Avant-propos

« Il passait les nuits et les jours
A compter, calculer, supputer sans relâche,
Calculant, supputant, comptant comme à la tâche ;
Car il trouvait toujours du mécompte à son fait. »
Jean de La Fontaine
(*Le Thésauriseur et le Singe*, Livre XII, Fable 3)

Cet ouvrage trouve son inspiration dans une série de cours de natures et de niveaux différents et consacrés à des aspects variés du calcul scientifique. Il doit donc beaucoup à la motivation des étudiants des universités de Nice et de Lille et aux élèves de l'Ecole normale supérieure. Les choix de rédaction adoptés dans ce livre s'appuient aussi sur l'expérience d'une longue participation au jury de l'agrégation et notamment à l'épreuve de modélisation. D'ailleurs, une partie substantielle des exemples qui illustrent la mise en œuvre des techniques numériques est directement issue des textes rendus publics par le jury du concours (voir http ://agreg.org) et une partie de ce cours a servi de base pour une série d'interventions dans le cadre de la préparation à l'agrégation marocaine. Cependant, certaines problématiques évoquées dans ce livre vont bien au-delà des attendus de ce concours. C'est le cas par exemple des développements assez poussés sur le traitement des problèmes hamiltoniens, la distinction fine entre les méthodes « différences finies » et « volumes finis », ou la discussion sur les problèmes hyperboliques non linéaires, cette dernière suivant en partie un cours réalisé dans le cadre de l'IFCAM (*Indo-French Centre for Applied Mathematics*) à Bangalore. On y voit à l'œuvre un ensemble technique relativement sophistiqué : cette marche de niveau se justifie par l'importance pratique de ces questions. Elle donne un aperçu pertinent à ceux qui voudraient en savoir plus et les prépare à la lecture d'ouvrages plus avancés et spécialisés.

Les cours d'analyse numérique ou de calcul scientifique sont souvent considérés comme un peu effrayants. Cette réserve est souvent liée au fait que le sujet combine plusieurs difficultés :

– les problèmes auxquels on s'intéresse sont très fortement motivés par un contexte applicatif (en physique, biologie, ingénierie ou... finance pour donner des exemples). La discussion ne peut donc pas être restreinte au champ purement mathématique et l'intuition est très fortement guidée par les spécificités de l'application. Le sujet réclame donc une certaine culture scientifique, débordant la simple dextérité technique ;

– l'analyse numérique fait appel à un très large bagage technique. C'est un sujet que l'on ne peut pas aborder en se contentant d'une boîte à outils réduite et balisée *a priori*. Au contraire, il faut piocher parmi différents domaines des mathématiques[1], parfois de manière un peu inattendue, par exemple en allant chercher des arguments d'algèbre linéaire pour analyser le comportement d'approximations numériques d'équations différentielles. Cet aspect un peu déroutant donne cependant son sel au sujet ;

– enfin, il est souvent difficile de dégager un énoncé ou une conclusion nette. Par exemple, si l'on peut démontrer que plusieurs schémas numériques produisent une solution approchée qui « converge » effectivement (lorsque l'on fait évoluer les paramètres numériques) vers la solution du problème auquel on s'intéresse, en pratique certaines méthodes s'avérent plus adaptées que d'autres, sur des critères qualitatifs qu'il n'est pas toujours évident de formaliser ou bien le choix de la méthode dépend des critères que l'on estime les plus importants à satisfaire pour le contexte applicatif visé. Beaucoup de questions n'ont pas non plus de réponses définitives et tranchées. A la question « que faut-il faire ? » la réponse est bien souvent « ça dépend » : simuler numériquement, par des calculs confiés à un ordinateur, un phénomène physique complexe est un véritable art, délicat et subtil. Cet art doit s'appuyer sur une forte maîtrise technique des outils mathématiques et une compréhension profonde des phénomènes physiques sous-jacents.

Le parti-pris de ce livre est d'affronter pleinement ces difficultés et, à dessein, de « tout mélanger ». On trouvera donc de nombreux énoncés classiques d'analyse ou d'algèbre, le détail de certains algorithmes de résolutions d'équations, des exemples issus des sciences et des techniques et des illustrations numériques. Certains outils « théoriques » seront introduits au détour de l'étude d'un exemple applicatif... quitte à resservir dans un tout autre contexte. Néanmoins, le document suit une certaine

1. La citation suivante est assez éloquente : « [...] en France, il y avait même un snobisme des mathématiques pures : quand on remarquait un élève doué, on lui disait : "Faites donc une thèse de mathématiques pures." En revanche, on conseillait à un élève quelconque de faire plutôt des mathématiques appliquées, en pensant : "C'est tout ce qu'il est capable de faire !" Or c'est l'inverse qui est vrai : on ne peut pas faire de mathématiques appliquées si l'on ne sait pas d'abord faire de bonnes mathématiques pures. » J.A. Dieudonné [SCH 90, p. 104].

structure, organisée autour de trois grands chapitres, orientés sur la résolution numérique d'équations différentielles (ordinaires ou aux dérivées partielles). Un premier chapitre aborde la résolution des équations différentielles ordinaires, avec de très larges rappels sur les bases théoriques qu'il est indispensable de connaître (théorème de Cauchy-Lipschitz, analyse qualitiative, problèmes linéaires, etc.). On y détaille l'analyse des schémas classiques (schémas d'Euler explicite et implicite) et on y distingue diverses notions de stabilité, plus ou moins pertinentes suivant le contexte. Cet ensemble est illustré par une série d'exemples, motivés notamment par la description de systèmes biologiques. Une large section, avec un contenu technique assez conséquent, est consacrée au cas particulier des systèmes hamiltoniens. Le second chapitre traite de la résolution numérique de problèmes aux limites elliptiques, là encore avec une mise en place détaillée des outils d'analyse fonctionnelle de base. Bien que le propos se restreigne essentiellement à la dimension un et au problème modèle $\lambda u(x) - \frac{\partial}{\partial x}\big(k(x)\frac{\partial}{\partial x}u(x)\big) = f(x)$ sur $]0,1[$ avec des conditions de Dirichlet homogènes, les différentes familles de discrétisation sont bien distinguées : différences finies, volumes finis, éléments finis et méthodes spectrales. Les techniques liées à l'optimisation y sont aussi présentées *via* la simulation de problèmes complexes comme l'équation de Boltzmann-Poisson, l'optimisation de charge ou le problème de Stokes. Le dernier chapitre est consacré aux équations aux dérivées partielles d'évolution, là encore en abordant seulement le cas monodimensionnel. On y détaille les questions de stabilité et de consistance, d'abord pour l'équation de la chaleur puis pour des problèmes hyperboliques. L'analyse de l'équation de transport et celle de l'équation des ondes peuvent être considérées comme des « classiques ». En revanche, la discussion d'équations non linéraires, scalaires et systèmes, avec la simulation des équations d'Euler de la dynamique des gaz comme objectif final, ouvre sur des problématiques plus avancées. Le livre ne propose pas d'exercices. Cependant le lecteur est invité à réaliser par lui-même les simulations qui illustrent le manuscrit. Ce travail d'expérimentation numérique, en jouant avec les paramètres numériques et de modélisation, permettra de se forger une intuition des phénomènes et des notions mathématiques présentés et conduira à la pleine compréhension du sujet.

Mes collègues et collaborateurs ont eu une influence profonde sur la construction de mon paysage mathématique personnel ; ils m'ont fait découvrir des points de vue que je ne connaissais pas et ont su me faire apprécier des notions auxquelles j'avoue être parfois resté hermétique durant ma formation initiale ou aux premières étapes de ma carrière. C'est le lieu de les remercier pour leur patience à mon égard et de tout ce qu'ils m'ont appris. En particulier, j'ai une dette profonde envers Frédéric Poupaud, Michel Rascle, puis Stella Krell, Magali Ribot à Nice, Caterina Calgaro, Emmanuel Creusé à Lille, Virginie Bonnaillie-Noël, Frédéric Coquel, Benoît Desjardins, Frédéric Lagoutière et Pauline Lafitte à Paris. Je dois aussi beaucoup à mes collègues du jury de l'agrégation, notamment Florence Bachman, Guillaume Dujardin, Denis Favennec, Hervé Le Dret, Pascal Noble, Grégory Vial ; de très nombreux développements sont directement inspirés de nos conversations passionnées. Enfin, Claire Scheid, Franck Boyer et Sebastian Minjeaud ont de plus eu la gentillesse et la patience de relire certains passages de ce manuscrit ; leurs conseils et suggestions ont permis de nombreuses améliorations.