

Méthodes de calcul numérique

volume 2

Fonctions équations aux dérivées

Jean-Pierre Nougier

hermes

Table des matières

Sommaire du tome 1	11
Avant propos	13
Chapitre 1. Accélération de Romberg	15
1.1. Extrapolation de Richardson	15
1.2. Accélération de Romberg	16
1.2.1. Exposé de la méthode	16
1.2.2. Algorithmes	20
Chapitre 2. Interpolation à une dimension	23
2.1. Introduction	23
2.2. Forme polynomiale développée en puissances de x	24
2.2.1. Calcul des coefficients du développement	25
2.2.2. Interpolation, schéma de Horner	26
2.2.3. Interpolation par division synthétique	27
2.2.4. Division Euclidienne	29
2.3. Forme polynomiale de Newton	30
2.3.1. Construction du polynôme de Newton	30
2.3.2. Justification de la méthode	32
2.3.3. Valeur approchée de f en $x = t$	33
2.4. Forme polynomiale de Lagrange	34
2.4.1. Expression du polynôme d'interpolation	34
2.4.2. Approximation parabolique	34
2.5. Fonctions et polynômes orthogonaux	35
2.5.1. Produit scalaire discret	35
2.5.2. Développement sur un système orthogonal	35
2.5.3. Polynômes orthogonaux	36
2.6. Limitations de l'approximation polynomiale	38

2.6.1. Erreur de troncature	38
2.6.2. Phénomène de Runge	40
2.7. Cubiques splines	41
2.7.1. Calcul des coefficients	42
2.7.2. Conditions aux extrémités	44
2.7.3. Cubiques splines en équations paramétriques	49
2.7.4. Limitation des cubiques splines	52
2.8. Courbes de Bézier, approximation locale	54
2.8.1. Définition	54
2.8.2. Construction d'une cubique de Bézier	55
2.8.3. Collocation par cubique de Bézier	58
2.8.4. Cubique de Bézier à points anguleux	62
2.9. Fractions continues, fractions rationnelles	63
2.9.1. Interpolation par fraction continue limitée	63
2.9.2. Interpolation par fraction rationnelle	66
2.10. Interpolation périodique, transformée de Fourier discrète	67
2.10.1. Transformée de Fourier Discrète	68
2.10.2. Transformée de Fourier rapide	71
2.10.3. Interpolation trigonométrique	71
Chapitre 3. Interpolation à deux dimensions	77
3.1. Introduction	77
3.2. Cas d'un maillage quelconque	78
3.3. Approximation bilinéaire	80
3.4. Approximation bicubique	81
3.5. Approximation bicubique spline	83
Chapitre 4. Moindres carrés, moindre chi-deux, lissage de courbes	85
4.1. Introduction	85
4.2. Moindres carrés	87
4.3. Moindre chi-deux	90
4.3.1. Notions sur la loi du Chi-deux	90
4.3.2. Moindre X^2	92
4.3.3. Comment choisir σ_i	93
4.3.4. Intervalle de confiance des paramètres	95
4.3.5. Valeur attendue pour une expérience	97
4.3.6. Marche à suivre	98
4.4. Approximation linéaire	99
4.4.1. Méthode générale	99
4.4.2. Résolution par les équations normales	101
4.4.3. Résolution par décomposition QR	102
4.4.4. Moindres carrés	105
4.5. Approximation polynomiale	105

2.6.1. Erreur de troncature	38
2.6.2. Phénomène de Runge	40
2.7. Cubiques splines	41
2.7.1. Calcul des coefficients	42
2.7.2. Conditions aux extrémités	44
2.7.3. Cubiques splines en équations paramétriques	49
2.7.4. Limitation des cubiques splines	52
2.8. Courbes de Bézier, approximation locale	54
2.8.1. Définition	54
2.8.2. Construction d'une cubique de Bézier	55
2.8.3. Collocation par cubique de Bézier	58
2.8.4. Cubique de Bézier à points anguleux	62
2.9. Fractions continues, fractions rationnelles	63
2.9.1. Interpolation par fraction continue limitée	63
2.9.2. Interpolation par fraction rationnelle	66
2.10. Interpolation périodique, transformée de Fourier discrète	67
2.10.1. Transformée de Fourier Discrète	68
2.10.2. Transformée de Fourier rapide	71
2.10.3. Interpolation trigonométrique	71
Chapitre 3. Interpolation à deux dimensions	77
3.1. Introduction	77
3.2. Cas d'un maillage quelconque	78
3.3. Approximation bilinéaire	80
3.4. Approximation bicubique	81
3.5. Approximation bicubique spline	83
Chapitre 4. Moindres carrés, moindre chi-deux, lissage de courbes	85
4.1. Introduction	85
4.2. Moindres carrés	87
4.3. Moindre chi-deux	90
4.3.1. Notions sur la loi du Chi-deux	90
4.3.2. Moindre X^2	92
4.3.3. Comment choisir σ_i	93
4.3.4. Intervalle de confiance des paramètres	95
4.3.5. Valeur attendue pour une expérience	97
4.3.6. Marche à suivre	98
4.4. Approximation linéaire	99
4.4.1. Méthode générale	99
4.4.2. Résolution par les équations normales	101
4.4.3. Résolution par décomposition QR	102
4.4.4. Moindres carrés	105
4.5. Approximation polynomiale	105

4.5.1. Forme développée en puissances de x	105
4.5.2. Droite de régression, droite des moindres carrés	106
4.5.3. Approximation parabolique sur 5 points équidistants	108
4.6. Lissage, filtre de Savitzky-Golay	109
4.7. Utilisation de fonctions et polynômes orthogonaux	116
4.8. Approximation trigonométrique, transformée de Fourier discrète	122
4.9. Modèle non linéaire : changement d'échelle	127
4.10. Modèle non linéaire : méthode de Levenberg-Marquardt	130
4.10.1. Détermination des paramètres a_k	131
4.10.2. Matrice de corrélation	133
4.10.3. Algorithme	135
Chapitre 5. Dérivées	139
5.1. Position du problème	139
5.2. Dérivée d'un polynôme d'interpolation	140
5.2.1. Dérivées par division synthétique	140
5.2.2. Dérivées d'une forme polynomiale de Newton	141
5.2.3. Utilisation de polynômes orthogonaux	144
5.2.4. Incertitude dans l'approximation polynomiale	144
5.3. Dérivée de cubiques splines	145
5.4. Echantillonnage à pas constant, relations de Gregory-Newton	147
5.4.1. Différences à droite (ou progressives)	148
5.4.2. Différences à gauche (ou régressives)	150
5.4.3. Différences centrées	151
5.5. Méthode de Romberg	152
5.5.1. Romberg et les différences progressives	153
5.5.2. Romberg et les différences régressives	153
5.5.3. Romberg et les différences centrées	154
5.6. Dérivées dans l'approximation du chi-deux	155
Chapitre 6. Calcul d'intégrales	157
6.1. Introduction	157
6.2. Intégration sur un pas quelconque	158
6.2.1. Méthode	158
6.2.2. Evaluation de l'erreur	160
6.3. Méthode des trapèzes	161
6.3.1. Approche géométrique	161
6.3.2. Correction aux extrémités	162
6.3.3. Accélération de Romberg	163
6.4. Méthode de Simpson	164
6.4.1. Formule de Simpson sur un pas quelconque	164
6.4.2. Formule de Simpson sur un pas constant	165
6.4.3. Accélération de Romberg	167

6.5. Formules de Newton-Cotes	169
6.6. Méthode des rectangles	170
6.7. Méthode de Gauss	172
6.7.1. Méthode de base	172
6.7.2. Méthode de Gauss généralisée, principe	177
6.7.3. Polynômes orthogonaux utilisés	179
6.8. Problèmes posés par les singularités	180
6.8.1. Singularités de l'intégrande	180
6.8.2. Intégration sur un domaine infini	184
6.9. Intégrales multiples	189
6.9.1. Principe du calcul	189
6.9.2. Intégration de Simpson sur un hypercube	192
Chapitre 7. Equations différentielles	199
7.1. Introduction	199
7.1.1. Problèmes aux conditions initiales	199
7.1.2. Problèmes aux conditions aux limites	201
7.1.3. Choix du pas en fonction de la précision recherchée	202
7.2. Méthode d'Euler	202
7.2.1. Exposé de la méthode	203
7.2.2. Erreur de troncature, erreur par pas, erreur globale	205
7.2.3. Convergence et stabilité	207
7.3. Méthodes explicites, implicites, semi-implicites	212
7.4. Formules de Runge-Kutta : méthode à pas unique	217
7.4.1. Formule d'ordre 2	217
7.4.2. Formule d'ordre 4	217
7.4.3. Adaptation par doublement du pas (extrapolation de Richardson)	220
7.4.4. Adaptation du pas par fonctions associées	223
7.5. Méthodes d'Adams : méthodes à pas multiples	229
7.5.1. Formules d'Adams ouvertes	229
7.5.2. Formules d'Adams fermées	231
7.6. Méthodes de prédicteur-correcteur	233
7.6.1. Itération fonctionnelle	233
7.6.2. Itération de Newton	235
7.7. Problèmes avec conditions aux limites : méthode de tir	237
7.7.1. Equations du second ordre	237
7.7.2. Equations du second ordre linéaires	240
7.7.3. Equations d'ordre supérieur à deux	241
7.8. Problèmes avec conditions aux limites : méthode matricielle	244
7.8.1. Equations différentielles linéaires du second ordre	244
7.8.2. Equations du second ordre non linéaires	248
7.9. Conclusions	257

Chapitre 8. Equations aux dérivées partielles	259
8.1. Introduction	259
8.2. Equations du premier ordre	261
8.2.1. Exemples d'équations du premier ordre	261
8.2.2. Critère de stabilité de von Neumann	263
8.2.3. Méthode explicite de Lax	266
8.2.4. Stabilité et précision	269
8.2.5. Approximations du second ordre par rapport au temps	270
8.2.6. Cas de plusieurs dimensions d'espace	276
8.3. Systèmes d'équations du premier ordre	281
8.3.1. Matrice d'amplification	282
8.3.2. Méthode de Lax	284
8.3.3. Méthode du saute-mouton	284
8.3.4. Cas de plusieurs dimensions d'espace	285
8.4. Equations hyperboliques	287
8.4.1. Introduction	287
8.4.2. Méthode explicite	289
8.4.3. Méthode implicite	291
8.4.4. Autres types d'équations hyperboliques	294
8.5. Equations paraboliques	296
8.5.1. Introduction	296
8.5.2. Méthode explicite	298
8.5.3. Méthode implicite	300
8.5.4. Méthode de Cranck-Nicholson	302
8.5.5. Equations non linéaires	304
8.5.6. Cas de plusieurs dimensions d'espace	305
8.6. Equations elliptiques	310
8.6.1. Introduction	310
8.6.2. Expression des dérivées	315
8.6.3. Conditions aux limites	316
8.6.4. Mise en équation	320
8.6.5. Résolution directe	326
8.6.6. Méthodes des sur-relaxations successives	327
8.6.7. Méthode des directions alternées	339
8.6.8. Equipotentiels	340
8.6.9. Lignes de champ	343
Chapitre 9. Méthodes de Monte Carlo	347
9.1. Présentation des méthodes de Monte Carlo	347
9.1.1. Principe	347
9.1.2. Dispersion, incertitude, efficacité	348

10 Méthodes de calcul numérique, tome 2

9.2. Nombres aléatoires et pseudo-aléatoires	350
9.2.1. Distributions rectangulaires	350
9.2.2. Distributions quelconques : méthode directe	352
9.2.3. Distributions quelconques : rejet de von Neumann	357
9.3. Calcul d'intégrales simples	358
9.3.1. Principe	358
9.3.2. Echantillonnages simple et stratifié	359
9.3.3. Transformations antithétiques	362
9.3.4. Autres méthodes de réduction de variance	365
9.4. Calcul d'intégrales multiples	366
9.4.1. Echantillonnage simple	366
9.4.2. Echantillonnage stratifié	371
9.5. Simulation de trajectoires avec collision	374
9.5.1. Principe	374
9.5.2. Simulation monoparticulaire	376
9.5.3. Simulation d'ensemble	379
9.6. Conclusion	388
 Bibliographie	 389
 Liste des algorithmes	 391
 Index général	 399

Sommaire du tome 1

Chapitre 1. Introduction

- 1.1. Utilité et limitation des méthodes numériques
- 1.2. Développement en série de Taylor
- 1.3. Algorithmes et notations, programmation
- 1.4. Notions de vitesse, erreurs, conditionnement, stabilité
- 1.5. Algèbre complexe

Chapitre 2. Racines d'équations

- 2.1. Introduction
- 2.2. Méthodes itératives
- 2.3. Bissection
- 2.4. Méthode de Newton
- 2.5. Méthode de la sécante
- 2.6. Racines complexes : séparation des parties réelle et imaginaire
- 2.7. Méthode de Laguerre
- 2.8. Méthode de Muller
- 2.9. Racines d'un polynôme, méthode de Bairstow
- 2.10. Interpolation inverse
- 2.11. Extremum d'une fonction

Chapitre 3. Systèmes linéaires, méthodes du pivot

- 3.1. Introduction
- 3.2. Matrices : rappels de notions fondamentales
- 3.3. Résolution d'un système triangulaire
- 3.4. Méthodes du pivot
- 3.5. Cas des matrices bandes
- 3.6. Amélioration itérative de la précision
- 3.7. Conditionnement d'un système linéaire
- 3.8. Systèmes d'équations à valeurs complexes

Chapitre 4. Systèmes linéaires, méthodes de décomposition

- 4.1. Introduction.
- 4.2. Décomposition LR (ou LU)
- 4.3. Décomposition QR de Householder
- 4.4. Modification de la matrice, calcul de l'inverse
- 4.5. Systèmes surdéterminés.
- 4.6. Notions sur la décomposition en valeurs singulières
- 4.7. Systèmes homogènes.
- 4.8. Système quelconque, algorithme de Gréville

Chapitre 5. Systèmes linéaires, méthodes itératives

- 5.1. Introduction
- 5.2. Généralités sur les méthodes itératives
- 5.3. Méthode de Jacobi.
- 5.4. Méthode de Gauss-Seidel
- 5.5. Méthodes de descente : principes de base
- 5.6. Méthode du gradient conjugué.
- 5.7. Méthode du double gradient conjugué.

Chapitre 6. Systèmes non linéaires

- 6.1. Introduction.
- 6.2. Méthode de Gauss-Seidel.
- 6.3. Méthodes de descente.
- 6.4. Méthode de Newton-Raphson.
- 6.5. Systèmes non linéaires surdéterminés.
- 6.6. Minimum d'une fonction de plusieurs variables.
- 6.7. Conclusion.

Chapitre 7. Valeurs propres et vecteurs propres.

- 7.1. Introduction
- 7.2. Rappels de notions fondamentales
- 7.3. Méthode de la puissance itérée : grandes valeurs propres
- 7.4. Méthode de la puissance inverse : petites valeurs propres.
- 7.5. Valeurs propres racines du polynôme caractéristique
- 7.6. Vecteur propre déterminé à partir d'une valeur propre approchée.
- 7.7. Forme de Hessenberg d'une matrice
- 7.8. Matrices symétriques et matrices hermitiques.
- 7.9. Méthode de Rutishauser : décomposition LR.
- 7.10. Décomposition QR
- 7.11. Problème spectral généralisé.

Méthodes de calcul numérique est avant tout un outil proposé aux étudiants, techniciens, ingénieurs, chercheurs de toutes disciplines confrontés à des problèmes de simulation, modélisation, conception assistée par ordinateur, ingénierie, etc. Ces problèmes conduisent souvent à des formulations mathématiques n'ayant pas de solution analytique, mais peuvent être résolus par voie numérique, à l'aide d'un ordinateur en utilisant un langage de programmation structuré, ou même simplement d'une calculatrice programmable, voire d'un tableur.

Le premier volume traite des racines d'équations, systèmes d'équations, valeurs propres et vecteurs propres.

Le second volume, qui s'appuie sur les acquis du premier, traite des méthodes de collocation, de moindres carrés, de dérivation, d'intégration, de résolution d'équations différentielles et d'équations aux dérivées partielles, ainsi que des méthodes de Monte Carlo.

L'ensemble comporte 165 algorithmes, 212 exercices corrigés et 167 figures.

L'auteur

Jean-Pierre Nougier est professeur d'électronique à l'Université Montpellier II. Il a enseigné l'ensemble des disciplines de l'EEA, et notamment les méthodes numériques, qu'il a par ailleurs utilisées depuis de longues années dans ses travaux de recherche, notamment en inventant et mettant au point de nouvelles méthodes de résolution de l'équation de Boltzmann.