

Informatique Appliquée au Calcul Scientifique**Licence première année****Présentation**

Ce cours-travaux pratiques se compose de 15 séances de 4 heures chacune afin de constituer un ensemble homogène de 60 heures d'enseignement, soit 6 ECTS. Chaque séance est consacrée à la transmission du cours et aux exercices d'application et/ou aux travaux pratiques. Nous indiquons dans ce qui suit de façon approximative l'emploi du temps qui a été effectivement réalisé pour cet enseignement "IACS-L1" depuis l'année 2005-2006.

Séance 1

Cours : Représentation des nombres en machine. Zéro et l'infini. Erreurs d'arrondis. [3 heures 30 minutes]

Travaux pratiques : Qui sait se connecter au système ? [30 minutes]

Séance 2

Cours : Intégration numérique. Propriété de l'intégrale. Sommes de Riemann. Méthodes des trapèzes et de Simpson. [3 heures 30 minutes]

Travaux pratiques : Qui sait se connecter au système ? [30 minutes]

Séance 3

Cours : Somme d'une série géométrique. Rudiments de programmation. Instruction $x = x + 1$ et affectation en mémoire. Calcul numérique d'une somme à l'aide d'une boucle. [3 heures 30 minutes]

Travaux pratiques : Tout le monde est connecté au système ! [30 minutes]

Séance 4

Cours : Introduction à Unix, Octave, Emacs. [2 heures]

Travaux pratiques : Énoncé du TP1 et travail individuel. [2 heures]

TP1. Calculer de manière approchée la valeur I_n de l'intégrale $I = \int_1^2 \frac{dx}{x}$ à l'aide de n intervalles. Comment l'erreur $\epsilon = |I - I_n|$ se comporte-t-elle en fonction de n si l'entier n tend vers l'infini ?

Séance 5

Cours : Théorème des valeurs intermédiaires. Application à l'algorithme de dichotomie. [2 heures]

Travaux pratiques : Travail individuel du TP1. [2 heures]

Séance 6

Cours : Quelques rudiments de programmation : branchement. Exemple de la résolution de l'équation $x^2 - 2 = 0$ avec $x > 0$ par un algorithme de dichotomie. [2 heures]

Travaux pratiques : Enoncé du TP2 et travail individuel. [2 heures]

TP2. (i) Programmer l'algorithme de dichotomie à l'aide du progiciel Octave afin de calculer numériquement la valeur de $\sqrt{2}$. (ii) Pour une équation de la forme $f(x) = 0$ avec $f(x) = 1 - x - x^3$ ou $f(x) = -1 + 3x - x^3$, initialiser l'algorithme de dichotomie à l'aide du théorème des valeurs intermédiaires et adapter le travail précédent pour calculer numériquement une (ou plusieurs) solution(s) approchée(s) de l'équation $f(x) = 0$.

Séance 7

Cours : Corrigé du TP1. [30 minutes]

Travaux pratiques : Travail individuel sur le TP2. [3 heures 30 minutes]

Séance 8

Cours : Point fixe : théorème et algorithme. [1 heure]

Travaux pratiques : Enoncé du TP3 et travail individuel. [3 heures]

TP3. (i) Programmer l'algorithme du point fixe pour les trois fonctions suivantes : $f_1(x) = \frac{1}{2}x + 1$, $f_2(x) = 1 - x^3$ et $f_2(x) = \frac{1}{1+x^2}$. Que remarquez-vous ? (ii) Comment utiliser l'algorithme du point fixe pour calculer toutes les racines de l'équation $1 + 3x - x^3 = 0$?

Séance 9

Cours : Théorème des accroissements finis. Notion d'application contractante. Conséquences pour le théorème du point fixe. [1 heure]

Travaux pratiques : Travail individuel sur le TP3. [3 heures]

Séance 10

Cours : Algorithme de Newton. Cas de la fonction $f(x) = x - \frac{a}{x}$ avec $x > 0$. Corrigé du TP2. [2 heures]

Travaux pratiques : Enoncé du TP4 et travail individuel. [2 heures]

TP4. (i) Calculer $\sqrt{2}$ en utilisant la fonction proposée dans le cours et l'algorithme de Newton. (ii) Calculer numériquement **toutes** les racines de l'équation $1 + 3x - x^3 = 0$.

Séance 11

Cours : Corrigé du TP3. Convergence quadratique de l'algorithme de Newton. [2 heures]

Travaux pratiques : Travail individuel sur le TP4. [2 heures]

Séance 12

Cours : Différences finies décentrées à gauche f'_g , décentrées à droite f'_d et centrées f'_c pour l'évaluation numérique d'une dérivée. Analyse du schéma obtenu à l'aide de la formule de Taylor. Introduction à l'utilisation du logiciel graphique Gnuplot. [2 heures]

Travaux pratiques : Enoncé du TP5 et travail individuel. [2 heures]

TP5. Pour x réel dans l'intervalle $[0, 1]$, on pose $f(x) = \sin x$ ou toute autre fonction dont le calcul de la dérivée peut être mené à bien de façon analytique. On se donne un entier N ($N \approx 10$ typiquement dans un premier temps). (i) Représenter graphiquement la fonction f en utilisant N points de grille uniformément répartis sur l'intervalle $[0, 1]$. (ii) Représenter graphiquement les courbes discrètes obtenues en utilisant des différences finies et comparer à la fonction dérivée exacte évaluée aux points de la grille. (iii) Calcul de la précision des algorithmes. On se donne un point x_0 fixé. On fait varier le pas Δx . Afin de mesurer l'ordre de grandeur de l'erreur lorsque Δx tend vers 0, on introduit la quantité $\epsilon_g(\Delta x) = |f'_g(x_0, \Delta x) - f'(x_0)|$. Représenter graphiquement la courbe $(-\log(\Delta x), \log(\epsilon_g(\Delta x)))$ Mêmes questions avec les approximations décentrée à droite et les approximations centrées de la dérivée première ou de la dérivée seconde.

Séance 13

Cours : Corrigé du TP4. Dérivée seconde approchée par des différences finies centrées. Ordre de précision du schéma obtenu. [1 heure 30 minutes]

Travaux pratiques : Travail individuel sur le TP5. [2 heures 30 minutes]

Séance 14

Travaux pratiques : Fin du travail individuel sur le TP5. [4 heures]

Séance 15

Cours : Correction du TP5. Exercices de révisions. [4 heures]