

Réflexions sur le rôle de Mathematica en calcul scientifique

Rémi Barrère (rbarrere@ens2m.fr)

Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et des Microtechniques

Université de Franche-Comté, Besançon, France

Résumé : Cet exposé est dédié au pouvoir fédérateur de Mathematica, à la vision unitaire et cohérente qu'il apporte en informatique, en modélisation et calcul scientifique ainsi que dans le domaine de la pédagogie.

Introduction

Le calcul formel et la programmation symbolique amènent un changement radical en calcul scientifique.

Ces outils exigent des compétences multidisciplinaires mais offrent en retour des possibilités nouvelles.

Mathematica en particulier se présente comme un langage pivot, interdisciplinaire, pour le calcul scientifique et la modélisation.

Mais ces outils novateurs suscitent des questions nouvelles et des besoins inédits et doivent évoluer avec leur environnement : informatique de réseau, communication scripto-graphique, interopérabilité, cognition...

Un langage multifonction et multiparadigme

Mathematica =

calcul formel (numérique exact, algébrique, analytique) +
bibliothèque numérique et graphique +
langage multiparadigme à syntaxe mathématique +
interface programmable (ergonomie)

langage multiparadigme =

paradigme procédural (Fortran, Basic, Pascal, C...) +
paradigme fonctionnel (Lisp, Haskell, Miranda...) +
paradigme transformationnel — à base de règles (Snobol, Prolog, Caml...) +
aspects orientés objets (Smalltalk, C++...)

Au delà de cette synthèse qui rassemble les grandes orientations de l'informatique, Mathematica rapproche les trois disciplines constitutives de la modélisation : mathématiques, informatique, physique (sciences industrielles, chimie, biologie, économie...).

Un langage unificateur

Principe fondamental : on définit des fonctions comme règles de transformation

e.g., $\text{magnitude}[\{x_ , y_ \}] := \sqrt{x^2 + y^2}$
⇒ programmes
= collections de fonctions (de définitions algorithmiques de fonctions)
→ définies comme règles de transformation (réécriture)
≈ formules mathématiques,
que l'on peut interpréter :

- en mathématiques comme systèmes d'axiomes pouvant être étudiés dans le cadre de la théorie des modèles (sémantique dénotationnelle) ;
- en informatique, comme fonctions (procédures, sous-programmes) opérant sur des structures de données (≈ objets logiciels) ;
- en physique, comme règles de calcul pour la modélisation et la simulation des systèmes ou des processus.

Exemple du calcul d'impédances

Le calcul d'impédances des montages série et parallèle s'appuie sur :

- trois règles pour définir les impédances des composants élémentaires ;
- deux autres pour les assemblages série et parallèle.

Mathématiques :
programmes
≈ axiomes

Physique :
programmes ≈
règles de calcul

```

Impedance[Resistor[r_], w_ : ω] ^:= r
Impedance[Inductor[l_], w_ : ω] ^:= I l w
Impedance[Capacitor[c_], w_ : ω] ^:= -I / (c w)

Impedance[SeriesMount[s_], w_ : ω] ^:=
  Apply[Plus, Thread[Impedance[s, w]]]
Impedance[ParallelMount[s_], w_ : ω] ^:=
  1 / Apply[Plus, 1 / Thread[Impedance[s, w]]]

Impedance[SeriesMount[{Resistor[r],
  ParallelMount[{Capacitor[c], Inductor[l]}]
}]
] // Simplify

r +  $\frac{i l \omega}{1 - c l \omega^2}$ 

```

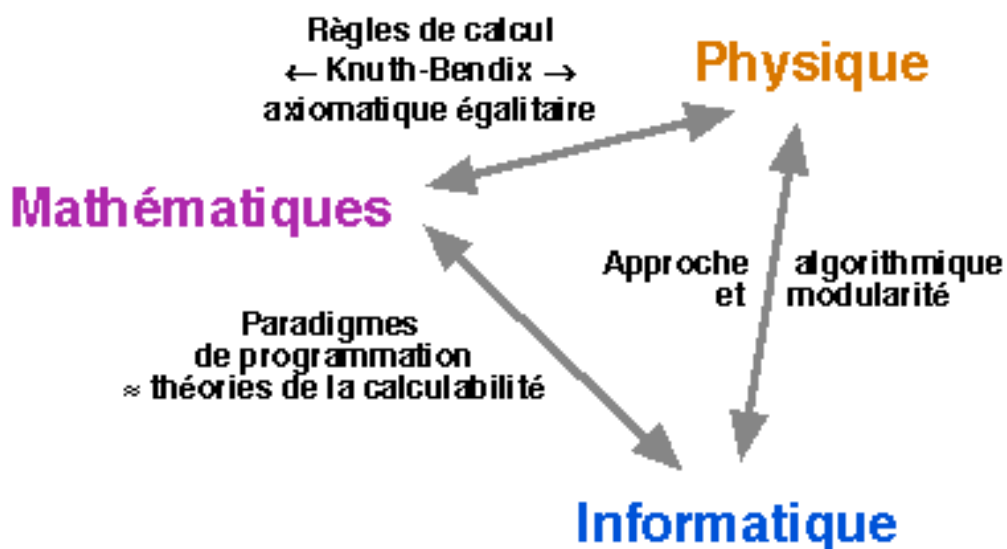
Informatique :
programmes ≈ fonctions opérant
sur des structures de données

Ces règles peuvent être vues :

- comme des règles de calcul pour la simulation des assemblages de dipôles (physique) ;
- comme les axiomes constitutifs du modèle des montages série-parallèle (mathématiques) ;
- comme fonctions (récurrentes) opérant sur des structures de données (informatique).

Un langage fédérateur pour l'interdisciplinarité

Avec son langage à syntaxe mathématique, Mathematica facilite également le dialogue entre les disciplines mentionnées.



- entre mathématiques et informatique : paradigmes de programmation \approx théories de la calculabilité ; correspondance de Curry-Howard (preuves de programmes).

- entre mathématiques et physique : passage des axiomes égalitaires aux règles de calcul \approx algorithme de Knuth-Bendix ou ses variantes.

- entre physique et informatique : approche algorithmique de la modélisation en termes de combinaisons de primitives et de fonctions opérant sur des structures de données.

Une réalisation pédagogique : micro-projets de modélisation avec Mathematica

Motivation : Mathematica comme outil d'intégration pour l'enseignement : paradigmes de programmation + algorithmique + calcul formel + techniques numériques + modélisation-simulation ; économie pédagogique.

Objectifs : micro-projets interdisciplinaires \approx TPE \approx TIPE = étude (maths - algorithmique - physique) + développement (informatique) + travail d'équipe ("tri'n'hommes") + compte-rendu (écrit + optionnellement oral en Anglais).

Modalités : choix de sujets, travail réparti sur un semestre, formation et autoformation, recherche documentaire, réunions, comptes rendus intermédiaires.

Ressources : site web des projets, bibliothèques, Internet, enseignants-chercheurs, ordinateurs en libre accès, licence à jetons de Mathematica... Détails à l'URL : <http://macmaths.ensmm.fr/students>

μ -projets : planning sur un semestre

Comme tout projet, ces micro-projets font l'objet d'une planification soignée qui rythme la progression des activités pendant le semestre.

semaine 1 : présentation des projets

semaines 2 - 3 : choix des sujets

semaines 4 - 6 : formation, bibliographie, étude

semaine 7 : compte rendu d'étude

semaines 8 - 10 : étude, conception, développement

semaine 11 : rapport intermédiaire

semaines 12 -14 : corrections, finition

semaine 14 : rapport écrit

semaine 15 : présentation orale (le cas échéant)

μ -projets : bilan

Bilan pédagogique

- délai de mise au point (~ 3 ans) ;
- nécessite encadrement régulier et scrupuleux + aide aux élèves ;
- intérêt des étudiants versus réticence du corps enseignant ;
- rapproche les élèves de leur futur métier, transition scolaire-professionnel.

Bilan Mathematica + calcul scientifique : support indéfectible

- robustesse / variété des sujets (maths, algorithmique, physique, sciences industrielles) ;
- robustesse / interdisciplinarité (problèmes mixtes) ; souplesse ;
- économie : primitives de haut niveau ; focalisation sur les problèmes à résoudre.

Perspectives

- informatique de réseau ; projets coopératifs ;
- sujets de recherche ou d'entreprises.

Quelques extraits

- légèrement adaptés pour les besoins de la démonstration ;
- rarement produits finis et fiables.

Modélisation en électronique : quadripôles

Analyse de stabilité

Spectroscopie ionique (calcul de trajectoires)

Approche algorithmique des variétés et GAO

Visualisation de molécules

Autres sujets : cryptographie, décimales de π , transformation en Z , codage de Huffman, méthode de Newton, méthode de Galerkin, éléments finis, réseaux électriques, amplificateurs opérationnels, oscillateurs, vibrations mécaniques, diffraction et interférences, diffusion thermique, calculs de pH, modèles compartimentaux... On trouvera la liste actualisée des sujets et une sélection de rapports à l'URL : <http://macmaths.ensmm.fr/students>

Discussion et perspectives

Logiciel libre versus propriétaire

- logiciels ou documents libres = connaissance libre \neq marchandisation ;
- différentes licences : GPL, LGPL, Creative Commons...
- cohabitation libre et propriétaire.

Vers une informatique de réseau

- organisations distribuées, réseaux d'établissements, instrumentation en ligne...
- ressources mutualisées : calcul parallèle, e-médiathèques ou e-logithèques, services web...
- travail coopératif non-local : ingénierie, pédagogie ; démarches participatives (wikis...)
- penser et exprimer le calcul scientifique dans ces termes : simulateurs en ligne...

Interopérabilité et cohérence conceptuelle

- interopérabilité : SGML, HTML, XML, WSDL, MathML... mais il manque encore un :
- langage commun normalisé pour documents ou données + algorithmes ;
- cohérence conceptuelle vs assemblage hétéroclite.

Grammaire graphique - cognition

- interfaces scripto-graphiques : langage, grammaire scripto-graphique ;
- schémas conceptuels, métaphores conceptuelles, superpositions conceptuelles ;
- intégrer des schémas conceptuels fondamentaux dans les langages de programmation.

Conclusion

- Mathematica comme outil d'intégration : langage multiparadigme, syntaxe mathématique, langage interdisciplinaire de modélisation.
- élargir cette intégration à l'informatique de réseau, à l'informatique graphique et peut-être à des aspects cognitifs.
- science et ingénierie de la connaissance au confluent des technologies de l'information, de l'épistémologie et des neurosciences.

Remerciements

Je remercie quelques collègues qui contribuent à l'encadrement scientifique de certains projets et les étudiants qui m'ont autorisé à rendre publics leurs rapports de projets ; ceux-ci se trouvent à l'URL : <http://macmaths.ensmm.fr/students>

Bibliographie abrégée

- R. Barrère : Mathematica, Vuibert, 2002
G. Lakoff, R. Nuñez : Where mathematics come from, Basic Books, 2000
S. Wolfram : The Mathematica book, Wolfram Media, 2003
Wolfram Research : [site web pour Mathematica] <http://www.wolfram.com>