Introduction : notes du CM1

Résoudre des problèmes concret de science ou d'ingénierie (industrie, santé...)

* Quelles plateformes matérielles, quels outils informatiques, quelles méthodes mathématiques ?
* Division théorie et expérimental en science ? Place et rôle du calcul scientifique ? --> Une troisième branche ?
* Quelques questions complémentaires: reproductibilité, bonnes pratiques de programmation (gestion de versions -- git, svn... --, tests, documentation...).

Des problèmes spécifiques

* Problèmes d'ingénierie ou de recherche qui demande la résolution de problèmes numériques de très grandes tailles ou qui sont très nombreux.
* Exemple de la prévision de la météo, gestion de files d'attente complexes (réseaux chemin de fer, réseaux avions...), traitement d'image (imagerie médicale, animation...)
* L'ordinateur fait des + et \*, et répartit le travail, communique des nombres. Le coeur des algorithmes repose sur la gestion (construction, manipulation, opérations...) des grands tableaux de nombres. Et sur l'algèbre linéaire pour des grandes matrices. Grand = plusieurs millions, voir des milliards. Exemple: un cube 100\*100\*100 = 1 million.

Matériel

* Ordinateurs portable :: faibles performances mais très répandus, en général multicoeur à mémoire partagée.
* Stations de travail fixes :: meilleures performances, multicoeur/multiprocesseur à mémoire partagé.
* Serveurs de calcul :: performances importantes à très importantes, nombreuses architectures possibles, mais modèle hiérarchique multicpu distribué -- multicoeurs est le plus répandu.

Outils informatiques

* Bibliothèques :: qui permettent d'accéder aux fonctionnalités du matériels, comme MPI et autres techniques de communication ou gestion de la mémoire et de l'exécution (openMP), mais aussi les bibliothèques de calcul matriciel (BLAS, LAPACK, UMFPACK, HIPS, MUMPS...).
* Langages de programmation :: Fortran, C, C++, proches de la machine, utilisent directement les bibliothèques
* Langages de haut niveaux :: sans compilation, avec interface simplifié et intuitive avec les bibliothèques, temps de développement raccourci, maintien plus simple, etc

Mathématiques

* Les problèmes sont souvent du domaine des EDP (qqsoit le champ d'application).
* Analyse fonctionnelle et EDP.
* Transformée de Fourier.
* Méthodes numériques.
* Résolution des grands systèmes linéaires, valeurs propres.
* Résolution d'équations différentielles.
* Interpolation, approximation, intégration numérique.
* ...

Objectif principal

* Mettre en œuvre *sans se casser la tête* les méthodes ci-dessus pour résoudre des problèmes numériquement complexe sur des ordinateurs dédiés au calcul, éventuellement en utilisant les ressources de manière optimale.
* Ça demande l'utilisation d'outils informatique et numériques spécifiques.

Liens

Liste non exhaustive de quelques pointeurs pour le calcul scientifique.

* matlab :: <http://fr.mathworks.com/>, licence commerciale.
* scilab :: <http://www.scilab.org/fr>, licence open source CeCILL, téléchargeable gratuitement.
* octave :: <https://www.gnu.org/software/octave/>, licence GNU General Public License.
* freefem++ :: <http://www.freefem.org/>, licence ??
* python :: <https://www.python.org/>, licence PSF (compatible GPl), langage de programation généraliste simplet et de haut niveau.
* scipy scientific computing stack :: <https://www.scipy.org/about.html>, licences libres variées.