

Calcul Scientifique

Ecole Hassania des Travaux Publics

Salem Nafiri

Description de l'élément de Module

L'élément **calcul scientifique** appartient au module **Méthodes de résolution**

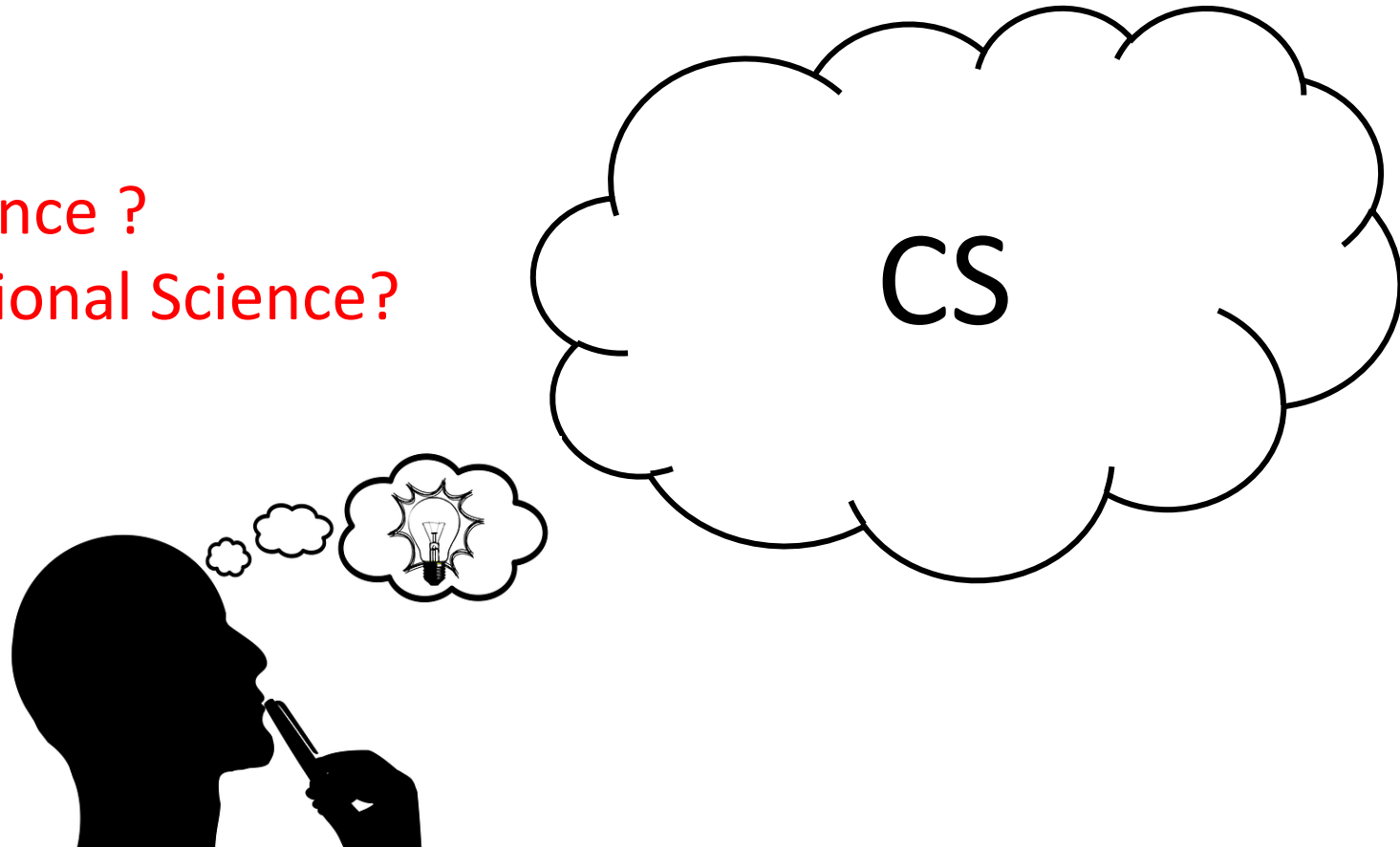
Intitulé du module	METHODES DE RESOLUTION
Département d'attache	Mathématiques, informatique et géomatique (MIG)
Nature du module	Module de spécialisation
Semestre d'appartenance du module	Semestre 2

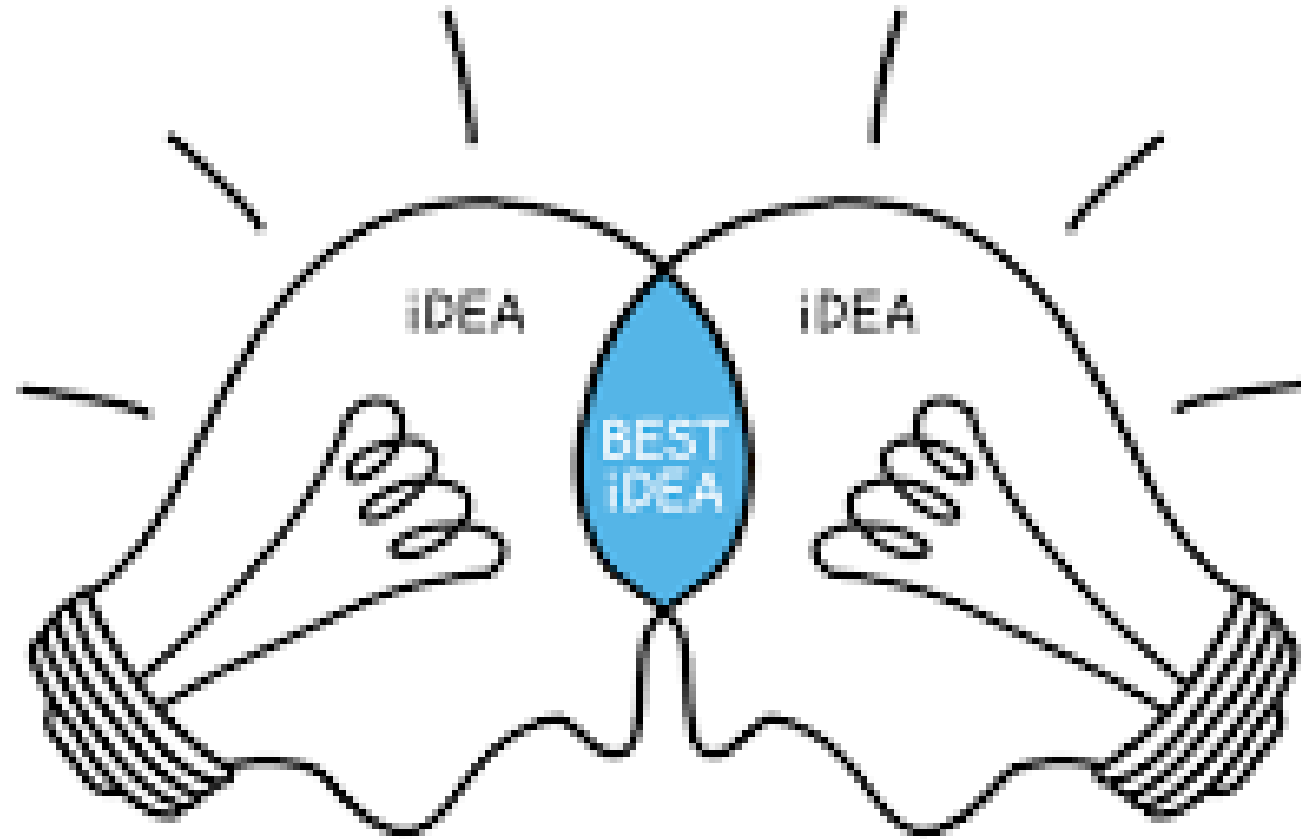
Calcul scientifique
Computational Science
Scientific Computing
Science Numérique

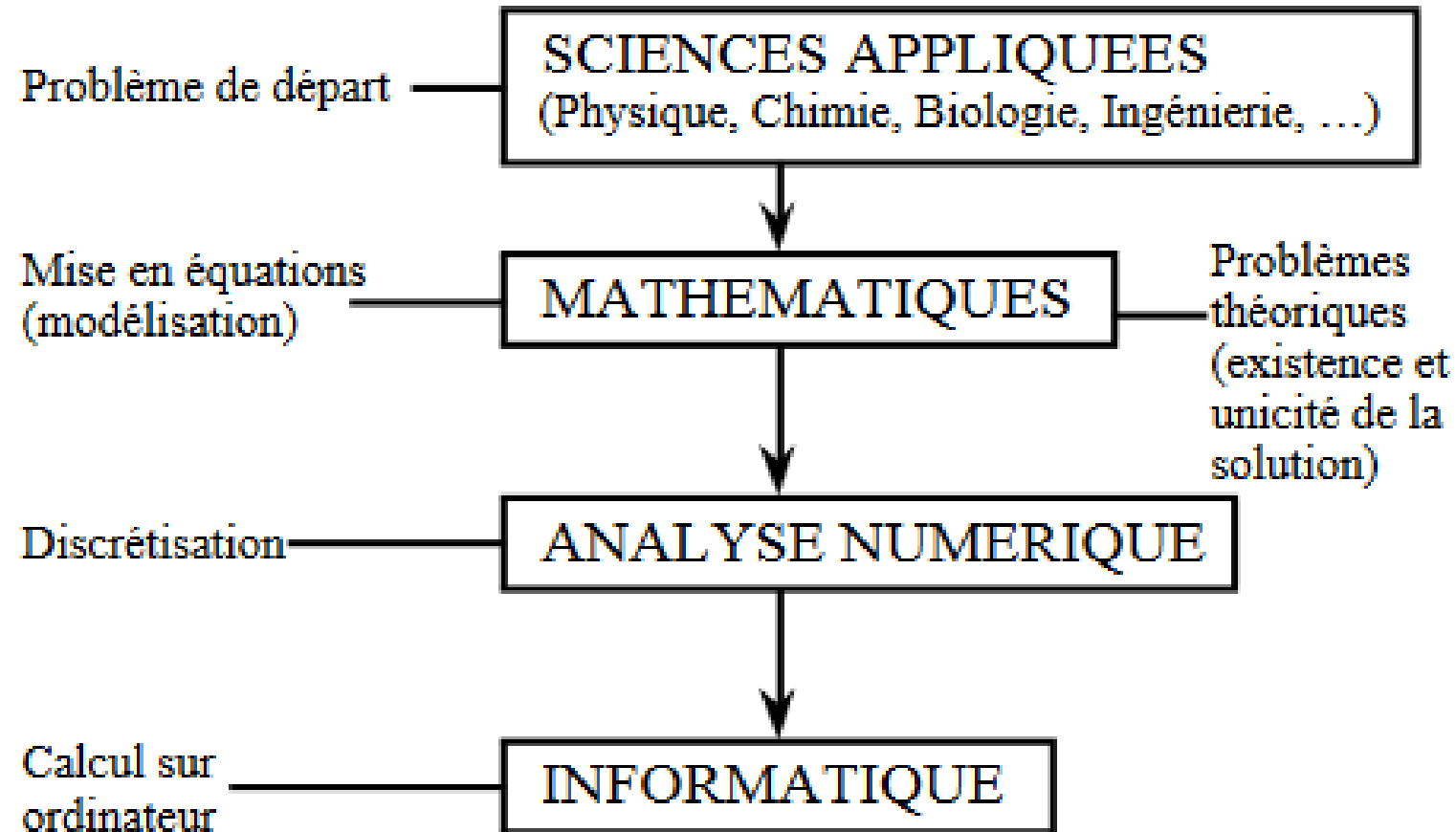


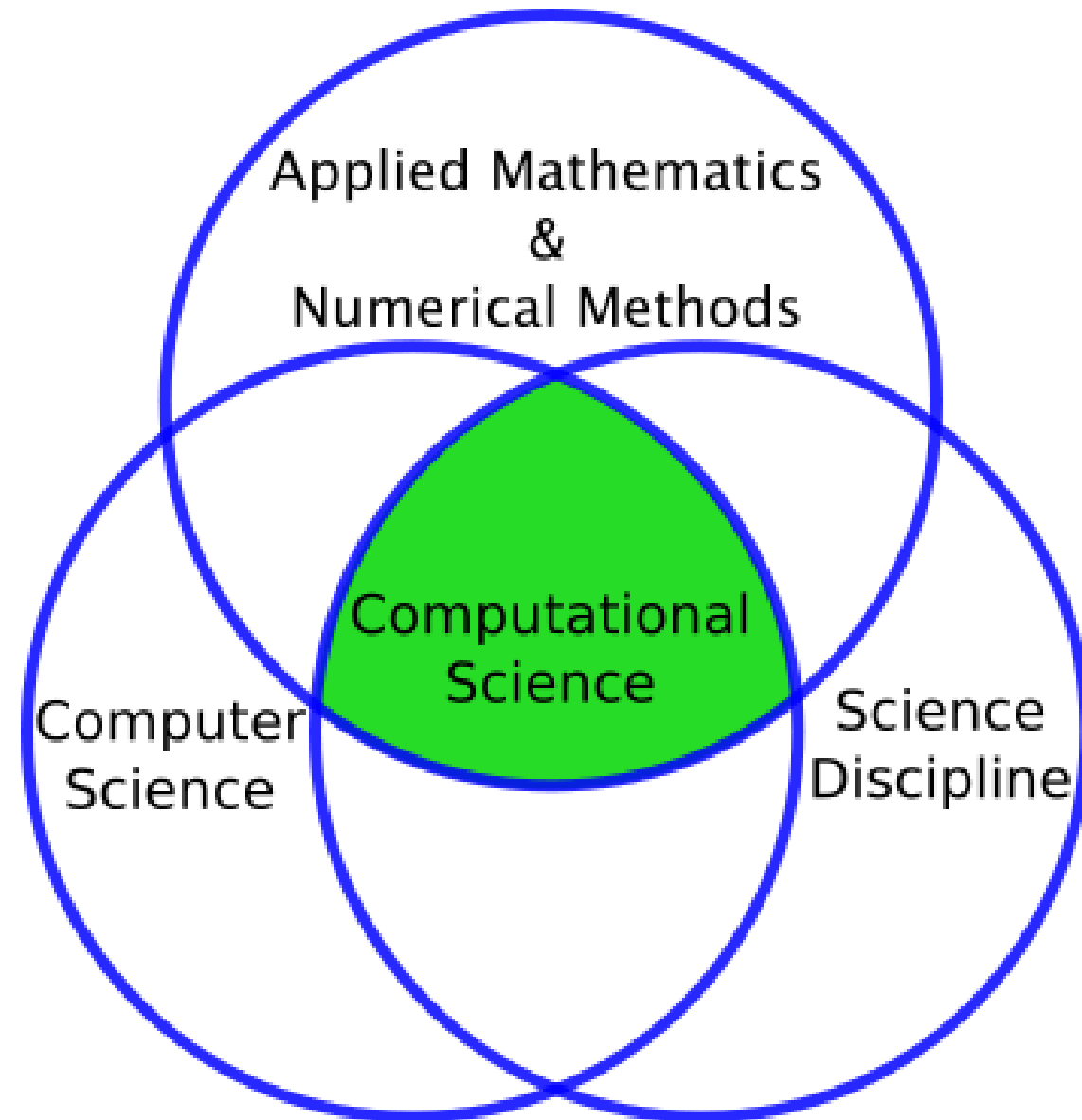
BrainStorming

1. What is Computational Science ?
2. Why do we need Computational Science?









Etymologie du mot

Le calcul scientifique est un domaine multidisciplinaire récent qui a connu une croissance rapide qui utilise des capacités informatiques avancées pour comprendre et résoudre des **problèmes complexes**. C'est un domaine de la science qui couvre de nombreuses disciplines.

Son objectif est de développer et simuler des modèles pour comprendre les problèmes scientifiques naturels (ou des sciences de l'ingénieur).

Un problème complexe

Pour définir un **problème complexe**, il peut être utile d'en comparer les caractéristiques avec celles d'un problème simple.

Un problème peut être considéré comme simple si l'ensemble des éléments nécessaires à sa résolution sont connus ou accessibles. Même s'il s'agit d'une situation nouvelle, le problème peut être résolu par une procédure systématique ou l'application de règles déjà connues. La solution est unique, non équivoque et vérifiable.

En contraste, dans un **problème complexe**, les informations peuvent être incomplètes, imprécises et contradictoires. Un problème complexe oblige à prendre en compte plusieurs aspects ou schèmes de référence à la fois (social, économique, psychologique, éthique, culturel, scientifique, politique, etc.) et différentes représentations du problème peuvent être définies selon les présupposés, informations et opinions considérés. Aucune procédure ou technique analytique spécifique ne permet d'arriver à une solution unique et non équivoque. Ainsi, plusieurs solutions sont possibles et des critères sont à déterminer afin de juger la pertinence et la valeur d'une solution à la lumière de notre connaissance actuelle de la question.

Bien entendu, un problème n'est pas complexe en soi, il est reconnu comme tel par la personne qui y est confrontée. De même, bien qu'il soit complexe, un problème peut varier en ce qui a trait au niveau de difficulté qu'il peut représenter pour un individu.

Troisième pilier de la science

Le calcul scientifique est aujourd'hui le «troisième pilier de la science», se situant juste à côté de l'analyse théorique et des expériences pour la découverte scientifique.

Le calcul scientifique devient crucial dans des situations telles que:

- Le problème en main ne peut être résolu par des moyens expérimentaux ou théoriques traditionnels, comme la prévision du changement climatique
- L'expérimentation peut être dangereuse, par exemple, la caractérisation de matériaux toxiques
- Le problème serait trop coûteux ou prendrait trop de temps pour le résoudre, par ex. détermination de la structure des protéines.

Le calcul scientifique

De plus, des simulations sur ordinateur peuvent être intégrées dans des algorithmes d'optimisation pour des conceptions optimales, par ex. la conception optimale des aéronefs (avions) dans l'ordinateur au lieu de modèles d'essais axés sur l'expérience qui est coûteuse en général.

Une autre caractéristique du calcul scientifique est qu'il s'agit d'une activité multidisciplinaire. Généralement, il implique des experts dans différentes disciplines, ainsi que des mathématiciens et des informaticiens appliqués qui aident à mettre en œuvre une solution numérique.

But what is Scientific Computing ?

The question is answered in [Golub&Ortega]* as follows:

... **Scientific Computing** is the collection of tools, techniques, and theories required to solve on a computer mathematical models of problems in **Science** and **Engineering**.

A majority of these tools, techniques, and theories originally developed in **Mathematics**, many of them having their genesis long before the advent of electronic computers. This set of mathematical theories and techniques is called **Numerical Analysis** (or **Numerical Mathematics**) and constitutes a major part of scientific computing. The development of the electronic computer, however, signaled a new era in the approach to the solution of scientific problems. Many of the numerical methods that had been developed for the purpose of hand calculation (including the use of desk calculators for the actual arithmetic) had to be revised and sometimes abandoned. Considerations that were irrelevant or unimportant for hand calculation now became of utmost importance for the efficient and correct use of a large **Computer System**. Many of these considerations – programming languages, operating systems, management of large quantities of data, correctness of programs – were subsumed under the new discipline of **Computer Science**, on which scientific computing now depends heavily. But mathematics itself continues to play a major role in scientific computing: it provides the language of the mathematical models that are to be solved and information about the suitability of a model (Does it have a solution? Is the solution unique?) and it provides the theoretical foundation for the numerical methods and, increasingly, many of the tools from computer science. In summary, then, scientific computing draws on mathematics and computer science to develop the best way to use computer systems to solve problems from science and engineering.

Syllabus du CS

L'objectif de ce module est de doter l'élève ingénieur des méthodes de résolution des problèmes complexes. Le programme de cet élément de module est le suivant:

- Introduction à la Modélisation Mathématique et à la Simulation Numérique.
TP1. Rappels sur les commandes Scilab (Partie 1).
- Arithmétique de la machine et analyse d'erreurs
TP2. Rappels sur les commandes Scilab (Partie 2).
- Eléments d'algèbre linéaire numérique : matrices, normes et conditionnement.
TP3. Opérations numériques matricielles avec Scilab.
- Méthodes de résolution numérique des équations algébriques linéaires et non linéaires de grande taille
TP4. Simulation de certains algorithmes usuels de résolution des systèmes linéaires de grande taille.
- Méthodes numériques de calcul des valeurs propres et des vecteurs propres.
TP5. Simulation de certains algorithmes de calcul des valeurs propres et des vecteurs propres.
- Etude et analyse numérique de quelques problèmes aux limites unidimensionnels (1d) par la méthode des différences finies, éléments finis et éléments spectraux.
TP6. Simulation numérique de l'équation de Poisson/Laplace par la méthode des différences finies

Syllabus de cet élément de module

Activités pratiques	Modalités d'organisation
Calcul scientifique	<p>Projet avec rapport:</p> <p>Etude théorique et numérique de quelques problèmes d'évolution classiques.</p> <p>L'objectif est de permettre à l'élève-ingénieur d'appliquer les connaissances acquises en cours, TD et TP pour résoudre des problèmes des sciences de l'ingénieur.</p>

Effectif classe GI1₂₀₁₈: 22 personnes

Bibliographie

1. <http://www.scicomp.uni-kl.de/about/scientific-computing/>
2. <http://www.nottingham.ac.uk/pgstudy/courses/mathematical-sciences/scientific-computation-msc.aspx>
3. <http://www.rw.ethz.ch/>
4. https://en.wikipedia.org/wiki/Computational_science
5. <http://app.cegep-ste-foy.qc.ca/index.php?id=612>
6. Gene H. Golub and James M. Ortega. *Scientific Computing and Differential Equations –An Introduction to Numerical Methods*. Academic Press, 1992.