

TABLE DES MATIÈRES

Avant-propos	5
Chapitre 1. Représentation graphique de fonctions	9
1.1. Les tableurs	9
1.2. Java et PtPlot	10
1.3. Python et Matplotlib	11
1.4. Gnuplot	12
1.5. Maple	13
1.6. Scilab	14
1.7. Grace	16
1.8. Pour en savoir plus	16
1.9. Exercices	18
Chapitre 2. Calcul et approximation de fonctions	23
2.1. Polynômes et fractions rationnelles	24
2.2. Relations de récurrence	25
2.3. Développement limité	26
2.4. Approximant de Padé	28
2.5. Utilisation de bibliothèques de programmes	30
2.6. Approximation de fonctions	30
2.7. Développement asymptotique	32
2.8. Représentation des nombres en machine	34
2.8.1. Les nombres entiers	34
2.8.2. Les nombres fractionnaires	35
2.9. Pour en savoir plus	36
2.10. Exercices	37

2.11. Projets	43
Chapitre 3. Représentation des grandeurs physiques	49
3.1. Une méthode simple de « dédimensionnement »	50
3.2. Construction systématique de variables sans dimension	51
3.3. Pour en savoir plus	53
3.4. Exercices	53
Chapitre 4. L'interpolation	57
4.1. Définition de l'interpolation	58
4.2. Méthode des coefficients indéterminés	59
4.3. Le polynôme d'interpolation de Lagrange	60
4.4. Le polynôme de Newton	62
4.4.1. Interpolation linéaire	62
4.4.2. Les différences divisées	63
4.4.3. La formule de Newton	63
4.5. L'erreur d'interpolation	66
4.6. Interpolation entre pivots équidistants	68
4.6.1. Les différences finies latérales	68
4.6.2. La formule d'interpolation de Newton	69
4.7. Le polynôme d'interpolation de Hermite	71
4.8. L'interpolation inverse	72
4.9. L'interpolation par intervalle	73
4.10. L'interpolation « spline »	74
4.11. Interpolation à deux ou plusieurs dimensions	78
4.12. Pour en savoir plus	79
4.13. Exercices	79
4.14. Projets	82
Chapitre 5. Résolution d'équations non linéaires	85
5.1. Méthode de bisection ou de dichotomie	86
5.2. Méthode « Regula falsi » ou des parties proportionnelles	87
5.3. Méthode du point fixe ou d'itération	88
5.4. Méthode de Newton	90

5.5. Méthode de la sécante	93
5.6. Résolution de systèmes d'équations	93
5.7. Racines des polynômes	96
5.7.1. Division des polynômes	96
5.7.2. Séparation des racines	98
5.7.3. Suites de Sturm	99
5.7.4. La méthode de Newton pour les polynômes	101
5.7.5. Scilab et les polynômes	102
5.7.6. Condition du problème	103
5.8. Pour en savoir plus	104
5.9. Exercices	104
Chapitre 6. Résolution de systèmes d'équations linéaires	109
6.1. Le « conditionnement »	111
6.2. Orientation	112
6.3. Méthode de Gauss	113
6.3.1. Algorithme	113
6.3.2. Méthode de Gauss-Jordan	117
6.3.3. Décomposition LU	117
6.3.4. Représentation matricielle de l'élimination	119
6.3.5. Permutation de lignes	121
6.3.6. Nombre d'opérations	124
6.3.7. Calcul de l'inverse de A	125
6.4. Factorisation directe	125
6.4.1. Variantes	126
6.5. Matrices particulières	127
6.5.1. Matrice à diagonale dominante	127
6.5.2. Matrice symétrique définie positive	127
6.5.3. Matrice bande	128
6.5.4. Système tridiagonal	129
6.6. Méthodes itératives de résolution des systèmes linéaires	130
6.6.1. Méthode de Jacobi	130
6.6.2. Méthode de Gauss-Seidel	132

6.6.3. Méthode de surrelaxation	133
6.6.4. Convergence des méthodes itératives	134
6.7. Système surdéterminé	135
6.8. Pour en savoir plus	136
6.9. Exercices	137
6.10. Projet	139
6.11. Annexe : rappels d'algèbre linéaire	140
6.11.1. Base et sous-espace	140
6.11.2. Image, noyau et rang	140
6.11.3. Inverse et déterminant	141
6.11.4. Normes vectorielles	141
6.11.5. Normes de matrices	142
6.11.6. Opérations sur des blocs	143
Chapitre 7. Polynômes orthogonaux	145
7.1. Définition, existence	145
7.2. Relation avec les polynômes habituels	147
7.3. Propriétés des zéros	147
7.4. Relation de récurrence	148
7.5. Équation différentielle	149
7.6. Fonction génératrice	149
7.7. Formule de Rodrigues	150
7.8. Identité de Darboux–Christofel	150
7.9. Polynômes particuliers	150
7.9.1. Legendre	150
7.9.2. Hermite	151
7.9.3. Laguerre	152
7.9.4. Tschébychef	153
7.10. Autres polynômes classiques	154
7.10.1. Jacobi	154
7.10.2. Laguerre généralisé	154
7.11. Pour en savoir plus	154
7.12. Exercices	155

Chapitre 8. Dérivation et intégration numériques	159
8.1. Rappels d'analyse	159
8.2. Dérivée d'une fonction analytique	160
8.2.1. Développements limités	160
8.2.2. Méthode des coefficients indéterminés	162
8.2.3. Dérivée du polynôme d'interpolation	163
8.2.4. Accélération de la convergence	163
8.3. Dérivée d'une fonction empirique	164
8.4. Généralités sur l'intégration numérique	165
8.5. Méthodes élémentaires d'intégration	166
8.6. Méthodes de Newton-Cotes	168
8.6.1. Intervalle fermé	168
8.6.2. Intervalle ouvert	170
8.6.3. Formules composites	171
8.7. Méthode de Romberg	172
8.8. Intégration de Gauss	174
8.9. Généralisations de la méthode de Gauss	176
8.10. Les intégrales généralisées	177
8.11. Les intégrales multiples	177
8.12. L'intégrale sans peine	178
8.13. Pour en savoir plus	179
8.14. Exercices	179
8.15. Projet	184
Chapitre 9. Analyse spectrale, transformation de Fourier numérique	187
9.1. Les méthodes de Fourier	187
9.1.1. Série de Fourier	187
9.1.2. Intégrale ou transformée de Fourier (TF)	188
9.1.3. Vocabulaire et notations	189
9.1.4. Échantillonnage	189
9.1.5. Transformée de Fourier d'une fonction échantillonnée (TFTD)	190
9.2. Transformée de Fourier discrète (TFD)	191
9.2.1. Définition	191

9.2.2. La TFD comme approximation de l'intégrale de Fourier	191
9.2.3. Notation matricielle pour la TFD	192
9.3. Transformée de Fourier rapide (TFR)	193
9.3.1. Algorithme de Cooley–Tukey ou « entrelacement en temps » ...	194
9.3.2. Le renversement binaire	197
9.3.3. Factorisation de la matrice V et variantes de l'algorithme TFR .	197
9.4. Propriétés de la transformée de Fourier discrète	199
9.5. Pour en savoir plus	205
9.6. Exercices	205
9.7. Projet	207
Chapitre 10. Valeurs propres, vecteurs propres	209
10.1. Les éléments propres sans peine	210
10.2. Méthode de la puissance n -ième et méthodes dérivées	211
10.2.1. Puissance n -ième	211
10.2.2. Puissance n -ième avec décalage	213
10.2.3. Puissance n -ième de l'inverse	213
10.2.4. Puissance n -ième de l'inverse avec décalage	213
10.2.5. Quotient de Rayleigh	214
10.3. Méthode de Jacobi	215
10.3.1. Principe	215
10.3.2. Mise en œuvre	216
10.4. Transformation de Householder	221
10.5. Factorisation QR et algorithme QR	224
10.5.1. Factorisation QR	224
10.5.2. Algorithme QR	225
10.6. Réduction à la forme tridiagonale et calcul des valeurs propres	227
10.6.1. Tridiagonalisation	227
10.6.2. Calcul des valeurs propres	228
10.7. Matrices hermitiennes	230
10.8. Pour en savoir plus	231
10.9. Exercices	231
10.10. Projets	234

Chapitre 11. Problèmes différentiels à conditions initiales	239
11.1. Méthodes analytiques	241
11.1.1. Développement de Taylor	241
11.1.2. Méthode des coefficients indéterminés (Frobenius)	242
11.1.3. Méthode de Picard, ou d'approximations successives	242
11.2. Méthodes d'Euler et de Taylor	243
11.3. Méthodes de Runge–Kutta	246
11.3.1. Méthodes d'ordre 2	246
11.3.2. Méthode d'ordre d'ordre 4	247
11.3.3. Avantages et inconvénients des méthodes de Runge–Kutta	250
11.3.4. Organisation d'un programme	251
11.4. Ordre, stabilité et convergence des méthodes à un pas	251
11.5. Méthodes à pas multiples	255
11.5.1. Schémas explicites (ouverts)	255
11.5.2. Schémas implicites (fermés)	257
11.5.3. Méthodes de prédiction-correction	258
11.5.4. Surveillance de l'erreur	260
11.5.5. Formules d'ordre 4	260
11.5.6. Avantages et inconvénients des méthodes à pas multiples	261
11.6. Ordre, stabilité et convergence des méthodes multi-pas	261
11.7. Méthodes pour les équations du second ordre	262
11.7.1. Algorithme de Verlet ou de saute-mouton	262
11.7.2. Algorithme de Numerov	263
11.8. Équations « raides »	264
11.9. Résoudre une équation différentielle en dormant	265
11.10. Pour en savoir plus	269
11.11. Exercices	269
11.12. Projets	273
Chapitre 12. Problèmes à conditions aux limites et problèmes aux valeurs propres	277
12.1. La méthode du tir	279
12.1.1. Problème aux limites	279

12.1.2. Problèmes de valeurs propres	281
12.2. Méthodes des différences finies	282
12.2.1. Problème aux limites	282
12.2.2. Problème de valeurs propres	284
12.3. Les boîtes noires	287
12.4. Pour en savoir plus	288
12.5. Exercices	288
12.6. Projets	290
Chapitre 13. Équations aux dérivées partielles	297
13.1. Approximation des dérivées par des différences finies	297
13.2. Équations de Laplace et Poisson	298
13.3. Équation de la chaleur	300
13.4. Équation des ondes	303
13.5. Pour en savoir plus	304
13.6. Exercices	305
13.7. Projet	306
Chapitre 14. Probabilités et erreurs	309
14.1. Probabilité	309
14.2. Lois de probabilité	311
14.2.1. Loi binomiale	311
14.2.2. Loi de Poisson	312
14.2.3. Loi uniforme	313
14.2.4. Loi normale ou de Gauss	313
14.2.5. Loi du χ^2 ou de Pearson	314
14.2.6. Paramètres de la loi de probabilité et paramètres de l'échantillon	315
14.2.7. Vérification d'une loi de probabilité	316
14.3. Erreurs	317
14.4. Propagation des erreurs	320
14.5. Méthode du maximum de vraisemblance	321
14.6. Méthode des moindres carrés	323
14.6.1. Ajustement sur une fonction affine	324

14.6.2. Linéarisation	326
14.7. Qualité de l'ajustement	326
14.8. Coefficient de corrélation	329
14.9. Ajustement sur une fonction linéaire de plusieurs paramètres	329
14.10. Pour en savoir plus	331
14.11. Exercices	332
Chapitre 15. Méthodes de Monte Carlo	337
15.1. Générateurs de nombres aléatoires	338
15.1.1. Principe	338
15.1.2. Vérification d'un GNA	339
15.1.3. Validation d'un GNA à l'aide d'une marche aléatoire	340
15.2. Nombres aléatoires à répartition non-uniforme	341
15.2.1. Fonction d'une variable aléatoire	342
15.2.2. Méthode de la fonction réciproque ou du changement de variable	343
15.2.3. La méthode du rejet de von Neumann	344
15.2.4. La distribution normale	345
15.3. Simulation de phénomènes aléatoires	346
15.3.1. La radioactivité	347
15.3.2. L'agrégation	348
15.4. Méthodes de Monte Carlo déterministes : calcul d'intégrales	349
15.4.1. Calcul de π	349
15.4.2. Avantages et inconvénients des méthodes stochastiques pour le calcul d'intégrales	350
15.4.3. Intégrales par la méthode du rejet	351
15.4.4. Intégrales par la valeur moyenne	352
15.5. Pour en savoir plus	353
15.6. Exercices	354
15.7. Projet	356
Index	359
Table des matières	363