cette première partie, où nous avons essayé de dégager quelques-uns des travaux fondateurs de l'approche numérique, nous voudrions citer une fois encore Ulam dont la vision de l'avenir des mathématiques s'exprime dans un langage qui n'est pas sans évoquer celui de René Thom (mais seront-ils d'accord sur les moyens ?) : « *L'étude récente des mathématiques de la morphogenèse, et la possibilité d'étudier expérimentalement à l'ordinateur la dynamique des compétitions et des conflits entre configurations géométriques à l'image de la lutte pour la survie, pourrait conduire à de nouveaux concepts mathématiques [...]. L'utilisation de l'ordinateur semble, non seulement pratique, mais absolument essentielle pour de telles expériences qui demandent de suivre ces jeux et ces luttes sur un grand nombre d'états ou d'étapes. Je crois que l'expérience que l'on gagnera en suivant l'évolution de tels processus aura une influence fondamentale sur ce qui un jour pourrait finalement généraliser voir même remplacer en mathématiques l'immersion exclusive dans l'axiomatique formelle que l'on connaît actuellement.* » *[7]*

II. — Simulation ou simulacre ?

Dans une note de son ouvrage « Stabilité Structurelle et Morphogenèse » (p. 27-28) [16], René Thom fait la remarque suivante : « *La géométrie euclidienne classique peut être considérée comme une magie ; au prix d'une distorsion minime des apparences (le point sans étendue, la droite sans épaisseur...), le langage formel de la géométrie décrit adéquatement la réalité spatiale. En ce sens, on pourrait dire que la géométrie est une magie qui réussit.* » Nous pensons que la simulation numérique peut être également considérée comme une « magie qui réussit », au prix cette fois d'une distorsion minime des équations, mais opérée dans le sens inverse (point étendu à une maille, continuum discrétisé). En effet sa méthode consiste à remplacer les équations différentielles par des équations algébriques discrètes, et l'on constate, voilà la magie, que leur résolution numérique permet d'atteindre des solutions qui décrivent adéquatement la réalité physique. Toutefois cet étonnement n'est pas propre à la démarche numérique mais à la physique tout entière : « *La chose la plus incompréhensible est que la nature soit compréhensible* ».

Une simulation numérique se déroule schématiquement suivant 5 étapes.

1. *La définition du problème*

On définit le phénomène physique que l'on souhaite simuler et on précise si possible les questions auxquelles le modèle numérique doit tenter d'apporter une réponse.

2. *Le choix du modèle mathématique*

On décrit le problème à l'aide d'un système d'équations et de conditions aux limites convenablement choisies, c'est-à-dire en veillant à ce que le problème soit bien posé.

3. *La discrétisation des équations*

On remplace les variables continues par un ensemble de valeurs aux nœuds d'un maillage discret (méthode des différences finies), et les équations différentielles par des équations algébriques vérifiées en chaque point de ce maillage. On peut aussi projeter les solutions sur un ensemble de fonctions orthogonales convenablement choisies (méthodes spectrales).

4. *Le choix des algorithmes*

On résout les systèmes d'équations algébriques à l'aide d'algorithmes numériques choisis en fonction de leur rapidité de calcul, de leur besoin en taille mémoire et de la précision désirée.

5. *Le test du modèle numérique*

Après avoir écrit le programme, on teste différents pas d'espace et de temps afin de vérifier la bonne convergence du schéma numérique et des algorithmes employés. On applique ensuite le modèle à la résolution d'un cas connu ou, à

défaut de « cas-test », on vérifie que sa consistance structurelle (stabilité, conservation des symétries et des invariants...) est satisfaisante.

Nous voudrions, en décrivant la nature des erreurs numériques, évaluer le risque de simulacre (c'est-à-dire le risque de se laisser abuser par une représentation falsifiée des phénomènes) propre à l'approche numérique. Nous nous limiterons, à titre d'exemple, à l'étude des erreurs numériques rencontrées dans les méthodes des différences finies et n'aborderons que très succinctement le cas des méthodes de Monte-Carlo. La discussion des erreurs numériques se ramène aux problèmes classiques : d'*existence* et d'*unicité* des solutions (le problème est-il bien posé ?), de *consistance* (les phénomènes observés sont-ils bien en rapport avec ceux prédits par la théorie ?), de *stabilité* (le phénomène que l'on désire étudier est-il suffisamment stable pour que l'on ait le temps d'effectuer des mesures ?) et de *convergence* (quelle est l'incidence des erreurs de mesure sur les résultats ?).

Existence et unicité

La première question que l'on doit se poser, face à la formulation mathématique du phénomène que l'on désire simuler, est celle de l'existence et de l'unicité des solutions des équations pour les conditions aux limites que l'on a choisies. Typiquement, les problèmes traités par les méthodes numériques se partagent en deux groupes :

1. Les *problèmes à valeur initiale* (problèmes de Cauchy), où il s'agit de décrire l'évolution de différents champs à partir de leur état initial à l'aide d'équations aux dérivées partielles, soit paraboliques (par exemple les équations de diffusion), soit hyperboliques du premier ordre (par exemple les équations de transport), soit hyperboliques du second ordre (par exemple les équations d'onde), en tenant compte des conditions aux limites.

2. Les *problèmes aux limites,* où l'on doit calculer les valeurs des champs satisfaisant les conditions imposées à la frontière du domaine d'intégration. On les appelle encore de façon imagée « problèmes de jury », car il s'agit de mettre d'accord l'ensemble des points du domaine avec ceux des bords. À cette classe de problèmes correspondent les équations elliptiques (par exemple les équations du type équation de Poisson).

Si les équations traitées sont linéaires, on est en général assuré de l'existence des solutions dans la mesure où l'on a un nombre suffisant de conditions aux limites pour clore le système. Toutefois, comme l'une des applications préférentielles de l'approche numérique est le traitement des problèmes non linéaires, dans la plupart des cas on a affaire à des équations non linéaires pour lesquelles on dispose rarement de théorèmes d'unicité, surtout quand il s'agit de systèmes d'équations couplées. L'existence et l'unicité des solutions n'ont actuellement été établies que pour quelques cas d'application limitée. Prenons à titre d'exemple le cas des équations de la dynamique des fluides. On peut garantir l'existence et l'unicité des solutions de l'équation de Navier-Stokes pour de faibles valeurs du nombre de Reynolds ($R = LV/\nu$, L échelle de longueur, V échelle de vitesse et ν viscosité cinématique) [17]. Par contre pour les grands nombres de Reynolds, si

l'existence (au sens faible) des solutions est bien établie [18], [19], ce n'est pas le cas de leur unicité, sauf en dimension deux [20], [21]. En effet, au-delà d'une valeur critique annonçant l'apparition de la turbulence, on n'a pas encore démontré en dimension trois l'unicité des solutions, car on ne sait plus alors contrôler les termes non linéaires [22], à moins d'augmenter la dissipativité [23], [24]. En ce qui concerne l'équation d'Euler (cas où la viscosité est nulle, i.e. dans la limite Reynolds infini) le problème de l'existence pour tout temps et de l'unicité est résolu en dimension deux mais non encore en dimension trois [25].

Quand on n'a pas l'unicité des solutions le problème est mal posé (au sens d'Hadamard), c'est-à-dire qu'il n'y a pas continuité de la solution par rapport aux données. Dans la plupart des cas l'unicité est intimement liée à la régularité pour tout temps, et l'ordinateur joue aujourd'hui un rôle heuristique important pour étudier ces propriétés, soit en calculant des développements en série de Taylor des solutions, soit grâce à des simulations directes permettant de détecter l'instant où une singularité coupe l'axe réel [26].

Consistance et précision

Quand on discrétise une équation différentielle on doit se demander si l'approximation algébrique effectuée est bien consistante, c'est-à-dire : est-ce que l'équation discrétisée est bien équivalente à l'équation différentielle que l'on cherche à intégrer ? L'idée de consistance recouvre les deux propriétés suivantes :

1. L'équation discrétisée doit tendre vers l'équation continue quand les pas d'espace et de temps tendent vers zéro.

2. L'équation discrétisée doit avoir les mêmes propriétés de symétrie que l'équation différentielle, ou, plus exactement, elle doit avoir pour groupe d'invariance un sous-groupe (aussi grand que possible) de celui de l'équation différentielle.

Il est très important que la première propriété soit vérifiée. C'est le cas pour tous les schémas de discrétisation que nous connaissons. La seconde propriété, par contre, n'est vérifiée que pour les schémas aux différences centrées (schémas dans lesquels les valeurs inconnues aux nœuds du maillage sont exprimées en fonction d'un nombre pair de valeurs voisines).

En pratique, bien évidemment, on utilise des pas d'espace et de temps non nuls. Donc, même si un schéma de discrétisation est consistant, il n'en introduit pas moins des erreurs, dites de troncature. La précision des résultats numériques dépend à la fois :

1. de l'*erreur d'arrondi* provenant de la taille limitée des mots mémoire de l'ordinateur utilisé ;

2. de l'*erreur de troncature,* directement liée à l'ordre du schéma de discrétisation employé (c'est-à-dire à l'ordre des termes négligés dans le développement en série de Taylor des opérateurs différentiels).

Typiquement dans les schémas du premier ordre l'erreur de troncature a un effet diffusif sur les solutions, ce qui entraîne un lissage des gradients. Dans les schémas du second ordre l'erreur de troncature a au contraire un effet dispersif caractérisé par l'apparition d'oscillations parasites dans les zones à fort gradient

(chocs, fronts...) [27]. Si le comportement de l'erreur de troncature varie suivant l'ordre du schéma de discrétisation choisi, son amplitude par contre ne dépend que du pas d'espace. Aussi est-il toujours possible de limiter l'erreur de troncature en réduisant la taille de la grille de calcul. L'erreur d'arrondi par contre ne dépend pas du schéma de discrétisation mais de la précision de l'ordinateur employé. Dans la pratique celle-ci est toujours négligeable devant l'erreur de troncature.

Stabilité et convergence

Une fois que l'on a vérifié que le schéma de discrétisation choisi est bien une approximation du problème aux dérivées partielles, on doit se poser deux questions :

1. Le processus de calcul est-il stable, c'est-à-dire n'amplifie-t-il pas les erreurs d'arrondi au risque de diverger ?
2. S'il est stable, la solution obtenue numériquement converge-t-elle bien vers la solution du problème aux dérivées partielles ?

Le théorème d'équivalence de Lax [28] dit que :

Pour un problème à valeur initiale bien posé approché par un schéma aux différences finies consistant, la stabilité est une condition nécessaire et suffisante de convergence.

Ainsi, dans la mesure où l'on a déjà répondu par l'affirmative aux questions des paragraphes II.1. et II.2., le problème de la stabilité et de la convergence se ramène-t-il à une seule et même question : le schéma numérique est-il stable ?

En général on étudie localement la stabilité d'un schéma en faisant l'analyse harmonique de la solution perturbée et en veillant à ce que les différentes composantes du spectre restent bornées quand le nombre de pas de temps augmente, afin d'éviter que les erreurs d'arrondi ne soient amplifiées et que le calcul ne diverge. C'est le principe de l'analyse de von Neumann. Celle-ci montre que les *schémas explicites* (i.e. ceux pour lesquels les valeurs cherchées sont exprimées explicitement en fonction des valeurs calculées à l'instant précédent) sont instables ou conditionnellement stables, tandis que les *schémas implicites* (i.e. ceux pour lesquels les valeurs cherchées sont exprimées implicitement en fonction des valeurs antérieures et des valeurs aux points voisins au même instant, valeurs elles aussi inconnues) sont inconditionnellement stables [27]. L'analyse de von Neumann permet ainsi d'évaluer selon les cas le pas de temps sauvegardant la stabilité des solutions, c'est-à-dire un pas de temps suffisamment petit pour que le calcul puisse suivre l'évolution des champs (on peut penser par analogie au réglage de temps d'ouverture du diaphragme d'un appareil photo en fonction de la vitesse de déplacement de l'objet photographié). Si l'on se place du point de vue de la stabilité, l'analogie entre expérience numérique et expérience de laboratoire joue pleinement : en effet, tout comme un appareil de mesure permet, pour un prix donné, d'atteindre une certaine résolution spatiale et temporelle, de même la résolution et la réponse dynamique d'une simulation numérique dépend de la maille de calcul choisie et par conséquent du budget de calcul disponible.

Cependant le critère de von Neumann ne s'applique qu'aux problèmes linéaires les plus simples, car il ne tient compte ni des effets non linéaires, ni de

l'incidence des conditions aux limites discrétisées sur la stabilité. Vue l'impossibilité dans laquelle se trouvent les numériciens quant à établir des critères de stabilité adaptés au traitement numérique d'équations non-linéaires, nous proposons de recourir à une analyse plus physique, que d'aucuns jugeront par trop intuitive. Cette approche, limitée au cas des simulations d'écoulements, repose sur l'analogie qui existe entre les mécanismes gouvernant la stabilité hydrodynamique et ceux assurant la stabilité numérique. Elle part du principe suivant : *Pour qu'il y ait stabilité numérique il faut qu'il y ait stabilité hydrodynamique à l'échelle de la maille de calcul* [24]. La stabilité hydrodynamique est conditionnée par l'équilibre qui doit exister à une certaine échelle, appelée micro-échelle de l'écoulement (échelle de Kolmogorov construite sur la viscosité moléculaire ou sur une viscosité turbulente si l'on paramétrise les petites échelles), entre les forces de convection gouvernées par les termes non linéaires et les forces de diffusion décrites par les termes linéaires de l'équation de Navier-Stokes. Les instabilités risquent de se développer à une certaine échelle si les termes non linéaires l'emportent sur les termes linéaires, c'est-à-dire quand à cette échelle les forces de convection dominent les forces de diffusion. De même il y a apparition d'instabilités numériques dans une simulation si, à l'échelle de la maille de calcul, les termes non linéaires l'emportent sur les termes de diffusion ; dans ce cas la moindre perturbation, introduite par exemple par la discrétisation des conditions aux limites ou par les erreurs d'arrondi, est amplifiée par les termes non linéaires avant d'avoir eu le temps d'être amortie par diffusion et le calcul diverge. Ainsi, pour garantir la stabilité numérique, faut-il choisir une maille de calcul suffisamment fine pour qu'à la plus petite échelle la diffusion domine. Ceci s'exprime encore en disant que le nombre de Reynolds (rapport des termes de convection sur les termes de diffusion) construit sur la maille de calcul doit toujours rester inférieur à 1. Dans la pratique l'effet destabilisant des termes non linéaires ne se fait vraiment sentir qu'au-delà d'un Reynolds de maille de 4 [29].

Nous n'avons jusqu'à présent parlé que des modèles construits à partir des équations gouvernant la physique des phénomènes que l'on étudie : l'ordinateur est utilisé pour intégrer ces équations et, aux erreurs numériques près, le rapport entre les solutions numériques et les phénomènes ne dépend que de l'adéquation de la théorie sous-jacente à la réalité. Il existe une seconde catégorie de modèles numériques pour lesquels ce rapport est beaucoup plus problématique, il s'agit des méthodes de Monte-Carlo auxquelles nous avons fait allusion dans la première partie. En effet, ces modèles partent de systèmes, du type processus de Markov, sans rapport a priori avec les phénomènes modélisés mais dont le comportement s'avère semblable à celui des équations différentielles, à condition toutefois de choisir des échantillons statistiques représentatifs. L'ordinateur dans ce cas est utilisé comme générateur de nombres aléatoires et, parmi toutes les réalisations ainsi engendrées, on ne retient que celles ayant une « réalisabilité » physique, c'est-à-dire vérifiant les principes de conservation propres au phénomène simulé. L'adéquation de tels modèles à la réalité repose sur l'isomorphisme partiel qui existe entre la structure mathématique des processus stochastiques et celle des équations différentielles. Cette approche est hautement heuristique, et dans la pratique il n'existe que deux façons de tester ces modèles : soit en les comparant

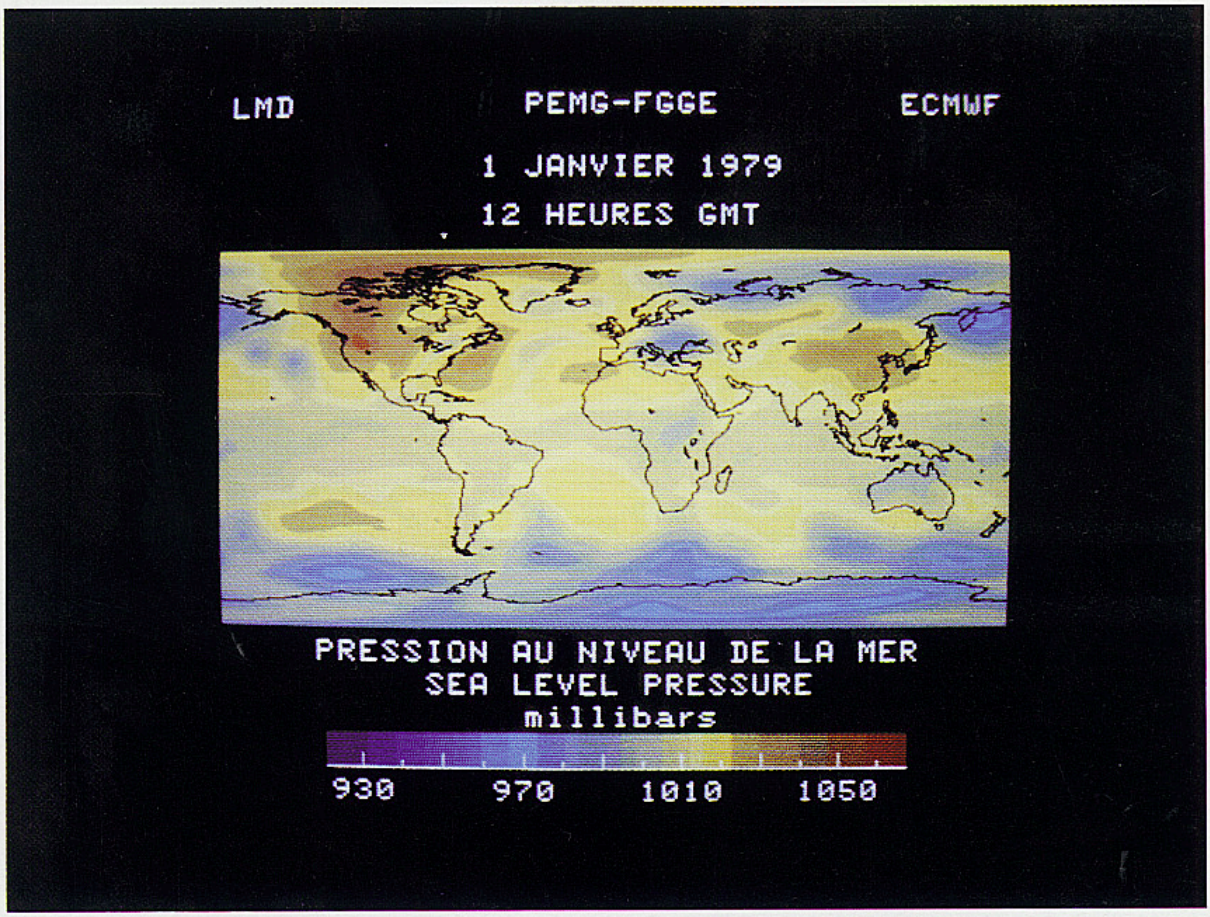
à des expériences de laboratoire, soit en effectuant un grand nombre de simulations afin de vérifier que la variance des solutions reste faible, ce qui est en général trop coûteux en temps de calcul pour être fait exhaustivement.

En conclusion, nous pensons que la question « *simulation ou simulacre des phénomènes ?* » n'est pas propre à l'approche numérique, mais à la physique toute entière. L'étude des phénomènes au moyen de la simulation numérique ne nous semble pas plus « artificielle » que cette même étude effectuée au moyen d'expériences aussi complexes que celles utilisées en physique aujourd'hui : le risque de simulacre n'est pas plus grand quand on étudie le comportement des systèmes dynamiques à l'aide d'ordinateurs que quand on observe celui des particules à l'aide d'accélérateurs ou celui des galaxies à l'aide de télescopes. En effet, la distance entre les phénomènes étudiés et l'observation que l'on en fait est telle que l'on a toujours besoin de principes théoriques pour discerner ce que l'on tient pour vrai du reste des artefacts.

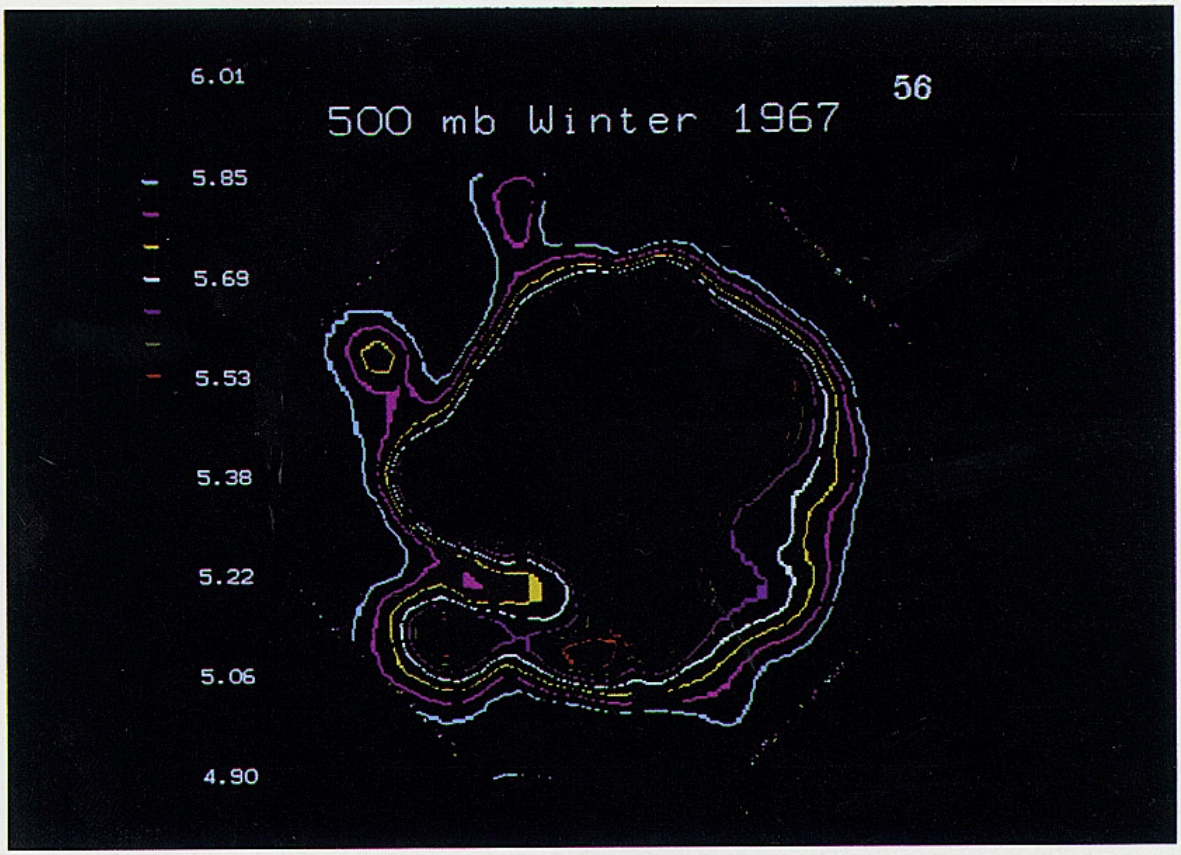
Les termes « simulacre » et « simulation » ont une connotation péjorative et signifient, pour le premier « *image, idole, représentation de fausses divinités* », mais aussi « *action feinte destinée à faire illusion* », et pour le second « *déguisement, fiction* » [30]. Cette terminologie recèle peut-être quelque sens symbolique, où l'on retrouve la problématique idée-idole [31], loi-observable, et où se dessinent à la fois le risque de fascination illusoire exercée par l'ordinateur et la dépendance originelle qui lie ce dernier à la nomenklatura militaro-industrielle (ne dit-on pas « simulacre de combat » ?). Mais, pour répondre à la question « *simulation ou simulacre ?* », nous préférons éviter d'employer ces deux termes et leur préférons le mot « *expérimentation* » qui correspond beaucoup mieux à ce qu'est effectivement l'utilisation du numérique en mathématiques et en physique, à savoir la possibilité de faire des expériences à partir des équations ou des principes gouvernant la physique des phénomènes que l'on désire étudier.

III. — Expérimentation numérique !

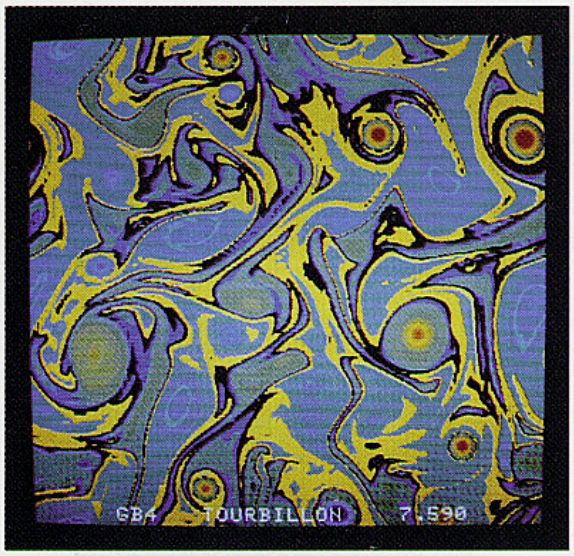
Nous voudrions illustrer le rôle joué par l'ordinateur en physique en choisissant à titre d'exemple l'étude de la turbulence (et plus particulièrement la simulation directe de la turbulence bidimensionnelle), c'est-à-dire l'étude de systèmes dynamiques présentant un comportement chaotique. La turbulence est une très belle source de « formes informes », premier type de morphologies instables selon la classification de René Thom, qui en donne la description suivante : « *Certaines formes sont informes parce qu'elles présentent une structure informe très compliquée ; chaotiques, elles n'offrent à l'analyse que peu ou pas d'éléments identifiables* » [16]. C'est précisément ce type de morphologies que l'on rencontre dans les écoulements turbulents bidimensionnels (Figures 2 et 3). L'étude des écoulements turbulents a un statut particulier du point de vue épistémologique dans la mesure où les équations de Navier-Stokes gouvernant la dynamique des fluides ont toujours été unanimement admises et seule leur intégration pose problème. John Von Neumann dans un article non publié de 1946 (mais disponible dans ses œuvres



1a. Modèle de Circulation Générale du L.M.D. (Claude Basdevant, Katia Laval et Robert Sadourny, L.M.D.-E.N.S., Visualisation : LACTAMME, École Polytechnique)



1b. Modélisation de la dynamique barotrope des grandes échelles atmosphériques (Roberto Benzi, Centre Scientifique IBM, Rome)



2. Simulation de la turbulence bidimensionnelle incompressible, champ de vorticité ou tourbillon,
(Claude Basdevant, L.M.D.-E.N.S., Visualisation : Diviset, L.M.D. - École Polytechnique).

3. Simulation de la turbulence bidimensionnelle incompressible, champ de fonction de courant,
(Claude Basdevant, L.M.D.-E.N.S., Visualisation : LACTAMME - École Polytechnique).

complètes), rédigé conjointement avec Hermann Goldstine [32], précise l'originalité de ce domaine par rapport au reste de la physique : « *Il est remarquable que l'expérimentation physique qui a conduit à ces découvertes* [en théorie de la turbulence] *est une forme bien particulière d'expérience, très différente de ce que l'on rencontre dans d'autres domaines de la physique. En fait, l'expérience en mécanique des fluides est généralement conduite dans des conditions où les principes physiques sous-jacents ne font aucun doute, où les quantités à mesurer sont entièrement déterminées par des équations connues. Le but de l'expérience n'est pas de vérifier une nouvelle théorie mais de remplacer les calculs effectués à partir d'une théorie connue par des mesures directes. Ainsi par exemple les souffleries sont-elles actuellement utilisées, au moins en grande partie, comme instrument de calcul, disons de type analogique, pour intégrer les équations aux dérivées partielles non-linéaires gouvernant la dynamique des fluides. C'est en quelque sorte cette forme détournée de calcul qui a fourni, et fournit encore, les idées mathématiques décisives dans le domaine de la mécanique des fluides. C'est de toute évidence une méthode analogique. Il apparaît cependant clairement que les calculateurs numériques ont plus de souplesse, de précision et peuvent être maintenant rendus plus performants. Je crois donc qu'il est temps aujourd'hui d'envisager d'effectuer la transition vers ce type de machines afin d'augmenter la puissance de cette approche dans des proportions sans précédent.* » John von Neumann proposait donc, avec une intuition étonnante quand on connaît les possibilités des ordinateurs de 1946, de remplacer l'expérience physique par l'expérience numérique pour étudier les problèmes de mécanique des fluides, tout particulièrement celui de la turbulence. Cette préscience était même plutôt optimiste quand on sait que l'idée de remplacer les expériences faites en soufflerie par des expériences numériques fut reprise par la N.A.S.A. en 1978 (projet de « soufflerie numérique » N.A.S.F.) mais a dû être reportée sine die car les performances des plus puissants calculateurs actuels sont encore insuffisantes, d'un facteur dix environ [33], pour simuler numériquement sans paramétrisation ad hoc des écoulements à grand nombre de Reynolds autour de géométries tridimensionnelles complexes. Cependant les progrès réalisés depuis ces vingt dernières années, aussi bien au niveau des ordinateurs que des algorithmes, sont difficilement imaginables. Un seul exemple suffira à titre d'illustration : pour simuler l'écoulement autour d'une aile d'avion en utilisant les équations de Reynolds (équations de Navier-Stokes moyennées avec une fermeture du premier ordre) il faut actuellement moins d'une demi-heure tandis que la même simulation, tentée il y a vingt ans avec les algorithmes et les ordinateurs de l'époque (du type I.B.M. 704), aurait coûté 10 000 fois plus cher et le calcul d'une seule réalisation de l'écoulement aurait demandé près de 30 ans [34]. Mais l'intérêt de l'approche numérique n'est pas de remplacer l'expérience, ce serait d'ailleurs un programme dangereusement illusoire dans la mesure où le numérique, tout comme la théorie, a besoin de l'expérience de laboratoire pour confirmer ou infirmer ses prédictions, au moins sur quelques cas test. Non, l'intérêt du numérique est d'ouvrir de nouveaux champs d'expérimentation inaccessibles en laboratoire : le numérique ne doit pas remplacer l'approche expérimentale mais lui être complémentaire.

L'étude de la turbulence bidimensionnelle est un cas particulièrement intéres-

sant pour illustrer l'originalité de l'approche numérique en physique. En effet, la turbulence bidimensionnelle est pratiquement inaccessible en laboratoire* car elle se rencontre dans les écoulements atmosphériques et océaniques à grande échelle (et encore n'est-ce là qu'une approximation). Pour l'étudier il faudrait donc se placer à l'échelle planétaire : aussi seul le numérique dans ce cas permet-il d'expérimenter effectivement au lieu de se contenter d'observer. Le numérique apporte une rupture par rapport aux schémas traditionnels dont parle René Thom quand il dit que : « *Du point de vue de l'épistémologue on peut distinguer deux types de disciplines morphologiques. Certaines disciplines sont expérimentales : l'homme peut créer la morphologie étudiée (physico-chimie), ou, à tout le moins, intervenir de manière plus ou moins brutale dans son déroulement (cas de la biologie). D'autres disciplines, par contre, sont de pure observation : l'expérimentation y est impossible, soit en raison de l'éloignement spatial (astronomie) soit en raison de l'éloignement temporel (sciences du passé : géologie, paléontologie, ethnographie, histoire), soit enfin pour des raisons éthiques (phénomènes psychologiques et sociaux)* » [38]. Cette classification doit en effet être élargie, car parmi les sciences dites de pure observation certaines peuvent être également considérées aujourd'hui comme des sciences expérimentales numériques, telles la paléoclimatologie, l'étude des atmosphères planétaires ou celle de l'évolution des galaxies. L'ordinateur permet ainsi de rendre expérimentales des sciences de pure observation.

L'idée de « turbulence bidimensionnelle » fut longue à s'imposer car on pensait la turbulence directement liée à l'étirement des tubes de tourbillon par les gradients de vitesse, mécanisme qui en dimension trois assure le transfert de l'énergie vers les petites échelles dissipatives, mais est inhibé en dimension deux à cause de la conservation du tourbillon. La turbulence bidimensionnelle a cependant en commun avec la turbulence tridimensionnelle la dynamique non linéaire à l'origine du caractère chaotique et imprédicible de sa structure macroscopique. En partant de considérations statistiques au sens de Gibbs (c'est-à-dire construites à partir d'un ensemble de réalisations de l'écoulement étudié) et en supposant que les symétries des équations de Navier-Stokes seraient retrouvées statistiquement à la petite échelle où la turbulence deviendrait homogène, isotrope et autosimilaire (c'est-à-dire présenterait une invariance d'échelle dans la limite des nombres de Reynolds infinis), A.N. Kolmogorov, dans une série d'articles de 1941 [39], [40], [41], établit qu'en dimension trois l'énergie cascade vers la petite échelle et calcule les fonctions de corrélation correspondantes. Il faut ici noter que ce résultat fut trouvé indépendamment par trois autres chercheurs de spécialités et de traditions fort différentes. En effet, dans un article de 1945 [42] le physico-chimiste américain L. Onsager montre que la cascade d'énergie s'effectue selon un spectre en $k^{-5/3}$ (k, nombre d'onde unidimensionnel), et à la fin de la même année C.F. von Weizsäcker et W. Heisenberg, alors détenus dans un camp près de Cambridge, arrivent, chacun de leur côté, aux

* Sauf quelques expériences en cuve tournante [35], dans des écoulements MHD [36] ou dans des films fluides [37], pour lesquelles il est cependant toujours difficile de garantir la bidimensionnalité de l'écoulement à toutes les échelles.

mêmes conclusions qu'ils ne publient qu'en 1948 : le traitement d'Heisenberg [43] est plus formel et analytique tandis que celui de von Weizsäcker [44] est plutôt phénoménologique et se rapporte à des problèmes astrophysiques. Dans un article de revue de 1949 sur les « théories récentes de la turbulence » [45] John von Neumann parle d'ailleurs de la loi de « Kolmogorov-Onsager-Weizsäcker ». Il est regrettable que cette coïncidence ait été quelque peu oubliée depuis et que la loi en $k^{-5/3}$ soit exclusivement attribuée à Kolmogorov qui, ironie du sort, est le seul à ne l'avoir pas exprimée explicitement [46]. Près de vingt ans plus tard R.M. Kraichnan [47], C.E. Leith [48] et G.K. Batchelor [49], en suivant un raisonnement similaire à celui de Kolmogorov, montrèrent qu'en dimension deux il y a, non plus cascade d'énergie, mais cascade d'un second invariant lié à la conservation du tourbillon, l'enstrophie (intégrale du carré du tourbillon), cette fois-ci selon un spectre en k^{-3}. L'énergie pour sa part remonte des échelles d'injection vers les grandes échelles selon un spectre en $k^{-5/3}$, donnant lieu à une « cascade inverse » prévue dès 1953 par R. Fjörtoft [50]. En 1949 L. Onsager [51] avait déjà conjecturé l'apparition d'un « état de température négative » dans un « gaz de vortex » bidimensionnel. Dans un article de 1971 [52] Kraichnan prévoit que les interactions non linéaires s'opèrent de façon non locale dans la cascade d'enstrophie. Aujourd'hui la turbulence bidimensionnelle a acquis droit de cité [53] dans la mesure où elle permet de rendre compte de la dynamique des écoulements atmosphériques à grande échelle, rendus bidimensionnels à cause de la faible épaisseur de l'atmosphère vis-à-vis de son étendue horizontale, de la stratification entretenue par le chauffage radiatif externe et de la rotation planétaire. Elle pourrait permettre en particulier d'expliquer l'origine de la tache rouge de Jupiter [54].

Claude Basdevant [55] a étudié de façon détaillée la turbulence bidimensionnelle en intégrant numériquement l'équation d'Euler (équation de Navier-Stokes dans la limite des nombres de Reynolds infinis), projetée dans le plan sous la forme tourbillon-fonction de courant avec des conditions aux limites périodiques, à l'aide d'un modèle pseudo-spectral. Cette technique numérique, introduite par Steve Orszag en 1972 [56], consiste à calculer les opérateurs différentiels dans l'espace spectral et à effectuer les produits dans l'espace physique, ce qui nécessite deux transformées de Fourier bidimensionnelles pour chacun des champs calculés et ce à chaque pas de temps. Cette méthode n'a été rendue possible que grâce au développement des algorithmes de transformée de Fourier rapide [57], [58], les algorithmes classiques étant beaucoup trop lents pour effectuer un grand nombre de transformées. Le modèle de Claude Basdevant utilise une maille de calcul de 128 points par 128 et l'effet des petites échelles dissipatives est modélisé par un opérateur laplacien itéré ($- \nu (- \pm)^8$, ν viscosité cinématique) ayant une action locale à la fois dans l'espace physique et dans l'espace spectral, donc très sélectif en nombre d'onde. Les simulations ont été effectuées à l'École Polytechnique sur le calculateur vectoriel AP 120 du Laboratoire de Météorologie Dynamique qui leur est entièrement consacré, ce qui a permis d'entreprendre un grand nombre d'expériences numériques. Les premières ont porté sur l'étude du régime de décroissance de la turbulence libre : après avoir excité l'écoulement à une certaine échelle (échelle d'injection) à l'instant initial on laisse la turbulence agir jusqu'à

ce que l'énergie soit totalement dissipée par la viscosité. La pente des spectres obtenus varie entre k^{-3} et k^{-4}. Les expériences suivantes ont permis d'étudier les états de régime de la turbulence forcée : dans ce cas, on entretient l'excitation initiale tout au long de l'expérience jusqu'à atteindre un régime statistiquement stationnaire. On obtient alors des spectres plus pentus pouvant aller jusqu'à k^{-6}. Ces deux premières séries d'expériences ont permis de dégager les conclusions suivantes :

1. La turbulence bidimensionnelle produit bien une zone inertielle où le spectre varie selon une loi de puissance, toutefois la pente trouvée (comprise entre k^{-4} et k^{-6}) est non universelle et généralement plus grande que celle prévue (k^{-3}) par la théorie de Kraichnan de 1967 [47] ;

2. Il y a bien cascade d'enstrophie sans transfert d'énergie dans la zone inertielle allant de l'échelle d'injection à l'échelle de dissipation ;

3. On observe bien une remontée de l'énergie (cascade inverse) de la zone d'injection vers la grande échelle de l'écoulement, qui se caractérise par la coalescence de tourbillons deux à deux pour en former de plus grands.

Si ces résultats semblent confirmer qualitativement la théorie de la turbulence homogène isotrope en dimension deux élaborée par Kraichnan, ils en diffèrent quantitativement dans la mesure où les spectres trouvés sont plus « pentus » que ceux proposés par cette théorie. Dans un article de 1981 [59], C. Basdevant, B. Legras, R. Sadourny et M. Béland ont proposé d'expliquer ceci par une intermittence spatio-temporelle de l'écoulement : quand on considère une réalisation de l'écoulement, les structures actives, au lieu d'être uniformément distribuées seraient concentrées dans une petite fraction de l'espace-temps dont le volume diminuerait avec l'échelle, et à la limite la dissipation n'agirait plus que sur un ensemble fractal de points. Des idées comparables avaient été proposées par B. Mandelbrot en 1976 [60] puis par U. Frisch, P.L. Sulem et M. Nelkin [61] dans le cas de la turbulence tridimensionnelle. Cette théorie de l'intermittence spatio-temporelle en dimension deux conduit bien à des spectres plus pentus, et elle restaure également la localité des transferts non linéaires dans la cascade d'enstrophie ce qui contredit la théorie de Kraichnan de 1971 [52]. Différentes expériences ont ensuite été effectuées en imposant à l'écoulement une rotation différentielle, ce qui crée des ondes de Rossby et induit une anisotropie à la grande échelle. L'analyse des états de régime obtenus a permis de vérifier les prédictions de Rhines [62] décrivant l'effet des ondes de Rossby sur la turbulence : l'écoulement est dominé à grande échelle par un régime d'ondes qui bloque la remontée de l'énergie tandis que la turbulence agit à la petite échelle. On constate également que l'anisotropie induite par les ondes est transportée jusqu'aux échelles dissipatives par interactions non linéaires et non locales à travers la cascade d'enstrophie, phénomène prédit par Holloway [63] et Herring [64]. Si cette anisotropie des petites échelles était confirmée par des expériences à plus haute résolution ceci remettrait en cause, dans le cas de la turbulence soumise à un forçage anisotrope à grande échelle (en particulier pour les écoulements cisaillés), l'hypothèse d'isotropie à la base de l'interprétation statistique actuelle.

On peut également étudier la prédictibilité de ce type d'écoulement en effectuant plusieurs expériences numériques en parallèle, qui ne diffèrent dans

leur état initial que par les petites échelles artificiellement décorrélées, ce qui permet de suivre la remontée de l'erreur initiale à travers le spectre au cours du temps. Ces expériences montrent que la rotation différentielle augmente le temps de prédicibilité des écoulements bidimensionnels grâce à la propagation des ondes de Rossby, ce qui peut avoir des conséquences importantes quant à la prédicibilité de l'écoulement atmosphérique terrestre. Pour regarder celle-ci de façon détaillée il faudrait réaliser de nouvelles expériences numériques afin de tester également l'incidence de la compressibilité, de la topographie ainsi que des effets baroclines sur la prédicibilité atmosphérique. Très récemment, Marc-Étienne Brachet [65], [66], de l'Observatoire de Nice, a effectué de nouvelles simulations numériques de la turbulence bidimensionnelle incompressible sans forçage. En profitant des symétries de l'écoulement qu'il étudie (le vortex de Taylor-Green) et grâce à l'emploi du Cray du C_2VR (Centre de Calcul Vectoriel pour la Recherche), il a pu atteindre des résolutions sensiblement plus élevées que celles de Claude Basdevant en effectuant ces calculs à partir de maillages allant jusqu'à 1024 par 1024 points. Ses résultats montrent que, dans les premiers instants, c'est-à-dire jusqu'à ce que la dissipation d'enstrophie devienne maximale, le spectre d'enstrophie a une pente en k^{-4}, puis au-delà celle-ci s'établit rapidement autour de $k^{-3\pm0.1}$, valeur qui confirmerait, dans le cas de la turbulence libre, les prédictions de la théorie de Kraichnan de 1967 [47]. Il s'est également intéressé à l'étude de la topologie des structures dissipatives qui apparaissent à la petite échelle. On sait que la structure détaillée d'un écoulement turbulent est très difficile à visualiser expérimentalement, sinon de façon ponctuelle, et seul le numérique permet d'accéder à la morphologie, à la fois globalement et jusqu'à la plus petite échelle calculée. Marc-Etienne Brachet a ainsi pu mettre en évidence une topologie non triviale de la turbulence bidimensionnelle à petite échelle, faite de structures repliées, feuilletées, où apparaissent des reconnections de lignes de tourbillon, et il a observé que la dissipation se concentre sur un objet fractal de codimension 0,4. Cette étude montre que la dissipation joue probablement un rôle beaucoup plus complexe que celui qu'on lui assigne classiquement et semble confirmer l'hypothèse de C. Basdevant, B. Legras, R. Sadourny et M. Béland concernant l'intermittence des structures dissipatives en dimension deux.

L'étude numérique de la turbulence bidimensionnelle pose un problème méthodologique complexe dont parle Claude Basdevant dans l'introduction de sa thèse [55] : « *Partant du besoin de modélisation numérique de la dynamique atmosphérique, cette étude est devenue tout à la fois l'étude de la turbulence en dimension deux au moyen de la simulation et l'étude de la simulation numérique de la turbulence bidimensionnelle ; la définition de l'outil simulation numérique étant indissociable de la connaissance de l'objet d'étude : la turbulence. En effet la non linéarité fondamentale des équations de Navier-Stokes interdit pratiquement une connaissance analytique de ses solutions et le théoricien de la turbulence est ramené à proposer des conjectures basées pour la plupart sur des considérations phénoménologiques. D'autre part, cette non linéarité invalide les schémas classiques de simulation numérique faute de pouvoir inclure dans les modèles numériques un nombre suffisant de degrés de liberté. On se trouve alors confronté au cercle vicieux suivant : le théoricien de la turbulence attend de la simulation numérique qu'elle teste*

les conjectures qu'il propose, alors que le numéricien lui s'appuie sur les conjectures théoriques pour améliorer les schémas. Il est clair que ce problème ne peut être résolu que par une démarche de concert entre le théoricien et le numéricien ». C'est la démarche « synergétique » préconisée par Ulam [67] et Zabusky [68]. En fait le même rapport dialectique, ou « cercle vicieux », existe entre le théoricien et l'expérimentateur : le théoricien attend de l'expérimentateur qu'il teste les conjectures qu'il propose, alors que l'expérimentateur lui s'appuie sur les conjectures théoriques pour guider ses recherches et améliorer ses méthodes. La physique n'a évolué jusqu'à présent que par une démarche de concert entre la théorie et l'expérience. L'approche numérique quant à elle ne serait qu'une nouvelle forme d'expérience, plus proche des équations que des phénomènes.

La simulation de la turbulence bidimensionnelle pose un second problème méthodologique propre au calcul de n'importe quel écoulement turbulent : comment peut-on prédire le comportement d'un système chaotique et quelle valeur accorder aux solutions quand on sait que le système présente une sensibilité par rapport aux conditions inititales ? Ce comportement a été mis en évidence par Lorenz [69], [70], [71] et Robinson [72] qui ont montré qu'une erreur initiale, aussi minime soit-elle, affectant la petite échelle d'un écoulement turbulent est amplifiée au point de modifier, au bout d'un temps fini appelé temps de prédicibilité, la dynamique de l'écoulement à toutes les échelles. Maxwell avait pressenti ce comportement et Poincaré en 1912, dans l'introduction de son traité sur le calcul des probabilités [73], en parlait déjà très clairement : « *Une cause très petite qui nous échappe détermine un effet considérable que nous ne pouvons pas ne pas voir, et alors nous disons que cet effet est dû au hasard. Si nous connaissions exactement les lois de la nature et la situation de l'univers à l'état initial, nous pourrions prédire exactement la situation de ce même univers à un instant ultérieur. Mais, lors même que les lois naturelles n'auraient plus de secret pour nous, nous ne pourrions connaître la situation qu'approximativement. Si cela nous permet de prévoir la situation ultérieure avec la même approximation, c'est tout ce qu'il nous faut, nous disons que le phénomène a été prévu, qu'il est régi par des lois ; mais il n'en est pas toujours ainsi, il peut arriver que de petites différences dans les conditions initiales en engendrent de très grandes dans les phénomènes finaux ; une petite erreur sur les premières produirait une erreur énorme sur les dernières. La prédiction devient impossible.* » Ainsi, si l'on voulait garantir une prédiction déterministe pour tout temps, faudrait-il avoir une connaissance parfaite des conditions initiales à toutes les échelles et une précision infinie des calculs, ce qui est impossible aussi bien analytiquement que numériquement. Toutefois on constate, expérimentalement et numériquement, que les écoulements turbulents, bien qu'instables vis-à-vis des perturbations d'une réalisation, sont stables vis-à-vis des perturbations des propriétés statistiques d'un ensemble de réalisations. C'est cette stabilité statistique de la turbulence qui permet de justifier les intégrations bien au-delà du temps de prédicibilité. La simulation numérique directe (c'est-à-dire sans hypothèse de fermeture ou paramétrisation ad hoc) des équations de Navier-Stokes permet donc de prédire le comportement d'un écoulement turbulent, de façon déterministe et quantitative jusqu'à un temps limite appelé temps de prédicibilité (qui dépend des erreurs d'arrondi, des erreurs de

discrétisation et des erreurs faites dans la détermination des conditions initiales), puis de façon statistique et qualitative pour des temps plus longs.

La simulation numérique se situe à mi-chemin entre la théorie et l'expérience sans pour autant se substituer à l'une ou à l'autre. Théorie, simulation et expérience sont entre elles dans un rapport d'interdépendance. Tout comme une expérience a besoin d'une théorie pour être interprétée et une théorie a besoin d'une expérience pour être réfutée (d'aucuns diraient falsifiée), de même une simulation numérique a besoin d'un modèle théorique pour sa formulation et de résultats expérimentaux pour sa validation. En retour elle peut enrichir l'intuition des théoriciens en leur permettant d'envisager un grand nombre de cas, de résoudre des calculs trop complexes analytiquement et de présenter les résultats sous une forme graphique plus synthétique. Aux expérimentateurs, elle apporte la possibilité d'étudier le comportement d'un système en faisant varier un paramètre indépendamment de tous les autres, de connaître la valeur des champs en tous points d'un domaine et de visualiser des phénomènes trop fins, trop rapides ou trop éloignés pour être observés par les moyens conventionnels. Nous pensons que la simulation numérique réintroduit en physique, mais à une nouvelle échelle, la notion classique d' « expérience de pensée » (« Gedankenexperiment »), au même sens que celles de Lucrèce, Bruno, Galilée, Einstein ou Bohr : en raisonnant à partir d'une expérience « imaginaire » on essaie de prévoir des comportements susceptibles de mettre en défaut la théorie dans ses principes. Ainsi l'expérience numérique de Fermi-Pasta-Ulam a-t-elle remis en cause l'hypothèse ergodique à la base de la mécanique statistique. L'approche numérique doit également permettre d'extraire la phénoménologie qui se trouve encore cachée dans les équations fondamentales et servir par là-même à valider des modèles simplifiés : par exemple la résolution numérique de l'équation de Newton dans le cas à plusieurs corps pour étudier la formation des galaxies ou la stabilité du système solaire, de l'équation de Schrödinger dans les cas à plusieurs atomes pour calculer les orbitales des corps composés ou étudier le comportement des verres de spin, la résolution numérique de l'équation de Navier-Stokes à un grand nombre de degrés de liberté pour mieux comprendre les turbulences bidimensionnelle et tridimensionnelle.

L'expérimentation numérique est donc une troisième voie de recherche dont la spécificité est l'utilisation heuristique de l'ordinateur. Cette nouvelle approche est distincte, dans ses méthodes et dans son statut, de la théorie comme de l'expérience. Kenneth Wilson [74] raconte que : *« Dans les années soixante la plupart des scientifiques pensaient qu'un bon théoricien, en s'asseyant devant une console d'ordinateur, devait pouvoir produire instantanément de la bonne science. On ne réalisait pas qu'avant d'obtenir des résultats respectables, il fallait une longue et difficile période de formation pour surmonter les contraintes très sévères qu'imposent les ordinateurs (quelle que soit leur puissance). Un gros calcul numérique est aussi difficile à réussir qu'une bonne expérience ou qu'un calcul analytique qui aboutit à un bon résultat [..]. Depuis trois siècles les étudiants sont formés à l'expérience et à la théorie ; les meilleurs sont sélectionnés et eux seuls peuvent poursuivre ; un système analogue doit maintenant être mis en place pour la simulation numérique. Cela ne sera pas facile, et les étudiants comme les professeurs*

devraient faire beaucoup de simulations qui ne débouchent sur rien avant que l'effort de formation ne porte ses fruits. » En effet, le numérique a sa propre pratique, difficilement transmissible. N.J. Zabusky [68] parle d'un « *style de calcul numérique synergétique* » et il précise : « *J'ai constaté en faisant des exposés sur ce sujet qu'il est difficile d'expliquer ce mode de travail. Peut-être est-ce encore une forme d'art comprise par quelques pratiquants habitués à l'environnement informatique et apprise seulement par apprentissage.* » Cette impression est confirmée par P.J. Roache qui, dans l'introduction de son ouvrage de référence sur la simulation numérique [29], précise : « *Le nouvel arrivant dans le domaine de la mécanique des fluides numérique doit être averti : il y a là au moins autant de savoir-faire d'artisan (artistry) que de science.* » De même E. Turkel sans sa revue des « progrès en physique numérique » [75] publiée en 1983 affirme : « *La simulation numérique relève au moins autant de l'art que de la science, avec une bonne part d'intuition et de folklore.* » N'est-ce là que péché de jeunesse ou est-ce intrinsèquement lié à la démarche numérique ? Ne serait-ce pas plutôt le propre de tout domaine de recherche non encore ossifié ? Nous pensons que c'est en gardant et en affirmant leur identité propre que théoriciens, expérimentateurs et numériciens contribueront le mieux à leur entreprise commune, à savoir l'évolution des concepts et l'explication des phénomènes, ceci sur la base d'un échange aussi interactif que possible. En fait cette « différentiation des espèces » ne devrait pas nous étonner, car la ramification entre théoriciens et expérimentateurs, tout comme celle opérée entre mathématiciens et physiciens, est récente dans notre histoire. En dernier recours le choix de la voie numérique ne devrait-il pas être, comme ailleurs, affaire de goût, de sensibilité personnelle et pourquoi pas de vocation ?

> « Ces systèmes de courbes, ces nuages de points évoquent parfois des galaxies, ou des feux d'artifice, et parfois de bien étranges floraisons. C'est tout un monde de formes qui restent à explorer et d'harmonies qui restent à découvrir. »
>
> David RUELLE.

RÉFÉRENCES

[1] BABBAGE, C., A note respecting the application of machining to the calculation of astronomical tables. Memories of the Astronomical Society, Vol. 1, p. 309 (1822).

[2] SHEPPARD, W.F., Central difference formulae. Proceedings of the Mathematical Society, Vol. 21 (1899).

[3] RICHARDSON, L.F., The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations. Philosophical Transactions, serie A, Vol. 210, pp. 307-357 (1910).

[4] RICHARDSON, L.F., Weather prediction by numerical process. Cambridge University Press (1922).

[5] O'BRIEN, G.G., HYMAN, M.A., KAPLAN, S., A study of numerical solution of partial differential equations. Journal of Mathematics and Physics, Vol. 29, pp. 223-251 (1950).

[6] COURANT, R., FRIEDRICHS, K., LEWY, H., Uber die Partiellen Differenzengleichurgen der Mathematischen Physik. Mathematik Annalen, Vol. 100, pp. 32-74 (1928). Traduction publiée dans I.B.M. Journal of Research Development, Vol. 11, pp. 215-234 (1967).
[7] ULAM, S.M., The adventures of a mathematician. Scribners (1976).
[8] VON NEUMANN, J., First report on the numerical calculation of flow problems. Rapport pour la Standard Oil Company, non publié. Publié dans les Œuvres Complètes de J. Von Neumann, Vol. 5, pp. 664-750. Pergamon Press (1961).
[9] VON NEUMANN, J. et RICHTMYER, R.D., A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks. Journal of Applied Physics, Vol. 21, n° 3, 232-237 (1950). Publié dans les Œuvres Complètes de J. Von Neumann, Vol. 6, pp. 380-385. Pergamon Press (1961).
[10] CHARNEY, J.G., FJÖRTOFT, R. et VON NEUMANN, J., Numerical integration of the barotropic vorticity equation. Publié dans les Œuvres Complètes de J. Von Neumann, Vol. 6, pp. 413-430. Pergamon Press (1961).
[11] FERMI, E. et VON NEUMANN, J., Taylor instability at the boundary of two incompressible liquids. Los Alamos Report AECU-2979, non publié (1953). Publié dans les Œuvres Complètes de J. Von Neumann, Vol. 6, pp. 431-434. Pergamon Press (1961).
[12] FERMI, E., PASTA, J.R. et ULAM, S.M., Studies on nonlinear problems. Los Alamos Report La-1940, non publié (1955). Publié dans les Œuvres Complètes d'E. Fermi, Vol. II, pp. 978-988. University of Chicago Press (1965).
[13] KRUSKAL, M.D., Some unsolved mathematical problems. Séminaire donné au Plasma Physics Laboratory de Princeton (1960).
[14] ZABUSKY, N.J., Exact solution for the vibrations of a nonlinear continuous model string. Journal of Mathematical Physics, Vol. 3, pp. 1028-1039 (1962).
[15] KRUSKAL, M.D., The birth of soliton. Non linear evolution equations solvable by the spectral transform, pp. 1-8. Pitman (1978).
[16] THOM, R., Stabilité structurelle et Morphogenèse. Benjamin (1972).
[17] LERAY, J., Étude de diverses équations intégrales non-linéaires et de quelques problèmes que pose l'hydrodynamique. Journal de Mathématiques Pures et Appliquées, Vol. 12, pp. 1-82 (1933).
[18] LERAY, J., Essai sur les mouvements plans d'un liquide visqueux qui limite des parois. Journal de Mathématiques Pures et Appliquées, Vol. 13, pp. 131-418 (1934).
[19] LERAY, J., Essai sur le mouvement d'un liquide visqueux emplissant l'espace. Acta Mathematica, Vol. 63, pp. 193-248 (1934).
[20] ROSE, H.A. et SULEM, P.L., Fully developed turbulence and statistical mechanics. Le Journal de Physique, Vol. 39, n° 5, pp. 441-484 (1978).
[21] FRISCH, U., Fully developed turbulence, singularities and intermittency. 'Les Houches Summer School 1981: Chaotic behaviour in deterministic system'. North Holland.
[22] TEMAM, R., Navier Stokes equation. North Holland (1977).
[23] LADYZHENSKAYA, O.A., The mathematical theory of viscous incompressible flow. Gordon and Breach (1963).
[24] LIONS, J.L., Quelques méthodes de résolution des problèmes aux limites non-linéaires. Dunod-Gauthier Villars (1969).
[25] SULEM, C. et SULEM, P.L., The well-posedeness of the two-dimensional ideal flow. Le Journal de Mécanique Appliquée, numéro spécial sur la turbulence bidimensionnelle, pp. 217-242.
[26] SULEM, C., SULEM, P.L., FRISCH, H., Tracing complex singularities with spectral methods. Journal of Computational Physics, Vol. 50, pp. 138-161 (1983).
[27] FARGE, M., Instabilités numériques ou instabilités hydrodynamiques? École d'Été sur les « Instabilités hydrodynamiques en astrophysique ». Goutelas (1983).
[28] RICHTMYER, R.D. et MORTON, K.W., Difference methods for initial-value problems. Interscience Publishers (1957).
[29] ROACHE, P.J., Computational Fluid Dynamics. Hermosa Publishers (1972).
[30] Dictionnaire de l'Académie Française. Septième édition. Firmin-Didot (1879).

[31] SERRES, M., La naissance de la physique dans le texte de Lucrèce, fleuves et turbulences. Éditions de Minuit (1977).
[32] GOLDSTINE, H.M. et VON NEUMANN, J., On the principles of large scale computing machines. Non publié (1946). Publié dans les Œuvres Complètes de J. Von Neumann, Vol. 5, pp. 1-32. Pergamon Press (1961).
[33] LAX, P.D., Large scale computing in science and engineering. Rapport DOD-NSF (1982).
[34] CHAPMAN, D.R., Computational aerodynamics development and outlook. Dryden Lecture. American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal, Vol. 17, n° 12, pp. 1293-1313 (1979).
[35] HOPFINGER, E.J., The structure of turbulence in homogeneous and stratified rotating fluids. Journal de Mécanique, numéro spécial sur la Turbulence Bidimensionnelle, pp. 21-44 (1983).
[36] SOMMERIA, J., Two-dimensional behaviour of MHD fully developped turbulence ($Rm \gg 1$). Journal de Mécanique, numéro spécial sur la Turbulence Bidimensionnelle, pp. 169-190 (1983).
[37] COUDERC, Y., Two-dimensional turbulence in a laboratory experiment. Article à paraître.
[38] THOM, R., Modèles mathématiques de la Morphogenèse. Collection 10-18, Union Générale d'Éditions (1974).
[39] KOLMOGOROV, A.N., The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers. Comptes rendus de l'Académie des Sciences d'U.R.S.S., Vol. 30, pp. 301-305 (1941).
[40] KOLMOGOROV, A.N., On degeneration of isotropic turbulence in incompressible viscous liquid. Comptes rendus de l'Académie des Sciences d'U.R.S.S., Vol. 31, pp. 538-540 (1941).
[41] KOLMOGOROV, A.N., Dissipation of energy in locally isotropic turbulence. Comptes rendus de l'Académie des Sciences d'U.R.S.S., Vol. 32, pp. 16-18 (1941).
[42] ONSAGER, L., The distribution of energy in turbulence. Physical Review, Vol. 68, p. 286 (1945).
[43] HEISENBERG, W., Zur statistichen Theorie der Turbulenz. Zeitschrift für Physik, Vol. 124, pp. 628-657 (1948).
[44] VON WEIZSACKER, C.F., Das Spektrum der Turbulenz bei grossen Reynoldschen Zahlen. Zeitschrift für Physik, Vol. 124, pp. 614-627 (1948).
[45] VON NEUMANN, J., Recent theories of turbulence. Non publié (1949). Publié dans les Œuvres Complètes de J. Von Neumann, Vol. 6, pp. 437-472. Pergamon Press (1961).
[46] BATTINELLI, G. et VULPIANI, A., Kolmogorov, Heisenberg, Von Weizsäcker, Onsager: un caso di scoperta simultanea. Atti del III Congresso nazionale di storia della Fisica, Palermo (1982).
[47] KRAICHNAN, R.H., Inertial ranges in two-dimensional turbulence. Physics of Fluids, Vol. 10, pp. 1417-1423 (1967).
[48] LEITH, C.E., Diffusion approximation for two-dimensional turbulence. Physics of Fluids, Vol. 11, pp. 617-673 (1968).
[49] BATCHELOR, G.K., Computation of the energy spectrum in homogeneous two-dimensional turbulence. Physics of Fluids, Supplement II, pp. 233-239 (1969).
[50] FJÖRTOFT, R., On the changes in the spectral distribution of kinetic energy for two dimensional, non divergent flow. Tellus, Vol. 5, pp. 225-230 (1953).
[51] ONSAGER, L., Statistical hydrodynamics. Supplément du Nuovo Cimento, Vol. 6, pp. 279-287 (1949).
[52] KRAICHNAN, R.H., Inertial range transfer in two and three dimensional turbulence. Journal of Fluid Mechanics, Vol. 47, pp. 525-535 (1971).
[53] KRAICHNAN, R.H. et MONTGOMERY, D., Two-dimensional turbulence. Reports on Progress in Physics, Vol. 43, pp. 547-619 (1980).
[54] MAXWORTHY, T. et REDEKOPP, L.G., Possible fluid dynamical interpretation of some reported features in the Jovian atmosphere. Science, Vol. 210, pp. 1350-1351 (1980).

[55] BASDEVANT, C., Contribution à l'étude numérique et théorique de la turbulence bidimensionnelle. Thèse d'état (1981).
[56] ORSZAG, S.A., Numerical simulation of incompressible flows within simple boundaries. Studies in Applied Mathematics, Vol. 50, pp. 293-327 (1971).
[57] COOLEY, J.W. et TUKEY, J.W., An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series. Mathematics of Computation, Vol. 19, pp. 297-301 (1965).
[58] TEMPERTON, C., Very fast real Fourier transforms. Special Topics of Applied Mathematics, pp. 165-171 North-Holland (1980).
[59] BASDEVANT, C., LEGRAS, B., SADOURNY, R. et BELAND, M., A study of barotropic model flows: intermittency, waves and predictability. Journal of Atmospheric Sciences, Vol. 38, n° 11 (1981).
[60] MANDELBROT, B., Intermittent turbulence and fractal dimension: kurtosis and the spectral exponent 5/3 + B. Turbulence and Navier-Stokes equation. Lecture Notes in Mathematics, Vol. 565, pp. 121-145 (1976).
[61] FRISCH, U., SULEM, P.L., NELKIN, M., A simple dynamical model of intermittent fully developed turbulence. Journal of Fluid Mechanics, Vol. 87, pp. 719-736 (1978).
[62] RHINES, P., Waves and turbulence on a beta-plane. Journal of Fluid Mechanics, Vol. 69, pp. 417-443 (1978).
[63] HOLLOWAY, G., On the spectral evolution of strongly interacting waves. Geophysical and Astrophysical Fluid Dynamics, Vol. 11, pp. 271-287 (1979).
[64] HERRING, J.R., Theory of two-dimensional anisotropic turbulence. Journal of Atmospheric Sciences, Vol. 32, pp. 2254-2271 (1975).
[65] BRACHET, M.E., Simulation numérique directe d'écoulements turbulents tridimensionnels. Thèse d'état (1983).
[66] BRACHET, M.E., FRISCH, U., SULEM, P.L., Communications privées. Août-septembre 1983.
[67] ULAM, S.M., Computing machines as a heuristic aid-synergesis. A collection of mathematical problems, Chap. 7, Sect. 10. Wiley-Interscience (1960).
[68] ZABUSKY, N.J., Computational synergetics and mathematical innovation. Journal of Computational Physics, Vol. 43, pp. 195-249 (1981).
[69] LORENZ, E.N., The predictability of a flow which possesses many scales of motion. Tellus, Vol. 21, pp. 289-307 (1969).
[70] LORENZ, E.N., Three approaches to atmospheric predictability. Bulletin of American Meteorological Society, Vol. 50, pp. 345-349 (1969).
[71] LORENZ, E.N., Atmospheric predictability as revealed by naturally occuring analogues. Journal Atmospheric Sciences, Vol. 26, pp. 636-646 (1969).
[72] ROBINSON, G.D., The predictability of a dissipative flow. Quarterly Journal Royal Meteorological Society, Vol. 97, pp. 300-312 (1971).
[73] POINCARÉ, H., Calcul des probabilités. Gauthier-Villars (1912).
[74] WILSON, R., Quelle informatique pour la science ? La Recherche, Vol. 14, pp. 1004-1007 (1983).
[75] TURKEL, E., Progress in computational physics. Computers and Fluids, Vol. 11, n° 2, pp. 121-144 (1983).

[55] BASDEVANT, C., Contribution à l'étude numérique et théorique de la turbulence bidimensionnelle. Thèse d'état (1981).
[56] ORSZAG, S.A., Numerical simulation of incompressible flows within simple boundaries. Studies in Applied Mathematics, Vol. 50, pp. 293-327 (1971).
[57] COOLEY, J.W. et TUKEY, J.W., An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series. Mathematics of Computation, Vol. 19, pp. 297-301 (1965).
[58] TEMPERTON, C., Very fast real Fourier transforms. Special Topics of Applied Mathematics, pp. 165-171 North-Holland (1980).
[59] BASDEVANT, C., LEGRAS, B., SADOURNY, R. et BELAND, M., A study of barotropic model flows: intermittency, waves and predictability. Journal of Atmospheric Sciences, Vol. 38, n° 11 (1981).
[60] MANDELBROT, B., Intermittent turbulence and fractal dimension: kurtosis and the spectral exponent 5/3 + B. Turbulence and Navier-Stokes equation. Lecture Notes in Mathematics, Vol. 565, pp. 121-145 (1976).
[61] FRISCH, U., SULEM, P.L., NELKIN, M., A simple dynamical model of intermittent fully developed turbulence. Journal of Fluid Mechanics, Vol. 87, pp. 719-736 (1978).
[62] RHINES, P., Waves and turbulence on a beta-plane. Journal of Fluid Mechanics, Vol. 69, pp. 417-443 (1978).
[63] HOLLOWAY, G., On the spectral evolution of strongly interacting waves. Geophysical and Astrophysical Fluid Dynamics, Vol. 11, pp. 271-287 (1979).
[64] HERRING, J.R., Theory of two-dimensional anisotropic turbulence. Journal of Atmospheric Sciences, Vol. 32, pp. 2254-2271 (1975).
[65] BRACHET, M.E., Simulation numérique directe d'écoulements turbulents tridimensionnels. Thèse d'état (1983).
[66] BRACHET, M.E., FRISCH, U., SULEM, P.L., Communications privées. Août-septembre 1983.
[67] ULAM, S.M., Computing machines as a heuristic aid-synergesis. A collection of mathematical problems, Chap. 7, Sect. 10. Wiley-Interscience (1960).
[68] ZABUSKY, N.J., Computational synergetics and mathematical innovation. Journal of Computational Physics, Vol. 43, pp. 195-249 (1981).
[69] LORENZ, E.N., The predictability of a flow which possesses many scales of motion. Tellus, Vol. 21, pp. 289-307 (1969).
[70] LORENZ, E.N., Three approaches to atmospheric predictability. Bulletin of American Meteorological Society, Vol. 50, pp. 345-349 (1969).
[71] LORENZ, E.N., Atmospheric predictability as revealed by naturally occuring analogues. Journal Atmospheric Sciences, Vol. 26, pp. 636-646 (1969).
[72] ROBINSON, G.D., The predictability of a dissipative flow. Quarterly Journal Royal Meteorological Society, Vol. 97, pp. 300-312 (1971).
[73] POINCARÉ, H., Calcul des probabilités. Gauthier-Villars (1912).
[74] WILSON, R., Quelle informatique pour la science ? La Recherche, Vol. 14, pp. 1004-1007 (1983).
[75] TURKEL, E., Progress in computational physics. Computers and Fluids, Vol. 11, n° 2, pp. 121-144 (1983).