

LES LOGICIELS DE CALCUL FORMEL et LEUR USAGE EN SCIENCES PHYSIQUES

Alain LEROUX
Lycée Naval, 29240 Brest-Naval
internet Leroux@enst-bretagne.fr

Résumé

Les Outils de Calcul Formel retiennent de plus en plus l'attention des enseignants et des chercheurs, d'abord en Mathématiques, et maintenant en Sciences Physiques.

A l'occasion de la Réforme de l'enseignement en Classes Préparatoires aux Grandes Ecoles, leur usage va y être introduit, et remplacer celui du Pascal. Dans cet article, nous les présentons, et, sur l'exemple de Maple, nous en montrons l'intérêt pour l'enseignement des Sciences Physiques.

Qu'est-ce qu'un Outil de Calcul Formel? Il s'agit d'un ensemble de programmes interactifs et de bibliothèques de calcul capables de réaliser les opérations demandées aux Mathématiques (dérivation, intégration, calcul algébrique), de faire des calculs numériques avec une précision aussi élevée que souhaitée, de tracer des courbes et surfaces.

(Nous abrégerons leur nom en O.C.F. dans la suite de cet article.)

La meilleure façon de les présenter est de montrer le déroulement d'une session employant l'un d'eux.

1 Une session d'un O.C.F.

Nous avons choisi ici Maple, qui est un progiciel canadien, typique de ces nouveaux outils. Les mêmes fonctionnalités, plus ou moins étendues, existent sur d'autres produits comme Derive, Reduce, Macsyma, Mathematica (voir paragraphe 6)...

1. Une session d'un O.C.F.

Les commandes Maple sont en caractères de machine à écrire. Le signe «>» représente l'invite («prompt» en Anglais) du logiciel. Le texte en caractères romains (comme cette phrase) représente les commentaires que nous pouvons insérer dans toute feuille de calcul. Le texte en italique et les formules algébriques représentent les réponses de Maple.

Nous chargeons d'abord notre bibliothèque personnelle:

```
> with(libphys):
```

1.1 Potentiel électrostatique d'un ensemble de 2 charges:

Le potentiel d'une charge ponctuelle est la fonction bien connue de Q, x, y que l'on définit par:

```
> Pot:=(Q,x,y)->Q/(4*Pi*epsilon0*(x^2+y^2)^(1/2));
```

$$Pot := (Q, x, y) \rightarrow \frac{1}{4} \frac{Q}{\pi \epsilon_0 \sqrt{x^2 + y^2}}$$

Nous voulons étudier le potentiel créé par la charge $+q$ située en $(a/2, 0)$ et par la charge $-q$ située en $(-a/2, 0)$:

```
> U:=Pot(q,x-a,y)+Pot(-q,x+a,y);
```

$$U := \frac{1}{4} \frac{q}{\pi \epsilon_0 \sqrt{(x-a)^2 + y^2}} - \frac{1}{4} \frac{q}{\pi \epsilon_0 \sqrt{(x+a)^2 + y^2}}$$

Traçons la surface en trois dimensions $z=U(x,y)$:

Pour cela, tous les arguments doivent être numériques: x et y doivent rester des variables les autres paramètres sont automatiquement mis à 1:

```
> f:=supprime_params(U,{x,y});
```

$$f := .07957747153 \frac{1}{\sqrt{(x-1)^2 + y^2}} - .07957747153 \frac{1}{\sqrt{(x+1)^2 + y^2}}$$

Le tracé est facile à obtenir (voir résultat figure 1):

```
> plot3d(f,x=-2..2,y=-2..2,view=-0.1..0.1);
```

1. Une session d'un O.C.F.

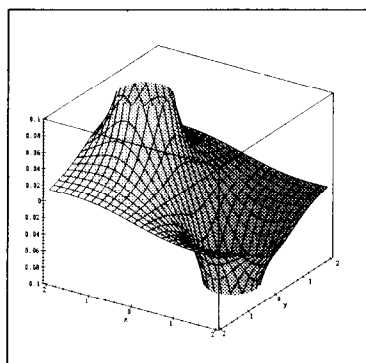


FIG. 1 - Surface de potentiel $U(x,y)$

Bien entendu, il est possible de changer l'orientation du repère à la souris, de modifier l'ensemble pour faire apparaître les lignes de niveau (voir figure 2)

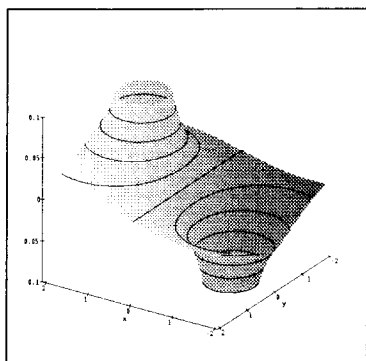


FIG. 2 - Surface de potentiel $U(x,y)$; lignes de niveau

1. Une session d'un O.C.F.

On voit aussi que le potentiel est très voisin de 0 dès que l'on s'écarte quelque peu de l'origine.

On peut aussi tracer les familles de courbes $U(x)$ pour des valeurs de y données.

Construisons pour cela l'ensemble des fonctions en remplaçant y par $0,3.k$ dans f , k variant de -3 à 3 :

```
> Ens:={seq(subs(y=0.3*k,f),k=-3..3)};
```

$$\begin{aligned}
 Ens := & \left\{ .07957747153 \frac{1}{\sqrt{(x-1)^2 + .36}} - .07957747153 \frac{1}{\sqrt{(x+1)^2 + .36}}, \right. \\
 & .07957747153 \frac{1}{\sqrt{(x-1)^2 + .09}} - .07957747153 \frac{1}{\sqrt{(x+1)^2 + .09}}, \\
 & .07957747153 \frac{1}{\sqrt{(x-1)^2}} - .07957747153 \frac{1}{\sqrt{(x+1)^2}}, \\
 & \left. .07957747153 \frac{1}{\sqrt{(x-1)^2 + .81}} - .07957747153 \frac{1}{\sqrt{(x+1)^2 + .81}} \right\}
 \end{aligned}$$

Traçons la famille de courbes (cf figure 3):

```
> plot(Ens,x=-2..2,-0.5..0.5);
```

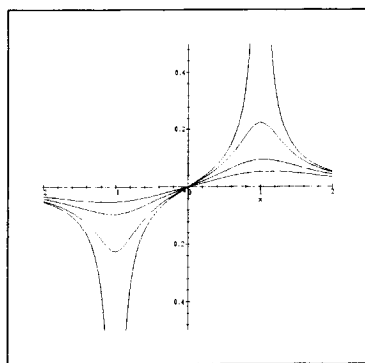


FIG. 3 - Lignes de potentiel $U(x,y)$

1. Une session d'un O.C.F.

1.1.1 Représentation polaire et champ:

On peut également opter pour une représentation polaire:

> Upolaire:=subs(x=r*cos(theta),y=r*sin(theta),U);

$$Upolaire := \frac{1}{4} \frac{q}{\pi \varepsilon_0 \sqrt{(r \cos(\theta) - a)^2 + r^2 \sin(\theta)^2}} - \frac{1}{4} \frac{q}{\pi \varepsilon_0 \sqrt{(r \cos(\theta) + a)^2 + r^2 \sin(\theta)^2}}$$

On peut en étudier la forme asymptotique lorsque $r \rightarrow \infty$, en conservant les termes d'ordre 2 au plus. Il suffit de faire un développement limité, pour $a \rightarrow 0$

> Upol1:=xtaylor(Upolaire,r,3);

$$Upol1 := \frac{1}{2} \frac{q \cos(\theta)}{\pi \varepsilon_0 \sqrt{a^2}} r + O(r^3)$$

On remarque que Maple n'a pas simplifié: c'est un choix délibéré des concepteurs; ce logiciel n'applique que les règles de simplification toujours valables.

Mais, me direz-vous, on a toujours $\cos^2(\theta) + \sin^2(\theta) = 1$! Voire! Et si θ était complexe???

On peut tout de même obtenir l'évidente simplification (pour nous) en précisant:

> assume(theta,real);assume(r>0);

En outre, nous Physiciens n'avons pas l'habitude de conserver les termes en $O(\frac{1}{r^3})$, qui d'ailleurs, posent ensuite des problèmes. L'option 'polynome' nous permet de les faire disparaître:

> Upol2:=xtaylor(Upolaire,a,3,'polynome');

$$Upol2 := \frac{1}{2} \frac{q r^{\sim} \cos(\theta^{\sim}) a}{\pi \varepsilon_0 (r^{\sim 2} \cos(\theta^{\sim})^2 + r^{\sim 2} \sin(\theta^{\sim})^2)^{3/2}}$$

Nous voyons que θ est suivi du symbole $\sim$ ce qui signifie que certaines hypothèses sont faites sur son domaine de valeurs.

Après simplification, la forme classique est bien obtenue:

> Upol3:=expand(simplify(Upol2));

$$Upol3 := \frac{1}{2} \frac{q \cos(\theta^{\sim}) a}{\pi \varepsilon_0 r^{\sim 2}}$$

Le champ peut s'en déduire:

> Champ:=grad(-Upol3,[r,theta,z],coords=cylindriques);

$$Champ := \left[\frac{q \cos(\theta^{\sim}) a}{\pi \varepsilon_0 r^{\sim 3}}, \frac{1}{2} \frac{q \sin(\theta^{\sim}) a}{r^{\sim 3} \pi \varepsilon_0}, 0 \right]$$

L'équation des lignes de champ peut être trouvée:

1. Une session d'un O.C.F.

```
> LdcAlg([Champ[1], Champ[2]], [r, theta], polaire);
r~(theta) = -C1 - C1 cos(theta)^2
```

1.2 Mécanique:

1.2.1 Oscillateur harmonique amorti:

Son équation différentielle est:

```
> Equ1:=diff(x(t), t$2)+2*lambda0*diff(x(t), t)+(omega0^2)*x(t)=0;
```

$$Equ1 := \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} x(t) \right) + 2\lambda_0 \left(\frac{\partial}{\partial t} x(t) \right) + \omega_0^2 x(t) = 0$$

Réolvons, pour les conditions initiales $x(0) = 0$, $v(0) = v_0$:

```
> dsolve({Equ1, x(0)=0, D(x)(0)=v0}, x(t));
```

$$x(t) = \frac{1}{2} \frac{v_0 e^{(-\lambda_0 + \sqrt{\%1})t}}{\sqrt{\%1}} - \frac{1}{2} \frac{v_0 e^{(-\lambda_0 - \sqrt{\%1})t}}{\sqrt{\%1}}$$

$$\%1 := \lambda_0^2 - \omega_0^2$$

On peut tracer son «portrait de phase», sans même résoudre l'équation différentielle. La fonction nécessaire, **phaseportrait**, est contenue dans la bibliothèque «DEtools» que nous chargeons:

```
> with(DEtools);
```

```
[DEplot, DEplot1, DEplot2, Dchangevar, PDEplot, dfieldplot,
phaseportrait]
```

phaseportrait nécessite deux équations différentielles d'ordre 1 en x et v , l'une pour la vitesse, l'autre pour la position. Voici la première:

```
> Equ2:=diff(x(t), t)=v;
```

$$Equ2 := \frac{\partial}{\partial t} x(t) = v$$

Remplaçons $\frac{dx(t)}{dt}$ par $v(t)$, prenons des valeurs numériques pour les paramètres, et nous obtenons la seconde équation:

```
> Equ3:=subs(diff(x(t), t)=v(t), omega0=6.28, lambda0=1, Equ1);
```

$$Equ3 := \left(\frac{\partial}{\partial t} v(t) \right) + 2v(t) + 39.4384 x(t) = 0$$

On choisit comme conditions de départ $x=1$, $v=1$, et un pas de 0.02:

```
> phaseportrait([Equ2, Equ3], [x, v], 0..5, {[x(0)=1, v(0)=1]},
> stepsize=0.02);
```

1. Une session d'un O.C.F.

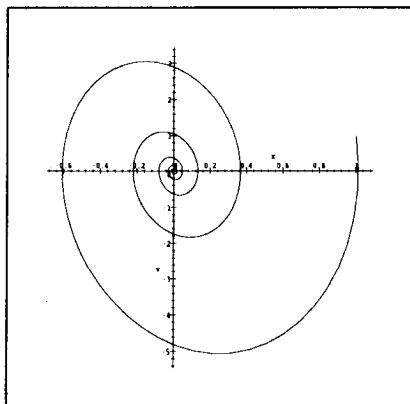


FIG. 4 - Portrait de phase d'un oscillateur amorti

1.2.2 Oscillateur de Van Der Pol

Nous choisirons maintenant l'exemple de l'oscillateur de Van Der Pol, modèle d'oscillateur non-linéaire entretenu.

Son équation différentielle est:

```
> Equ1:=diff(x(t),t$2)-2*lambda0*(1-(x(t)/x0)^2)*diff(x(t),t)+
> (omega0^2)*x(t)=0;
```

$$Equ1 := \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} x(t) \right) - 2\lambda_0 \left(1 - \frac{x(t)^2}{x_0^2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} x(t) \right) + \omega_0^2 x(t) = 0$$

Il est facile de vérifier que cette équation n'admet pas de solution connue:

```
> dsolve(Equ1,x(t));
```

Maple ne fournit aucune réponse car il ne sait pas résoudre. Nous allons cependant obtenir le portrait de phase:

```
> Equ2:=diff(x(t),t)=v;
```

$$Equ2 := \frac{\partial}{\partial t} x(t) = v$$

1. Une session d'un O.C.F.

```
> Equ3:=subs(diff(x(t),t)=v(t),omega0=6.28,lambda0=2,x0=1,Equ1);
```

$$Equ3 := \left(\frac{\partial}{\partial t} v(t) \right) - 4 \left(1 - x(t)^2 \right) v(t) + 39.4384 x(t) = 0$$

On choisit deux points de départ différents:

```
> phaseportrait([Equ2,Equ3],[x,v],0..5,{[x(0)=1.5,v(0)=0],[x(0)=3,
> v(0)=0]},stepsize=0.02);
```

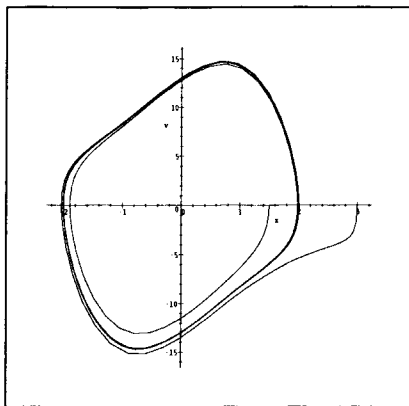


FIG. 5 - Portrait de phase d'un oscillateur de Van der Pol

On vérifie (voir figure 5) que les différentes trajectoires de phase convergent vers un même cycle limite, dont la forme dépend du rapport λ_0/ω_0 .

1.3 aide en ligne

Supposons que nous ayons oublié la syntaxe de «xtaylor». Il suffit de mettre le curseur sur le mot **xtaylor** de taper <Ctrl-F1> (touche «Control» et touche «F1») pour obtenir la fenêtre présentée à la figure 6.

1. Une session d'un O.C.F.

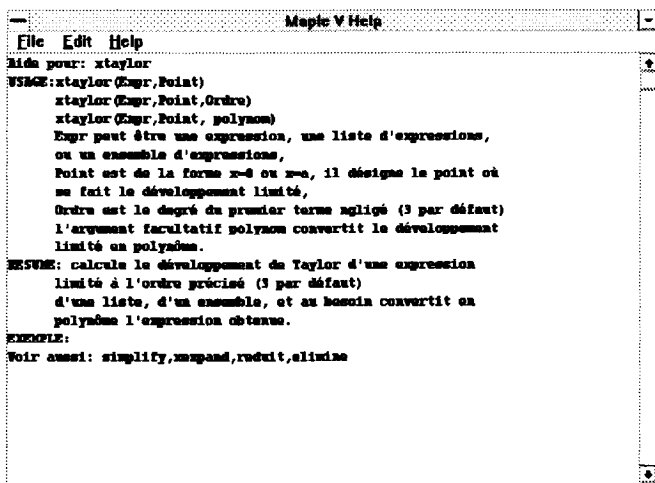


FIG. 6 - Aide en ligne pour un mot clé

D'autres méthodes sont possibles, notamment en cliquant sur l'option «Help» du menu principal, puis sur «Browser» on obtient un classement par rubriques (cf. figure 7).

2. Exemple d'emploi en Chimie

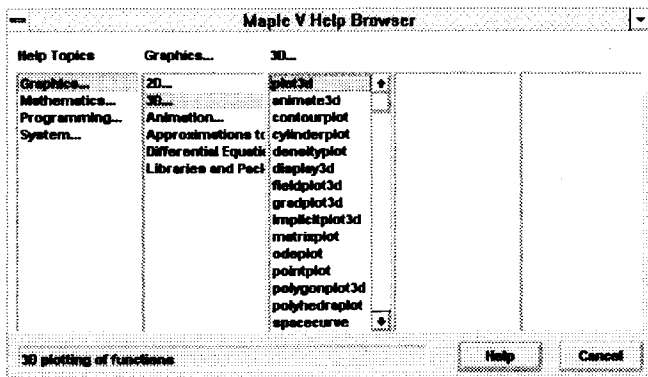


FIG. 7 - Aide en ligne: le «brosseur»

2 Exemple d'emploi en Chimie

Maple se prête fort bien au tracé de courbes de dosage, et à l'étude des cinétiques chimiques. Montrons-en un exemple:

Il s'agit du dosage d'un acide faible, noté AH, par la soude. On vers un volume x de soude de concentration c , dans un volume V d'acide, de concentration c_0 . On choisit ici $c = c_0 = 0,001 \text{ mol.l}^{-1}$. La constante d'acidité sera $K_a = 10^{-3}$. Les équations s'écrivent:

- > Electroneutralite:=Amoins+OHmoins=Hplus+Naplus:
- > Produit_ionique_de_l_eau:=Ke=Hplus*OHmoins:
- > Conservation_de_l_acide:=Amoins+AH=c0*V/(V+x):
- > Conservation_de_la_soude:=Naplus=c*x/(V+x):
- > Constante_d_acidite:=Ka=Amoins*Hplus/AH:

Donnons les valeurs numériques:

- > Ka:=1e-3:Ke:=1e-14:c:=c0:V:=10:c0:=0.001:

2. Exemple d'emploi en Chimie

On peut remplacer Hplus par 10^{-pH} :

> Hplus:=10[^](-pH);

$$Hplus := 10^{(-pH)}$$

Le système d'équations est alors:

> **systeme**:= {Electroneutralite, Conservation_de_l_acide,
> Conservation_de_la_soude, Produit_ionique_de_l_eau,
> Constante_d_acidite};

$$\begin{aligned} \text{systeme} := \left\{ \begin{aligned} .001 &= \frac{A\text{moins } 10^{(-pH)}}{AH}, \\ A\text{moins} + OH\text{moins} &= 10^{(-pH)} + N\text{aplus}, N\text{aplus} = .001 \frac{x}{10+x}, \\ .1 \cdot 10^{-13} &= 10^{(-pH)} OH\text{moins}, A\text{moins} + AH = .010 \frac{1}{10+x} \end{aligned} \right\} \end{aligned}$$

Chargement de la bibliothèque de chimie:

> with(libchim):

La méthode la plus simple est alors de calculer x en fonction du pH, en résolvant le système par élimination:

> x1:=elimine(systeme, [Amoins, OHmoins, Nplus, AH, x]);

$$\begin{aligned} x1 := & -1. \left(-10. + .1000000000 \cdot 10^{16} \left(10^{(-1.pH)} \right)^2 \right. \\ & - .1000000010 \cdot 10^{13} \cdot 10^{(-1.pH)} + .1000000000 \cdot 10^{19} \left(10^{(-1.pH)} \right)^3 \Big) / \Big(\\ & -1. + .2000000000 \cdot 10^{15} \left(10^{(-1.pH)} \right)^2 + .9999999900 \cdot 10^{11} \cdot 10^{(-1.pH)} \\ & + .1000000000 \cdot 10^{18} \left(10^{(-1.pH)} \right)^3 \Big) \end{aligned}$$

Tracé de la courbe:

> plot([x1, pH, pH=1..13], x=0..20, pH=0..14);

3. Les possibilités des O.C.F.

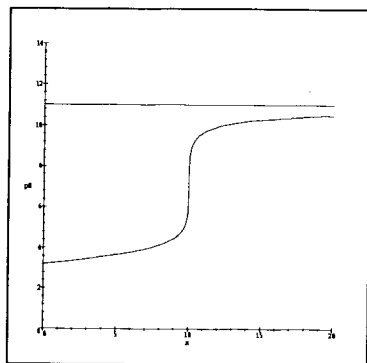


FIG. 8 - Dosage d'un acide faible par la soude avec $c = K_a = 10^{-3} \text{ mol.l}^{-1}$

Voilà qui nécessite peu de calculs pour obtenir les résultats essentiels dans un cas où nos calculs et nos approximations habituels ne s'appliquent plus...

3 Les possibilités des O.C.F.

3.1 Graphisme

Un des points forts de Maple et de Mathematica est leur aptitude à fournir rapidement des courbes, des surfaces, des volumes, en quelques instructions. Voici par exemple le tracé de la surface représentant l'orbitale d_{z^2} de l'atome d'hydrogène:

```
> sphereplot(abs(3*cos(theta)^2-1),phi=0..2*Pi,theta=0..Pi,
> axes=boxed);
(Voir figure 9)
```

3. Les possibilités des O.C.F.

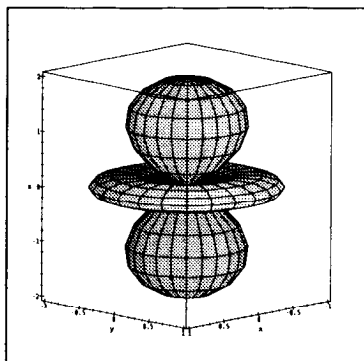


FIG. 9 - Orbitale dz^2 de l'hydrogène

Maple permet aussi des animations. On peut ainsi voir se propager (assez lentement) une onde le long d'un fil.

3.2 Intégration:

Tous les O.C.F. savent trouver les primitives et intégrales de fonctions plus ou moins classiques:

```
> int(exp(-k*x^2), x=0..a);
```

$$\frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\sqrt{k} a)}{\sqrt{k}}$$

```
> int(exp(-I*k*x)*(1-x/a), x=0..a);
```

$$-\frac{e^{(-I k a)}}{k^2 a} - \frac{I(k a + I)}{k^2 a}$$

(I est tel que $I^2 = -1$)

Mais il existe des limites à ce qu'ils savent faire; par exemple, une intégrale comme celle-ci (diffraction par un diaphragme circulaire) ne peut être trouvée:

```
> int(exp(-I*k*x)*(1-x^2/a^2)^(1/2), x=0..a);
```

$$\int_0^a e^{(-I k x)} \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}} dx$$

(Elle conduit en fait à une fonction de Bessel). Maple utilise l'algorithme de

3. Les possibilités des O.C.F.

Risch qui permet d'intégrer les «fonctions élémentaires» mais pas toutes celles écrites sous forme d'exponentielles.

Le résultat de l'intégration précédente peut néanmoins être obtenu numériquement:

```
> evalf(int(exp(-I*0.2*x)*(1-x^2)^(1/2),x=0..1));
.7814777121 - .06648909193 I
```

3.3 Equations différentielles

Les O.C.F. savent résoudre un certain nombre d'équations différentielles, parfois peu évidentes.

```
> Equ:=r^2*diff(g(r),r$2)+r*diff(g(r),r)+(r^2-N^2)*g(r)=0;
Equ := r^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} g(r) \right) + r \left( \frac{\partial}{\partial r} g(r) \right) + (r^2 - N^2) g(r) = 0
```

```
> dsolve(Equ,g(r));
g(r) = _C1 BesselJ(N,r) + _C2 BesselY(N,r)
```

Mais même dans les cas où la solution n'est pas connue, une résolution numérique peut être obtenue:

```
> Equ:=diff(g(t),t$2)+cos(t)*diff(g(t),t)+sin(t)*g(t)=0;
Equ := \left( \frac{\partial^2}{\partial t^2} g(t) \right) + \cos(t) \left( \frac{\partial}{\partial t} g(t) \right) + \sin(t) g(t) = 0
```

```
> res:=dsolve({Equ,g(0)=1,D(g)(0)=0},g(t),type=numeric);
res := proc(rkf45_x) ... end
```

Le résultat est une procédure (nommée rkf45_x) qui utilise l'algorithme de Runge Kutta d'ordre 4-5, et qui, appelée avec un argument numérique, fournit la valeur du temps, de la fonction et de sa dérivée:

```
> res(2);
\left[ t = 2, g(t) = .2415941444169823, \frac{\partial}{\partial t} g(t) = -.9249079917468421 \right]
```

La solution peut aussi être donnée par un développement limité:

```
> res:=dsolve({Equ,g(0)=1,D(g)(0)=0},g(t),type=series);
res := g(t) = 1 - \frac{1}{6} t^3 + \frac{1}{24} t^4 + O(t^6)
```

3. Les possibilités des O.C.F.

3.4 Calcul numérique:

Des algorithmes de calcul particulièrement précis sont implémentés dans les O.C.F., et permettent d'obtenir une précision arbitrairement grande.

Sous Maple, il suffit d'indiquer le nombre de décimales souhaitées:

> **Digits:=250;**

Digits := 250

> **evalf(Pi);**

```
3.1415926535897932384626433832795028841971693993751058\
20974944592307816406286208998628034825342117067\
98214808651328230664709384460955058223172535940\
81284811174502841027019385211055596446229489549\
30381964428810975665933446128475648233786783165\
271201909
```

Cette précision est anecdotique pour nous Physiciens et Chimistes. Toutefois, nous avons vu qu'il était possible d'obtenir une intégration numérique des fonctions. Il est possible de même de trouver numériquement les racines, même complexes d'une équation, de résoudre numériquement des équations différentielles, etc...

Il était déjà possible de réaliser ces calculs en Pascal, mais la simplicité de mise en œuvre est ici incomparablement plus grande.

Par contre, les O.C.F. utilisant un interpréteur et non un compilateur, **le calcul numérique sera toujours plus lent qu'en Pascal.**

3.5 Le problème des simplifications:

On est parfois déçu de la forme des résultats obtenus par les O.C.F., notamment par Maple.

Un problème est de définir à chaque fois la forme «la plus simple d'un résultat». Quelle est-elle? Il y a autant de cas particuliers que de formules!

Par ailleurs, le choix des auteurs a été de ne faire de simplifications que lorsqu'elles étaient applicables à tous les cas, y compris les plus extrêmes (arguments complexes ou nuls): nous savons dans quel domaine nos variables sont fixées, mais il faut l'indiquer au système pour qu'il puisse simplifier en toute connaissance de cause.

La conséquence de ce choix est particulièrement visible en trigonométrie, où les expressions peuvent souvent être rendues bien plus compactes «à la main».

4. *Le Calcul Formel dans la Recherche et l'Enseignement*

4 Le Calcul Formel dans la Recherche et l'Enseignement

Dans la Recherche Universitaire, beaucoup de travaux de vérification se font avec les O.C.F., et quelques erreurs dans des publications mathématiques célèbres ont pu être ainsi mises en évidence.

Ils ont leur place partout où les calculs sont si fastidieux que l'on renonce à les effectuer.

Une application pratique assez étonnante des O.C.F. a ainsi été faite dans les animations publicitaires: lorsque l'on fait tourner un volume dans l'espace, et que l'on veut déterminer ses lignes cachées, pour obtenir un rendu suffisamment réaliste, le travail numérique nécessite un temps de calcul considérable. On le réduit considérablement en décrivant les surfaces par des polynômes de degré 4 ou supérieur, et en calculant formellement les courbes de limite de visibilité...

Le calcul assisté par ordinateur n'a pas encore pris totalement sa place dans l'enseignement supérieur. Toutefois, un cours de Calcul Formel existe en Licence et Maîtrise à Brest depuis 1984, une maîtrise spécialisée existe à Strasbourg, d'autres cours existent à Grenoble, et à l'étranger (Canada, Suisse, Norvège, USA), où il représente un complément intéressant à l'enseignement mathématique traditionnel, en permettant d'expérimenter sur les concepts étudiés en concentrant l'attention des élèves plutôt sur les idées que sur les manipulations algébriques..

L'enseignement secondaire les ignore totalement, mais déjà les premiers de ces progiciels, lents et maladroits, font leur apparition sur les calculatrices de nos élèves notamment sur HP48 et bientôt sur TI. Il est déjà techniquement possible ¹ d'implanter certains d'entre eux sur des calculatrices autorisées aux examens et concours.

Bientôt chacun de nos élèves aura en permanence à sa disposition un tel outil. Certains s'en lamentent, y voyant la fin de l'enseignement des Mathématiques, d'autres espèrent y voir une chance de renouvellement des méthodes et des objectifs de celui-ci.

5 Pourquoi remplacer Pascal par un O.C.F.?

La question a été longuement débattue dans les commissions de programmes. Nous, Physiciens et Chimistes, sommes, à de rares exceptions près, plutôt utilisateurs de logiciels que programmeurs. Dans les T.D. d'informatique prévus en Classe Préparatoire aux Grandes Ecoles, nos élèves passaient souvent

¹L'auteur a pu le vérifier sur une calculatrice HP95 avec «Dérive» et «Mumath»

6. Les produits disponibles:

plus de temps à taper le texte des programmes et à les déboguer qu'à les faire fonctionner, à moins d'utiliser des logiciels «clé en main», qui réduisent un peu trop la part d'initiative de l'élève.

Il fallait un progiciel utilisant un interpréteur, pour pouvoir taper quelques lignes et tester le résultat. Ce progiciel devait pouvoir réaliser tous les calculs numériques classiques simplement, y ajouter les tracés de courbes et de surfaces, et être programmable.

Les O.C.F. remplissent toutes ces conditions, avec l'avantage supplémentaire de traiter des problèmes de façon algébrique, ce qui rend leurs résultats particulièrement généraux.

De même que la simulation ne peut ni ne doit remplacer l'expérience, ils ne sauraient tout faire. Ce sont de puissants outils d'aide à la modélisation, mais rien de plus.

6 Les produits disponibles:

(voir bibliographie en fin d'article)

MACSYMA [5] est l'ancêtre. Développé sous l'égide du DOE (Department Of Energy) américain, il existe sur VAX, et sur station de travail SUN, IBM, HP, et même sur IBM-PC. L'interface utilisateur n'existe, à notre connaissance, qu'en mode texte. Les fonctionnalités graphiques sont rudimentaires, mais c'est un des progiciels les plus complets.

REDUCE [5] écrit en Lisp, et disponible **sous forme de source**, est certainement l'un des plus ouverts de tous ces progiciels. Initialement, il s'agissait d'un logiciel spécialisé en Physique des Hautes Energies, qui a peu à peu évolué. Il fonctionne sur un grand nombre de machines, et a un interface utilisateur très peu convivial, mais aisément améliorable.

AXIOM [5], [7] est sans doute le plus puissant, le plus moderne et le plus gourmand en ressources de tous ces progiciels. Conçu par une équipe d'IBM sous le nom de Scratchpad dans un projet de recherche au laboratoire Thomas J. Watson, il est maintenant commercialisé par la société NAG à Oxford. Il nécessite 10 MO de mémoire VIVE, et bien davantage sur disque, et fonctionne sur IBM RS-6000 et stations Unix.

MUMATH [12] a été créé en 1982, en un dialecte Lisp. Très compact (le noyau occupe 25kO) et très ouvert, mais dépourvu de fonctions graphiques, ou même d'un éditeur de texte, il est actuellement abandonné. C'est tout à fait dommage, car il est possible de l'utiliser commodément avec les ressources de Windows.

DERIVE [9], [13] est un descendant du célèbre «Mumath» de Stoutmeyer. Il possède des fonctionnalités graphiques, mais son interface commence à dater, son ergonomie laisse à désirer sur les ordinateurs modernes, et il est

7. Une bibliothèque de Physique-Chimie pour Maple:

à peine programmable. Il existe sur beaucoup de petites machines et semble réservé à l'initiation.

MAPLE [1], [2], [9], [6] a d'abord existé sur de gros ordinateurs. Il fonctionne notamment sous Unix sur stations Sun, HP, Next etc., sur Mac Intosh, compatibles PC, **avec un interface utilisateur identique sur toutes ces machines**. C'est un logiciel d'abord universitaire, développé au Canada à l'université de Waterloo et à l'ETH de Zurich, depuis 1984. La programmation, quoique fonctionnelle, ressemble assez au Pascal. Une grande partie de la bibliothèque (12 MO sur disque dans la version V-3) est issue de travaux universitaires. Un groupe de discussion participe à ses améliorations, et ses archives peuvent être consultées sur Internet, à:

<ftp.maplesoft.on.ca> sous le répertoire MUG. Son interface utilisateur est tout à fait conviviale, et les sorties produites peuvent facilement être mises en forme pour publication, au format $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$. (C'est ainsi qu'a été composé l'article que vous lisez)

MATHEMATICA [4], [8], [9], [14], a des fonctionnalités comparables à celles de Maple. Développé à partir d'un projet de thèse en Physique des Hautes Energies, il est très vite passé dans le domaine commercial, et fonctionne sur VAX, stations HP IBM-PC, NEXT, MacIntosh. Son éditeur de texte est meilleur que celui de Maple, mais son aide en ligne beaucoup plus faible. Les sorties d'impression et d'affichage se font au format Postscript. Son utilisation en ligne de commande est équivalente à celle de Maple, sa programmation plus délicate. Il existe une revue, *The Mathematica Journal*, publiée chez Addison Wesley.

7 Une bibliothèque de Physique-Chimie pour Maple:

La plupart des O.C.F. ont été conçus par et pour des Mathématiciens. Il nous reste à développer des fonctions rendant leur emploi plus commode dans nos classes. Nous avons personnellement développé une telle bibliothèque pour Maple, aussi bien en Physique qu'en Chimie, pour faciliter l'intégration, le calcul vectoriel, la mise en forme de résultats, la réduction de systèmes d'équations, l'équilibrage automatique de réactions chimiques, le calcul automatique de constantes d'équilibre rédox, etc...

Cette bibliothèque, qui n'est pas parfaite mais améliore le confort d'utilisation de Maple par les élèves peut être obtenue sur IBM-PC, ainsi que sa documentation papier, auprès de l'UDP. La libre diffusion en est autorisée, à condition que les fichiers soient accompagnés de la notice de copyright.

8. Conclusion:

8 Conclusion:

Pour nous Physiciens et Chimistes, les Outils de Calcul Formel peuvent être un moyen de réduire la place du calcul dans nos modélisations, pour nous concentrer sur les aspects originaux et formateurs de la Physique, si difficiles à enseigner. Nous passons trop de temps en classe à expliquer de longs calculs, scrupuleusement notés par nos élèves, et trop peu à discuter le bien-fondé des hypothèses qui en sont à l'origine (discussion à laquelle ils prêtent une oreille distraite). Les progiciels de Calcul Formel peuvent nous aider à favoriser une évolution dans ce sens...

Références

- [1] Bruce W. Char, Keith O. Geddes, Gaston H. Gonnet, Benton L. Leong, Michael B. Monaghan, Stephen M. Watt **First Leaves: A Tutorial Introduction to Maple V** Ed Springer-Verlag. (*livre de base sur Maple*)
- [2] Bruce W. Char, Keith O. Geddes, Gaston H. Gonnet, Benton L. Leong, Michael B. Monaghan, Stephen M. Watt **Maple V Language Reference Manual** Ed Springer-Verlag. (*livre de base sur Maple*)
- [3] Richard E. Crandall **Mathematica for the Sciences** Addison Wesley. (*orienté vers les applications en Physique de niveau 3^e cycle*)
- [4] Jean Christophe Culliol **Introduction à Mathematica** Ed. Ellipses (*initiation à Mathematica*)
- [5] J.Davenport Y.Siret E.Tournier **Calcul Formel** Ed. Masson (*LE livre de référence sur le calcul formel; uniquement Mathématique*)
- [6] Ph.Fortin et R. Pomès **Premiers pas en Maple** Ed. Vuibert. (*initiation à Maple, avec quelques exemples en Physique*)
- [7] André Heck **Introduction to Maple** Ed Springer-Verlag. (*nombreuses applications, surtout Mathématiques; quelques-unes en Physique.*)
- [8] Jacqueline Zizi **Calcul symbolique et formel** Ed. Archimède.
- [9] Jacqueline Zizi **Derive, Maple et Mathematica** Ed. Archimède *Emploi comparé de Derive Maple et Mathematica.*
- [10] R. Pomès et A. Leroux **Applications de Maple** à paraître Ed. Vuibert (*Applications de Maple à la Physique, à la Chimie, et aux Mathématiques*)

RÉFÉRENCES

- [11] Albert Lévine **Introduction à Maple** Ed. Ellipse. (*initiation à Maple, orienté Mathématiques*)
- [12] C.Wooff and D.Hodkinson **Mumath: A Microcomputer Algebra System** Academic Press, 1987.
- [13] D.Stoutmeyer **Derive User Manual** Soft Warehouse Inc.Honolulu Hawaii, 1990.
- [14] Stephen Wolfram **Mathematica A System For Doing Mathematics by Computer** Ed. Addison Wesley. (*livre de base sur Mathematica*)