Conservatoire National des Arts et Métiers
chaire de Calcul Scientifique

Informatique Appliquée au Calcul Scientifique

CSC012 et CSC013

Cours de Licence de première et seconde années

François Dubois
Professeur responsable

Objectif

Donner aux auditeurs des notions de base du maniement des progiciels de calcul scientifique (Matlab, Scilab, Octave).

Approximation numérique des problèmes les plus fondamentaux :

résolution d'équations,
droite des moindres carrés,
interpolation,
dérivation numérique,
équations différentielles ordinaires.

Pédagogie

Pédagogie active offerte aux auditeurs avec des “cours-travaux pratiques”.

Exposés didactiques, démonstrations de l'enseignant et mises en pratique par les auditeurs.

IACS-1 (CSC012) (première année), module de 60 heures, 6 ECTS,

IACS-2 (CSC013) (seconde année), module de 60 heures, 6 ECTS.

Exemple

$$
\begin{array}{lll}
x = 0.1, & z = 1 + x & z = 1.1 \\
x = 0.01, & z = 1 + x & z = 1.01 \\
x = 0.00001, & z = 1 + x & z = 1.00001 \\
x = 10^{-10}, & z = 1 + x & z = 1.0000000001 \\
x = 10^{-20}, & z = 1 + x & z = 1 \text{ !!!}
\end{array}
$$

"Quel est le plus grand nombre qui, ajouté a un, donne un ?"

$$
\begin{array}{lll}
x = 10^{-14}, & z = 1 + x & z = 1.00000000000001 \\
x = 10^{-16}, & z = 1 + x & z = 1\ .
\end{array}
$$

Le calcul numérique induit toujours une erreur d'arrondi
de l'ordre de 10^{-15} en valeur relative

Exemple : calcul de la racine carrée de 2.

Remarque fondamentale : un nouvel outil doit toujours être testé pour un problème dont on connaît la solution.

On cherche x tel que $x^2 = 2$ et $x > 0$.

Changement de l'écriture de l'équation : $x = \dfrac{2}{x}$

c'est à dire $f(x) = 0$

$$\text{avec} \quad f(x) \equiv x - \frac{2}{x}, \quad \text{pour tout } x > 0.$$

On part d'une solution "pas si mauvaise" : $x_0 = 1$

On remplace la fonction f par son approximation affine au voisinage de x_0 :

$$f(x) \approx g_0(x) \equiv f(x_0) + f'(x_0)\,(x - x_0)$$

On définit x_1 comme la solution de l'équation $g_0(x_1) = 0$

Si $f'(x_0) \neq 0\,,$ le calcul de x_1 est très simple :

$$x_1 = x_0 - \frac{1}{f'(x_0)}\,f(x_0)$$

Condition initiale : $x_0 = 1$

Résultat obtenu après la première itération de l'algorithme :
$x_1 = 1.33333333333333$

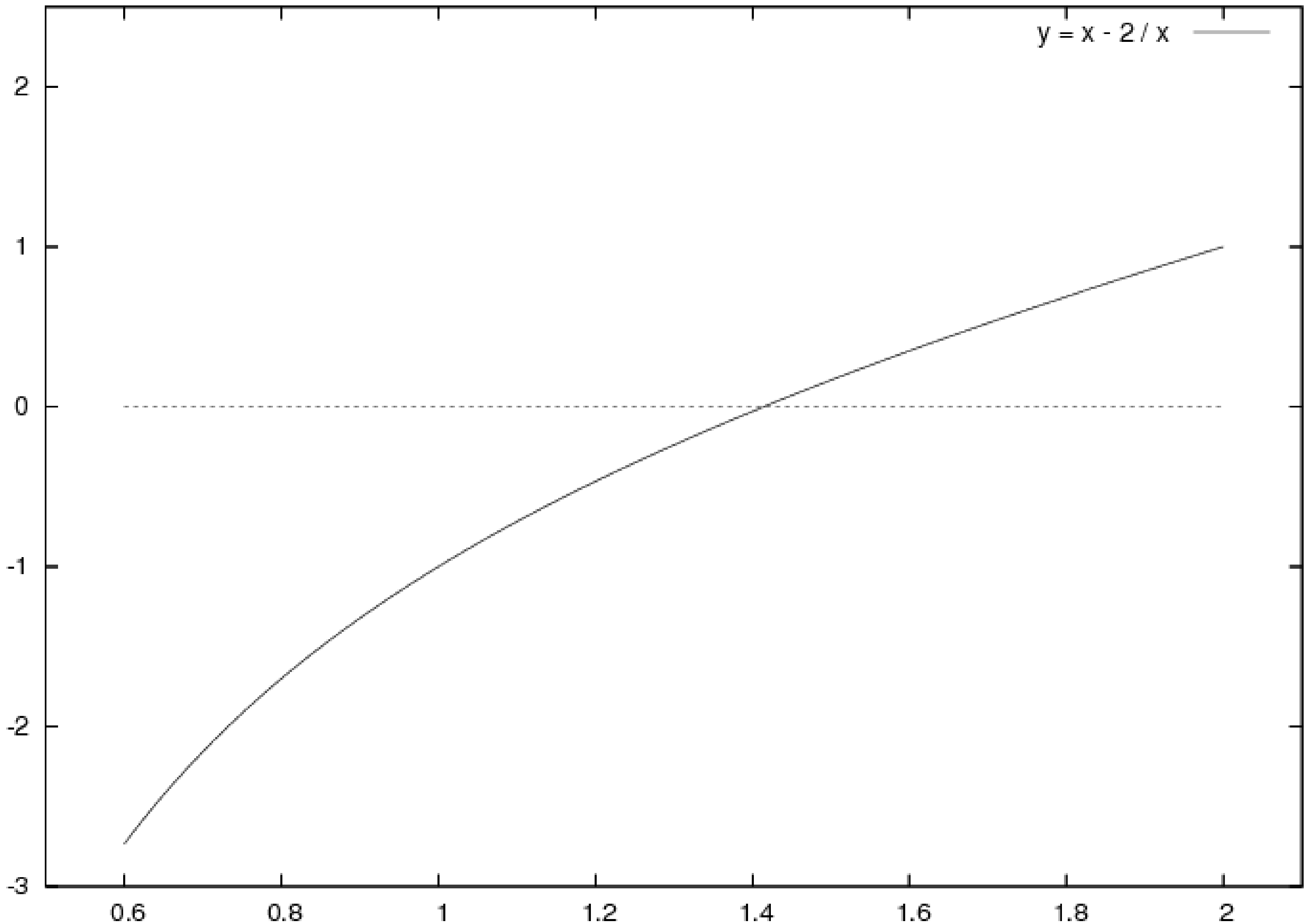
On recommence avec x_1 comme nouvelle solution approchée

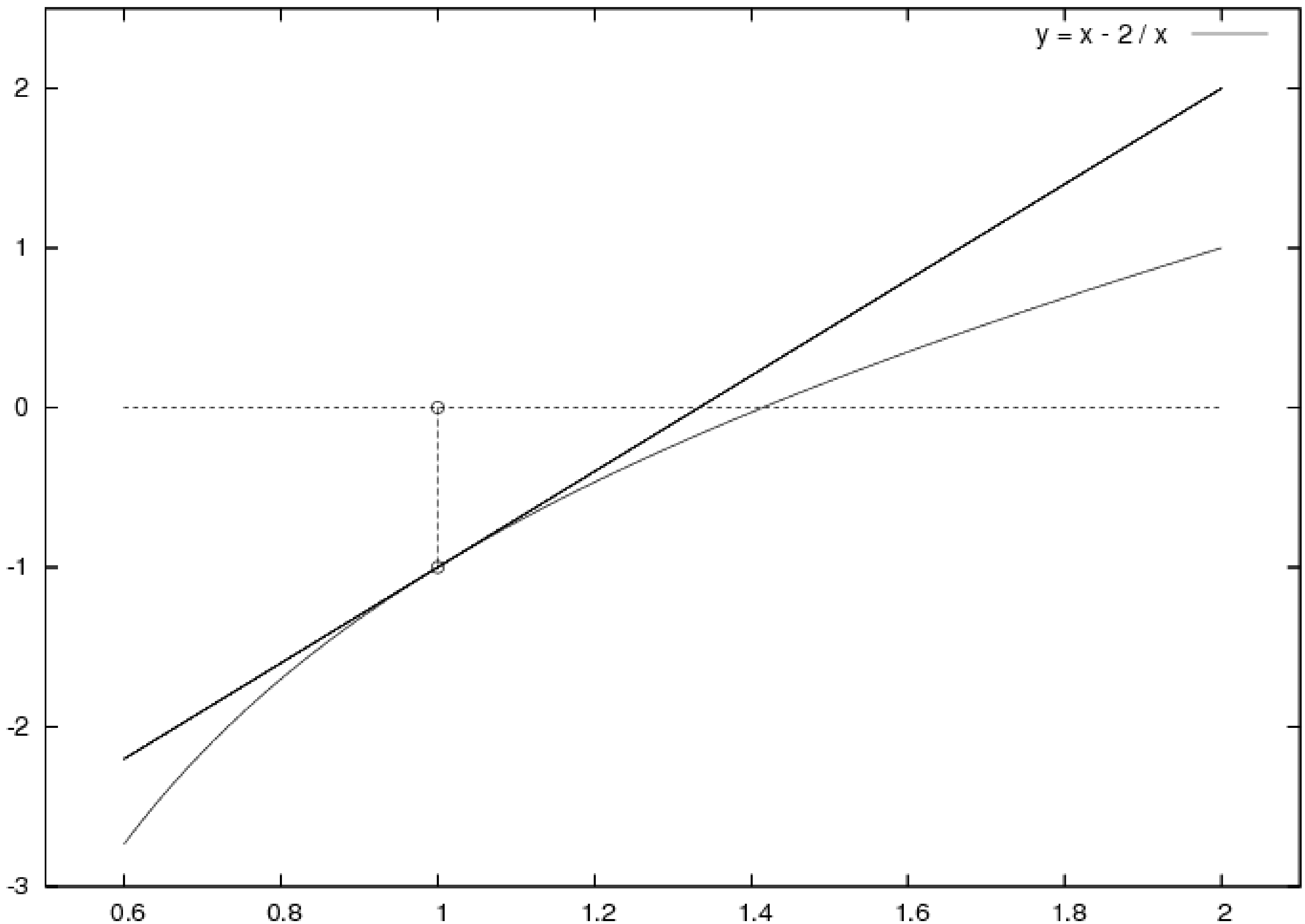
On remplace la fonction f par l'approximation affine
au voisinage de x_1 cette fois :

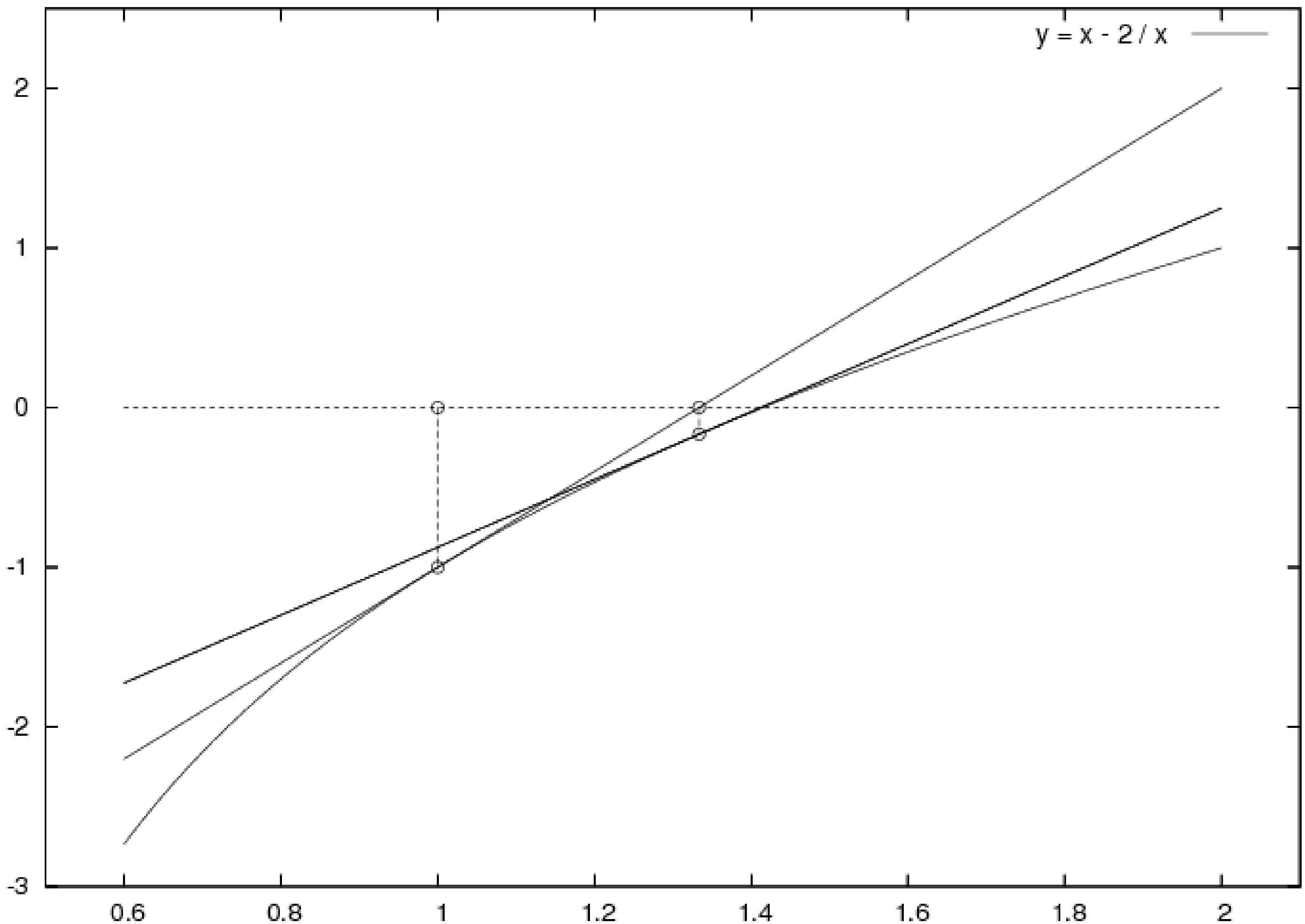
$$f(x) \approx g_1(x) \equiv f(x_1) + f'(x_1)\,(x - x_1)$$

On définit x_2 comme la solution de l'équation $g_1(x_2) = 0$

$$\text{Si } f'(x_1) \neq 0\,, \quad \text{on a} \quad x_2 = x_1 - \frac{1}{f'(x_1)}\, f(x_1).$$


y = x - 2 / x
2
1
0
-1
-2
-3
0.6
0.8
1
1.2
1.4
1.6
1.8
2


y = x - 2 / x
2
1
0
-1
-2
-3
0.6
0.8
1
1.2
1.4
1.6
1.8
2


y = x - 2 / x
2
1
0
-1
-2
-3
0.6
0.8
1
1.2
1.4
1.6
1.8
2

On trouve :	$x_0 = 1$	
	$x_1 = 1.33333333333333$	(1 chiffre correct)
Itérations suivantes :	$x_2 = 1.41176470588235$	(3 chiffres corrects)
	$x_3 = 1.41421143847487$	(6 chiffres corrects)
	$x_4 = 1.41421356237150$	(12 chiffres corrects)
	$x_5 = 1.41421356237309$	
	$x_6 = 1.41421356237309$	
On note que	$\sqrt{2} \approx 1.41421356237310$	

A chaque itération de l'algorithme, le nombre de chiffres exacts double !!

Exemple d'évolution dynamique

Système de deux équations différentielles couplées

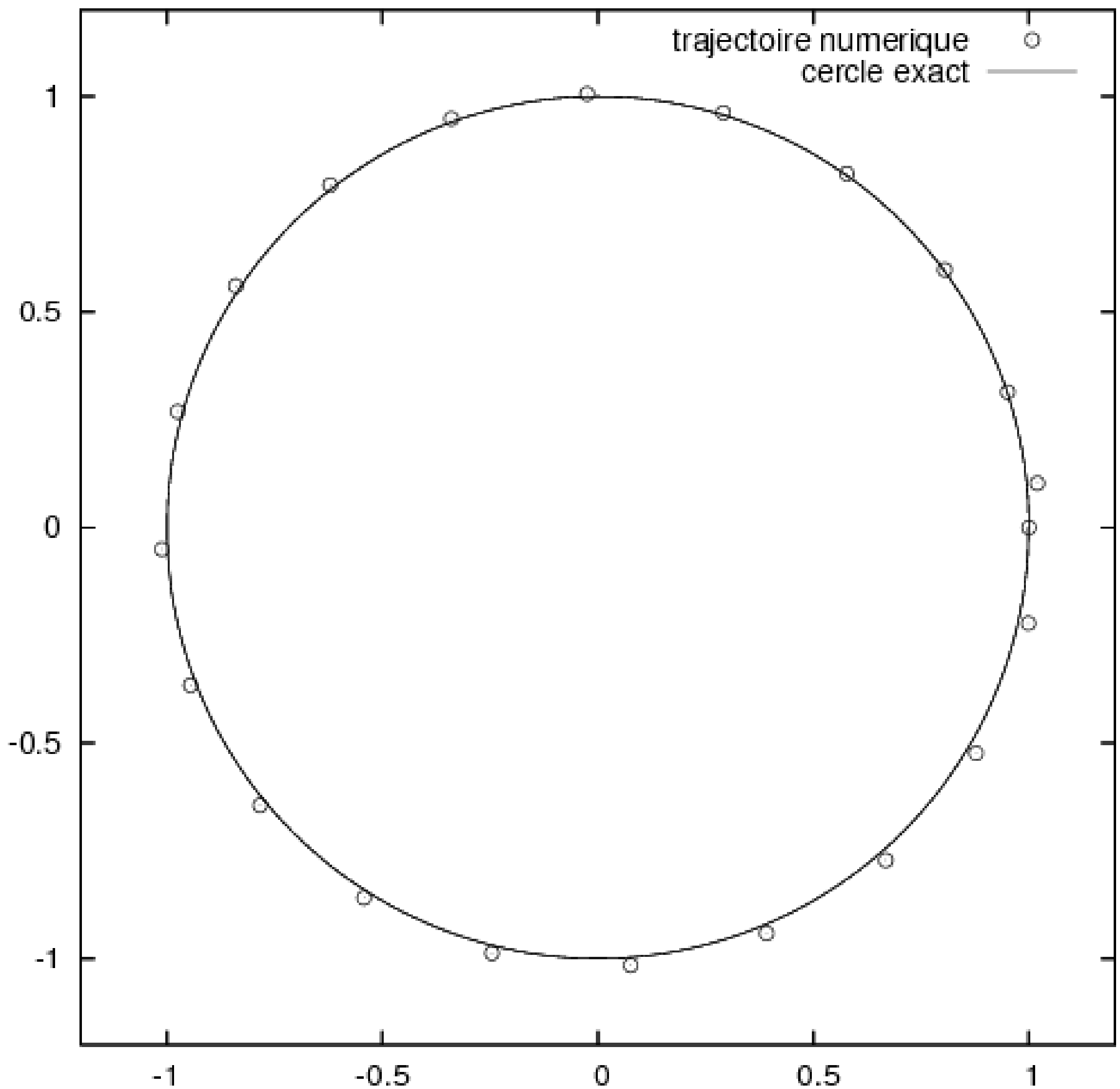
$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + y = 0\,, \qquad \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} - x = 0\,, \qquad t > 0.$$

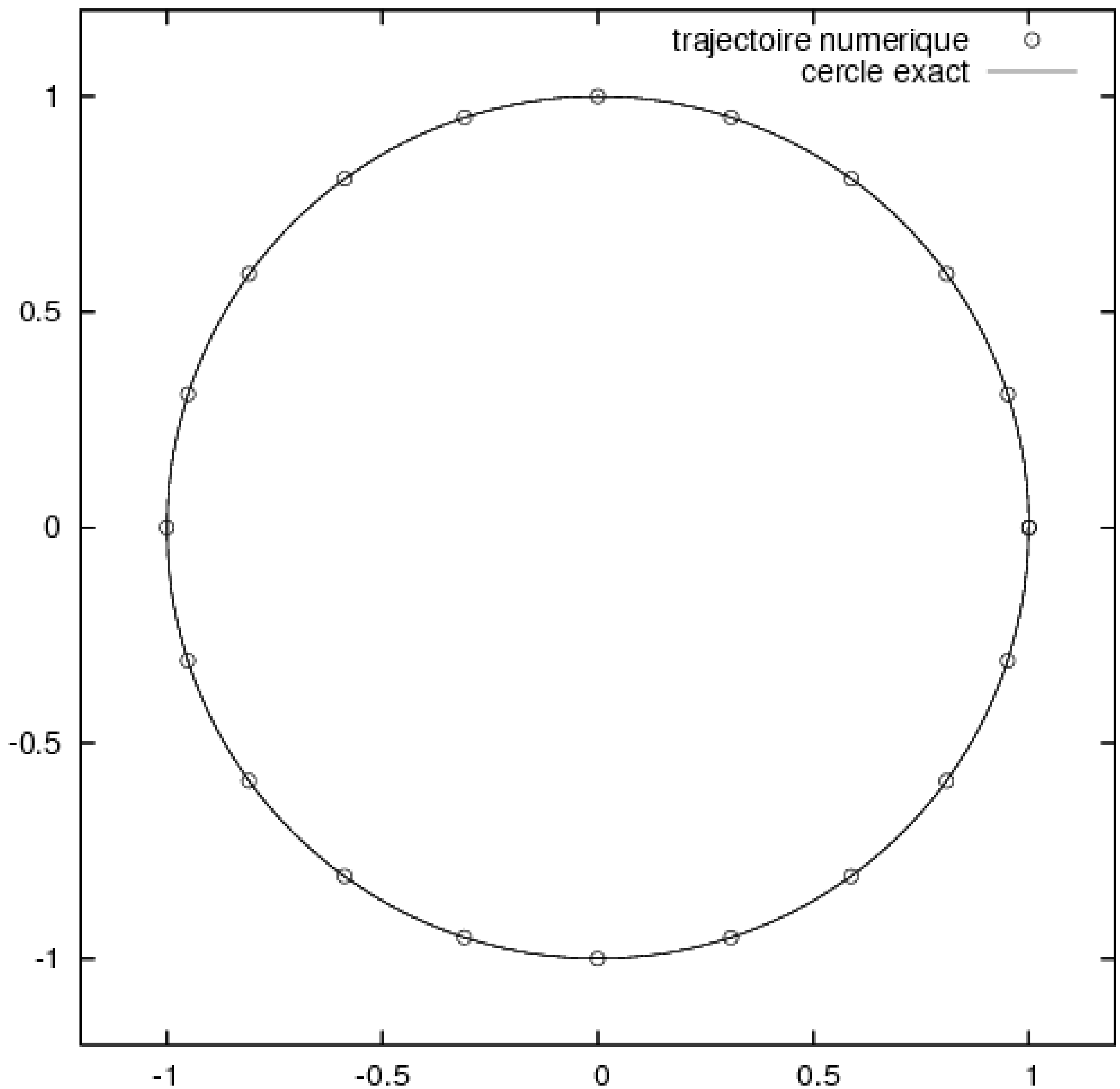
Condition initiale : $\quad x(t=0) = 1\,, \quad y(t=0) = 0.$

Solution exacte : $\quad x(t) = \cos t\,, \quad y(t) = \sin t\;:$ cercle !

Test d'un premier schéma "d'ordre deux"

puis d'un second schéma "d'ordre quatre"


trajectoire numerique
cercle exact
1
0.5
0
-0.5
-1
-1
-0.5
0
0.5
1

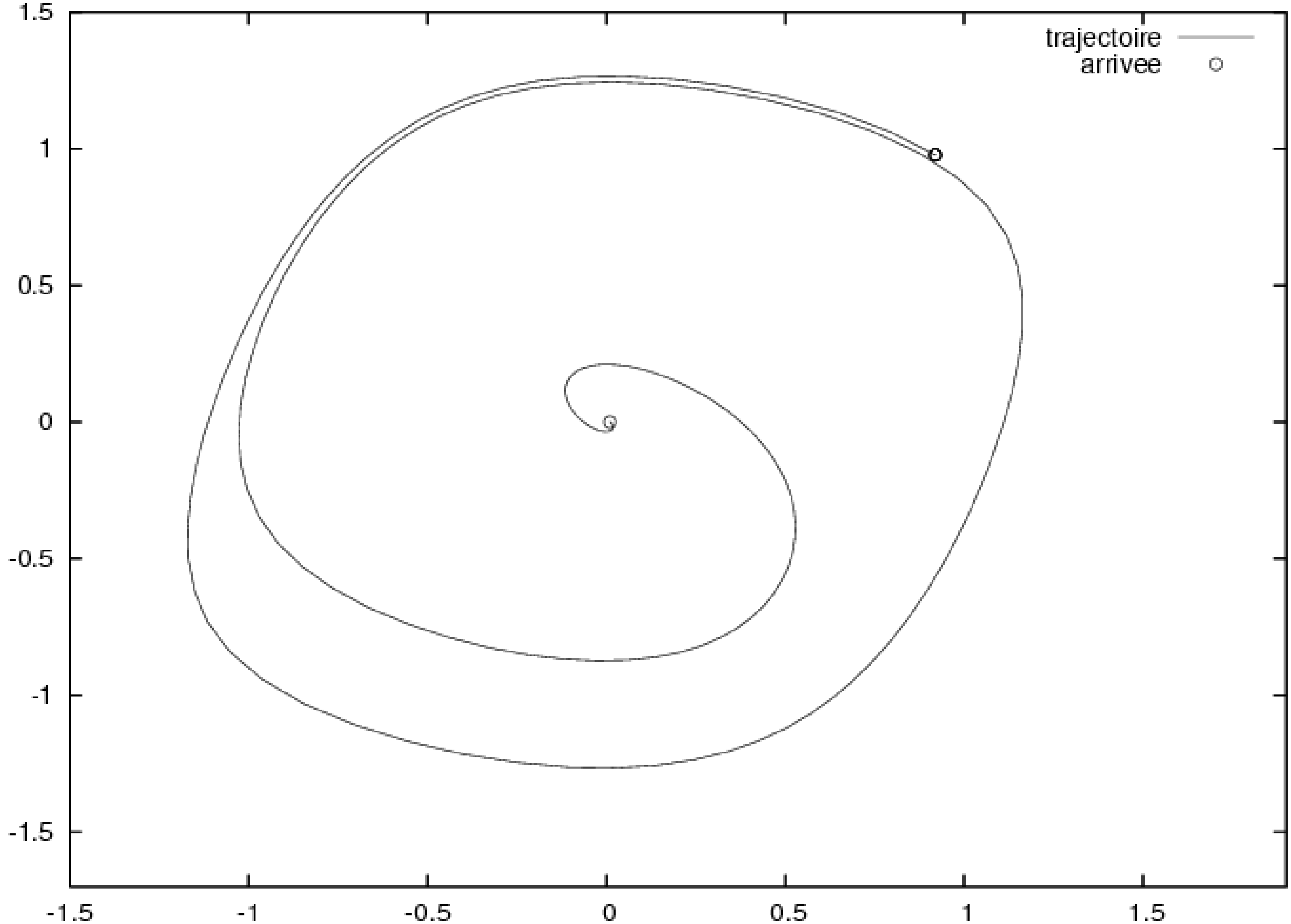

trajectoire numerique
cercle exact
1
0.5
0
-0.5
-1
-1
-0.5
0
0.5
1

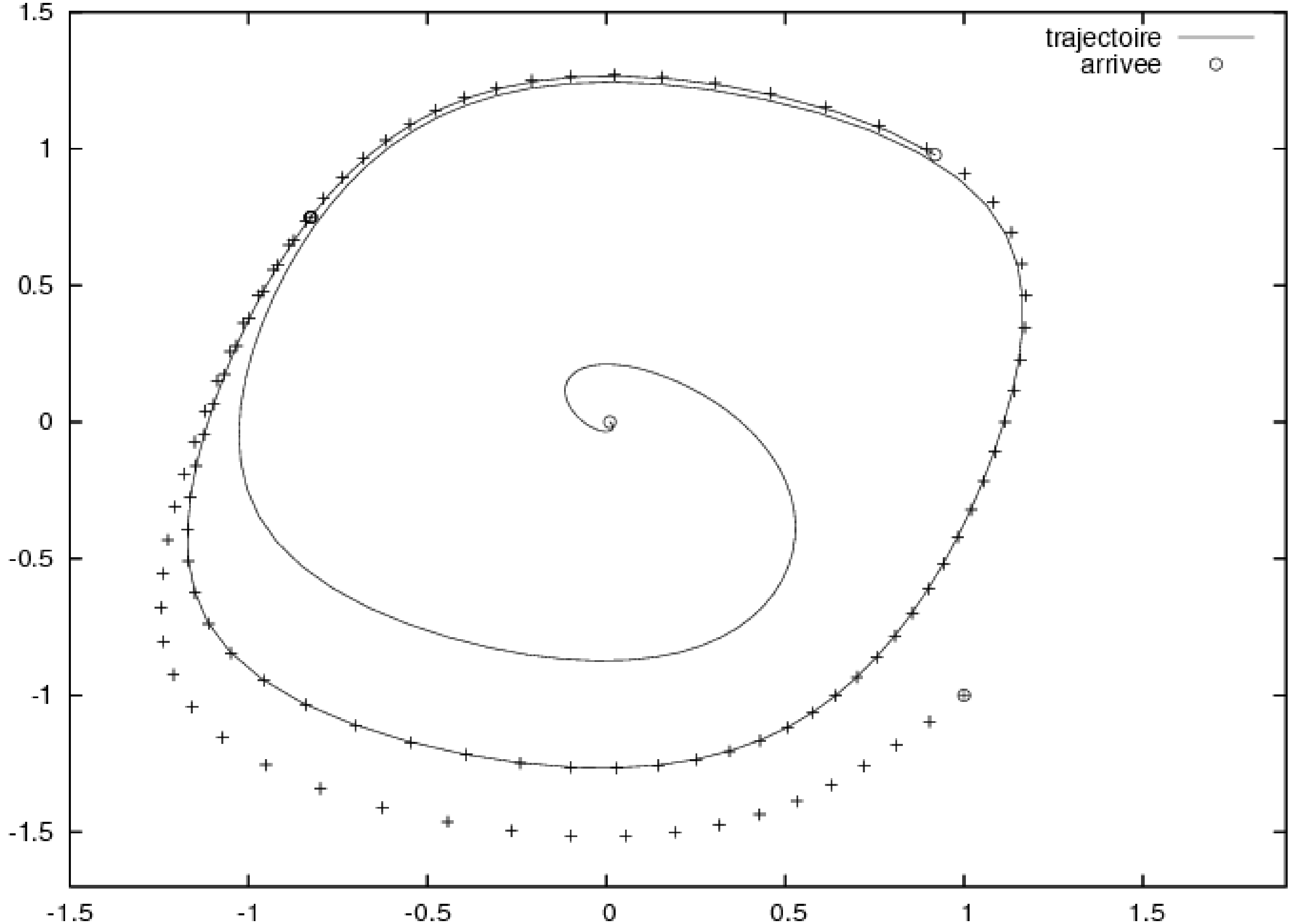
Le schéma “d’ordre quatre” est très précis
même si l’on utilise très peu de points

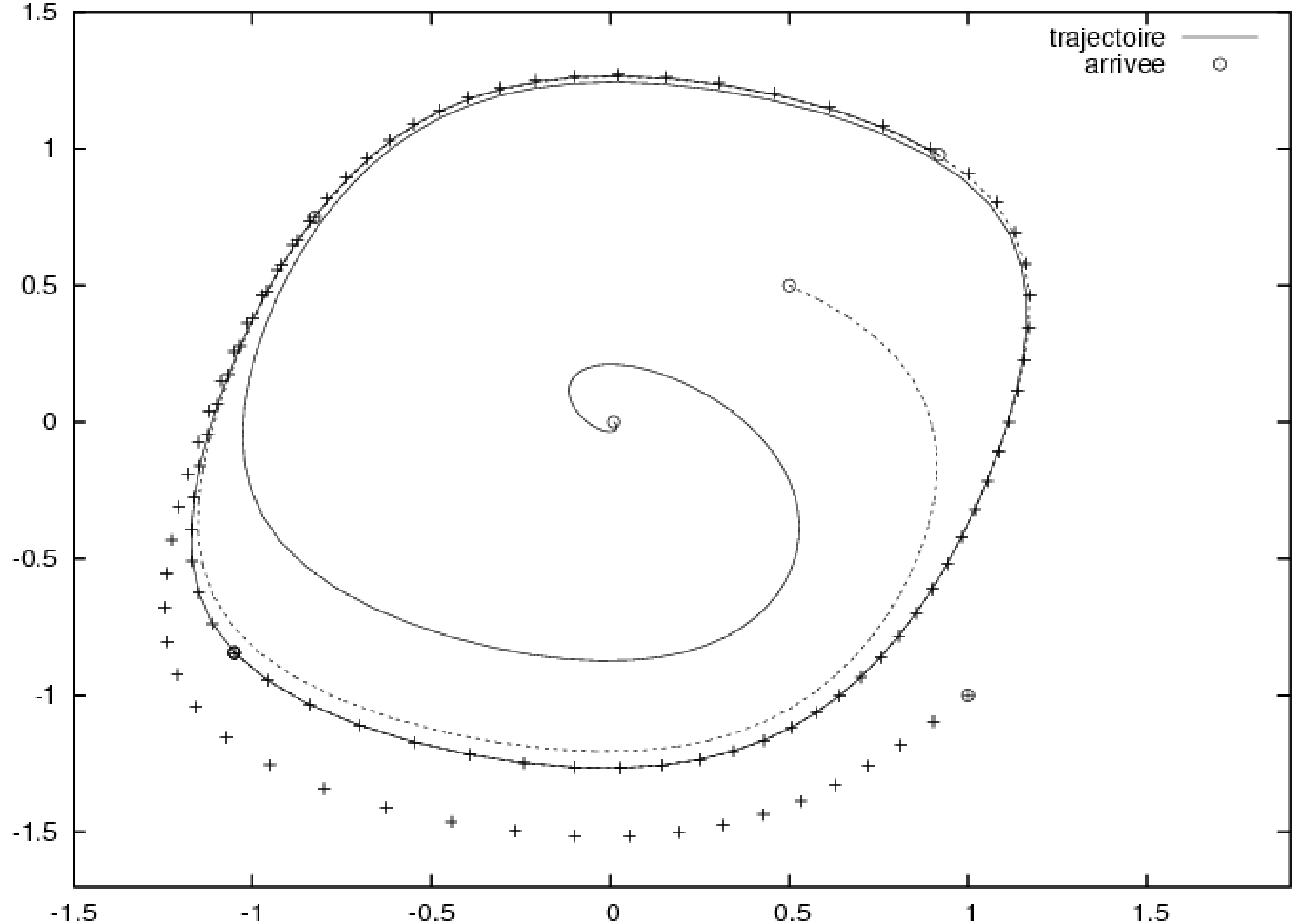
On l’utilise pour étudier le comportement d’un système
qui n’a pas de “solution analytique” : l’oscillateur de Van der Pol

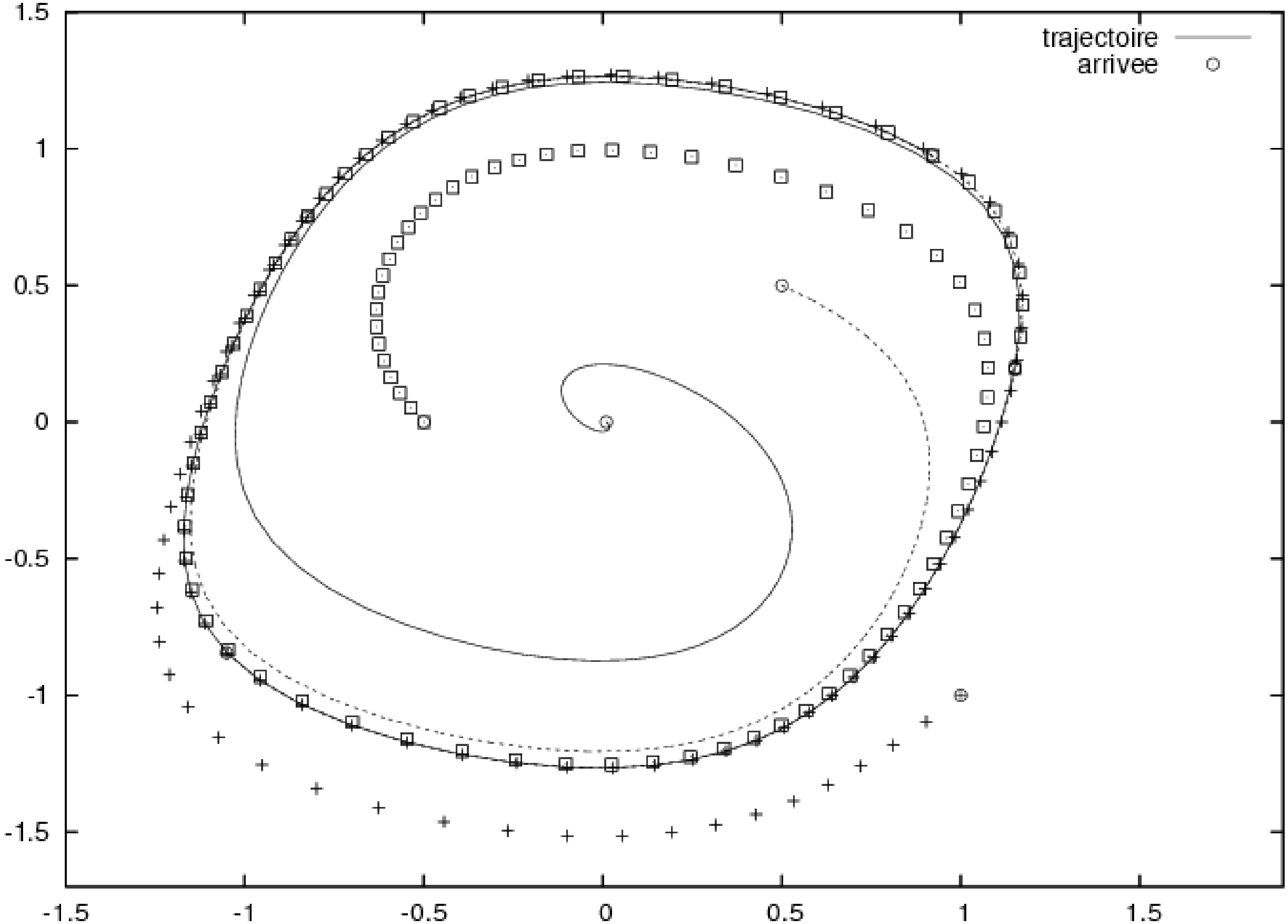
$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = y + x - x^3 \,, \qquad\qquad \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = -x \,, \qquad t > 0.$$

On fait varier la condition initiale $\quad x(t=0)\,, \quad y(t=0)\,.$


trajectoire
arrivee
1.5
1
0.5
0
-0.5
-1
-1.5
-1.5
-1
-0.5
0
0.5
1
1.5


trajectoire
arrivee
1.5
1
0.5
0
-0.5
-1
-1.5
-1.5
-1
-0.5
0
0.5
1
1.5


trajectoire
arrivee
1.5
1
0.5
0
-0.5
-1
-1.5
-1.5
-1
-0.5
0
0.5
1
1.5


trajectoire
arrivee
1.5
1
0.5
0
-0.5
-1
-1.5
-1.5
-1
-0.5
0
0.5
1
1.5

Au fur et à mesure que le temps croît,
toutes les trajectoires se superposent sur un “cycle limite”.

Malgré ses défauts, la modélisation numérique et informatique
est un merveilleurx outil pour la simulation
et la prédiction de phénomènes complexes !

Attention de ne pas lui faire dire n’importe quoi !