

Christian GUILPIN

MANUEL DE CALCUL NUMÉRIQUE APPLIQUÉ



Sommaire

AVANT-PROPOS

3

1. GÉNÉRALITÉS SUR LE CALCUL NUMÉRIQUE

17

1. La notion d'algorithme en calcul numérique	17
2. Le calcul numérique ne concerne que les nombres entiers	18
3. Le calcul numérique traite du problème pratique de l'approximation de fonctions explicites ou implicites	18
4. Solutions littérales et solutions analytiques	20
5. Que sait-on calculer rigoureusement ?	20
6. Les erreurs et les incertitudes	21
7. Un problème difficile : la propagation des erreurs en calcul automatique	22
8. Réexamen des erreurs du point de vue statistique	26
9. Sur la représentation des nombres en machine	27
III. Éléments de bibliographie	30

2. QUELQUES ALGORITHMES ACCÉLÉRATEURS DE LA CONVERGENCE DES SUITES

31

1. L'algorithme Δ^2 d'Aitken (1895–1967)	31
2. Le procédé d'extrapolation de Richardson (1881–1953)	32
3. Présentation de l'epsilon-algorithme scalaire	35
4. L'epsilon-algorithme vectoriel	37
5. L'epsilon-algorithme matriciel	37
6. Remarques et propriétés de l'epsilon-algorithme	38
7. Propriétés remarquables du procédé Δ^2 d'Aitken et de l'epsilon-algorithme	39
8. Éléments de bibliographie	42

3. LES DÉVELOPPEMENTS ASYMPTOTIQUES	43
1. Un exemple de développement asymptotique	43
2. Quelques propriétés utiles des développements asymptotiques	45
3. Développement asymptotique de quelques fonctions spéciales	47
4. Éléments de bibliographie	49
4. RÉSOLUTION DES ÉQUATIONS NUMÉRIQUES	51
1. Généralités sur la résolution des équations $f(x) = 0$	51
2. Résolution d'un système non linéaire de deux équations à deux inconnues	59
3. Racines d'un polynôme	63
5. ÉLÉMENTS DE CALCUL MATRICIEL	69
1. Multiplication de deux matrices	69
2. Résolution d'un système linéaire	70
3. Inversion d'une matrice carrée d'ordre n	78
4. Calcul des valeurs propres	79
5. Éléments de bibliographie	87
6. L'INTERPOLATION	89
1. De la légitimité de l'interpolation	90
2. Le polynôme de Lagrange (1736–1813)	90
3. Évaluation de l'erreur	92
4. Comment minimiser $E(x)$	93
5. Autre disposition pratique du calcul du polynôme de Lagrange	94
6. Cas où les abscisses sont en progression arithmétique	95
7. Les polynômes d'interpolation de Newton (1643–1727)	96
8. Le polynôme d'interpolation de Stirling (1692–1770)	98
9. Le polynôme d'interpolation de Bessel (1784–1846)	100
10. Erreurs commises en utilisant les polynômes d'interpolation	100
11. Programmes déterminant les polynômes d'interpolation	101
12. Interpolation par les fonctions-spline	101
13. Les fonctions-spline du troisième degré	102
14. Résolution d'un système linéaire dépendant d'une matrice tridiagonale	104
15. Une application simple des polynômes d'interpolation	105
16. L'algorithme d'interpolation d'Aitken (1932)	106
17. Approximation par une combinaison linéaire de fonctions	109
18. Éléments de bibliographie	111
7. LES POLYNÔMES DE LEGENDRE.	
MÉTHODE D'INTÉGRATION DE GAUSS-LEGENDRE	113
1. Les polynômes de Legendre	113
2. Méthode d'intégration de Gauss-Legendre	122

II. LES POLYNÔMES DE TCHEBYCHEFF.	
APPLICATION À LA MÉTHODE DE GAUSS-TCHEBYCHEFF	133
1. Les polynômes de Tchebycheff (1821-1894)	133
2. Une propriété essentielle des polynômes de Tchebycheff à coefficient principal réduit ..	134
3. Les racines des polynômes de Tchebycheff $T_{n+1}(x)$	135
4. Calcul des poids H_k correspondant aux racines x_k du polynôme $T_{n+1}(x)$	135
5. Méthode d'intégration de Gauss-Tchebycheff	136
6. Calcul de l'intégrale $I = \int_{-a}^{+a} \frac{f(x)}{\sqrt{(x-a)(b-x)}} dx$	136
7. Calcul de l'erreur commise lors de l'approximation	137
8. Fonctions génératrices des polynômes de Tchebycheff	139
9. Un exemple d'intégration	139
III. LES POLYNÔMES DE LAGUERRE.	
MÉTHODE D'INTÉGRATION DE GAUSS-LAGUERRE	141
1. Relation de récurrence entre trois polynômes consécutifs	141
2. Relation de récurrence faisant intervenir la dérivée	142
3. Les premiers polynômes de Laguerre	142
4. Calcul des coefficients des n premiers polynômes de Laguerre	143
5. Orthogonalité des polynômes de Laguerre	143
6. Calcul des racines des premiers polynômes de Laguerre	144
7. Calcul des poids H_k correspondant aux racines x_k	145
8. Calcul numérique des poids H_k associés aux racines	145
9. Calcul des intégrales du type $I = \int_0^{\infty} \exp(-x) f(x) dx$	145
10. Calcul de l'erreur commise lors de l'approximation	147
11. Fonction génératrice des polynômes de Laguerre	149
12. Calcul numérique de la transformée de Laplace	149
13. Appendice : Les polynômes de Laguerre généralisés	150
IV. LES POLYNÔMES D'HERMITE.	
LA MÉTHODE D'INTÉGRATION DE GAUSS-HERMITE	153
1. Relation de récurrence entre trois polynômes consécutifs	153
2. Relation de récurrence entre polynômes et dérivées	154
3. Les premiers polynômes d'Hermite	154
4. Calcul des coefficients des premiers polynômes d'Hermite	154
5. Orthogonalité des polynômes d'Hermite	154
6. Calcul des racines des premiers polynômes d'Hermite	155
7. Calcul des poids H_k correspondant aux racines x_k	156
8. Technique de calcul des intégrales du type $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-x^2/2) f(x) dx$	156
9. Autres notations très utiles	157
10. Calcul de l'erreur commise lors de l'approximation	160
11. Fonction génératrice des polynômes d'Hermite	162
12. Éléments de bibliographie	163

11. CALCUL DE QUELQUES INTÉGRALES RELEVANT DES ÉTUDES PRÉCÉDENTES AU MOYEN D'UN CHANGEMENT DE VARIABLE

1. Intégrale de la forme : $I = \int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x}} dx$	205
2. Intégrale de la forme $I = \int_0^1 f(x) \sqrt{1-x} dx$	206
3. Intégrales de la forme $I = \int_{-1}^{+1} \sqrt{1-x^2} dx$	207
4. Intégrales de la forme $I = \int_0^{+1} f(x) \sqrt{\frac{x}{1-x}} dx$	207
5. Éléments de bibliographie	207

12. LES POLYNÔMES DE BERNOULLI, FORMULE D'EULER-MACLAURIN. MÉTHODE DE ROMBERG ET AUTRES TECHNIQUES D'INTÉGRATION

1. Formule d'Euler-MacLaurin	207
2. Autres méthodes d'intégration	208
3. La méthode de Simpson (1811-1870)	208
4. Éléments de bibliographie	210

13. INTÉGRATION DES ÉQUATIONS DIFFÉRENTIELLES DANS LE CHAMP RÉEL

1. Les équations différentielles du premier ordre	208
2. Les théorèmes d'Arzelà (1847-1912) et de Cauchy-Lipschitz (1832-1903)	208
3. La méthode de Picard (1858-1941)	207
4. Méthode de la série de Taylor	208
5. Méthodes de Runge (1856-1927) et Kutta (1867-1944)	208
6. Les méthodes d'Adams (1819-1892)	208
7. La méthode des différentiations rétrogrades	207
8. Les équations différentielles du deuxième ordre	210
9. Équations différentielles d'ordre supérieur à deux	214
10. Éléments de bibliographie	214

14. INTÉGRATION DES ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES

1. Considérations sur les équations aux dérivées partielles d'ordre au plus égal à deux ...	216
2. Les opérateurs de différence	217
3. L'opérateur laplacien	219
4. Résolution des équations de type elliptique	220
5. Résolution des équations de type parabolique (méthode explicite)	224
6. Résolution des équations de type hyperbolique (méthode explicite)	225
7. Éléments de bibliographie	227

IX. LES SÉRIES DE FOURIER	229
1. Petit aperçu historique	229
2. Orthogonalité des fonctions sinus et cosinus sur une période	231
3. Série de Fourier associée à une fonction périodique	232
4. Conditions d'égalité de $f(x)$ et de la série de Fourier associée	233
5. Quelques propriétés remarquables	234
6. Approximation des fonctions par une série de Fourier tronquée	235
7. Cas où la fonction est discontinue à l'origine	238
8. Le phénomène de Gibbs (1839-1903) et l'épsilon-algorithme	238
9. Représentation des séries de Fourier avec un terme de phase	241
10. Écriture du développement sous forme complexe	241
11. Approximation des fonctions au sens de Tchebycheff	242
12. Application des séries de Fourier au filtrage numérique	244
13. À propos du développement des fonctions non périodiques	246
14. Calcul des séries de Fourier à coefficients approchés dans L^2	246
15. Éléments de bibliographie	247
X. LES TRANSFORMÉES DE FOURIER	249
1. Extension des séries de Fourier au cas où la période est infinie	249
2. Conditions d'existence des transformées de Fourier dans les espaces L^1 et L^2	252
3. La transformée de Fourier dans l'espace L^1	253
4. Les transformées de Fourier dans l'espace L^2	255
5. Produit de convolution dans les espaces L^1 ou L^2	256
6. Sur le calcul numérique des transformées de Fourier	260
7. Cas des fonctions échantillonnées	260
8. Calcul par un algorithme ordinaire	261
9. L'algorithme de Cooley-Tukey (1915-)	262
10. Programmes de calcul des transformées de Fourier	266
11. Un problème fondamental : quelle doit être la période d'échantillonnage de la fonction $f(x)$?	267
12. La distribution de Dirac (1902-1984)	269
13. Transformées de Fourier multidimensionnelles	271
14. Éléments de bibliographie	272
XI. INITIATION AUX PROBLÈMES MAL POSÉS : ÉQUATIONS INTÉGRALES, SYSTÈMES LINÉAIRES MAL CONDITIONNÉS ET ÉQUATIONS DE CONVOLUTION	273
1. Un exemple de problème mal posé : le calcul des séries de Fourier à coefficients approchés dans L^2	273
2. L'équation intégrale de Fredholm (1866-1927) de première espèce	274
3. Notion de problèmes bien et mal posés	276
4. Méthode de régularisation	276
5. Application à la résolution approchée des équations intégrales de Fredholm de première espèce	280
6. Résolution d'un système linéaire mal conditionné	282
7. Résolution des équations de convolution	283
8. Bibliographie	285

18. INTRODUCTION AUX MÉTHODES DE MONTE-CARLO	287
1. Le problème de Buffon	287
2. Générateurs de nombres pseudo aléatoires à distribution uniforme	288
3. Calcul de π	290
4. Calcul d'une intégrale définie	290
5. Intégration de l'équation de Laplace en un point	292
6. Inversion d'une matrice carrée d'ordre n	293
7. Méthode du recuit simulé : recherche du minimum absolu d'une fonction	294
8. Simulation d'autres lois de distribution	295
9. Éléments de bibliographie	297
19. ÉLÉMENTS DE CALCUL DES PROBABILITÉS	299
1. Introduction et notions fondamentales	299
2. Évaluation de la probabilité	300
3. Notion de variable aléatoire	301
4. Somme et produit d'événements. Théorèmes fondamentaux	301
5. Lois de répartition des variables aléatoires	305
6. L'inégalité de Bienaymé (1796-1878) - Tchebycheff	308
7. Le théorème de Bernoulli	309
8. Éléments de bibliographie	309
20. LA LOI BINOMIALE, LA LOI DE POISSON ET LA LOI DE GAUSS-LAPLACE	311
1. La loi binomiale, schéma de Bernoulli	311
2. Loi de Poisson	313
3. Loi de Gauss-Laplace	316
4. Changement de variable aléatoire dans les lois de répartition	322
5. Éléments de bibliographie	324
21. LA FONCTION CARACTÉRISTIQUE	325
1. Définition et propriétés	325
2. La distribution du χ^2	328
3. Éléments de bibliographie	329
22. LA LOI DU χ^2 ET LA LOI DE STUDENT	331
1. La loi du χ_n^2	331
2. Distribution d'une somme de deux variables aléatoires indépendantes obéissant chacune à une distribution du χ_n^2	333
3. La loi du χ_m^2 à m degrés de liberté tend asymptotiquement vers la loi de Gauss quand m tend vers l'infini	333
4. Distribution d'une variable aléatoire fonction de deux variables aléatoires indépendantes	334
5. La distribution de Student (W. Gosset) (1876-1937)	336
6. La distribution d'une somme de deux variables aléatoires indépendantes obéissant à une distribution de Student est-elle encore une distribution de Student?	339
7. La loi de Student à m degrés de liberté tend asymptotiquement vers la loi de Gauss quand m tend vers l'infini	339
8. Éléments de bibliographie	340

22. SYSTÈMES À PLUSIEURS VARIABLES ALÉATOIRES	341
1. Généralités	341
2. Système de variables aléatoires, fonction de répartition	341
3. Variables aléatoires liées et indépendantes	343
4. Caractéristiques numériques, covariance, coefficient de corrélation	343
5. Généralisation au cas de plusieurs variables	345
6. Quelques théorèmes importants.....	346
7. Propriétés du coefficient de corrélation (démonstrations).....	348
8. Éléments de bibliographie	349
23. CRITÈRES DE CONFORMITÉ	351
1. Généralités	351
2. Représentation des données numériques. Histogramme	352
3. Conformité entre une répartition théorique et une répartition expérimentale (ou répartition statistique)	353
4. Le χ^2 de Pearson (1857–1936)	353
5. Critère de Kolmogorov (1903–1987)	356
6. Estimation des paramètres d'une loi inconnue. Estimateurs	356
7. Éléments de bibliographie	359
24. ÉTUDE DES DÉPENDANCES DANS LE CAS LINÉAIRE	361
1. Les types de schémas de dépendance linéaire	361
2. Fondements de l'analyse de corrélation-régression	364
3. Conclusions.....	369
4. Éléments de bibliographie	370
25. ANALYSE DE CORRÉLATION ET DE RÉGRESSION	371
1. La corrélation	371
2. Régression linéaire	375
3. Éléments de bibliographie	379
ANNEXES	381
A. LES SUITES DE STURM. APPLICATION À LA DÉTERMINATION DU NOMBRE DE RACINES RÉELLES D'UN POLYNÔME	383
1. Notion de variations d'une suite numérique.....	383
2. Suite de Sturm générée à partir d'un polynôme	383
3. Quelques propriétés des suites de Sturm	384
4. Le théorème de Sturm (1829)	385
5. Disposition des calculs, schéma de Routh (1831–1907)	386
6. Quelques exemples de suites de Sturm	386
7. Mise en œuvre du théorème de Sturm.....	386
8. Éléments de bibliographie	387

B. POLYNÔMES ORTHOGONAUX RELATIVEMENT À UNE FONCTION POIDS. GÉNÉRALISATION DE LA MÉTHODE DE GAUSS

385

1. Généralisation de la notion de polynômes orthogonaux.....	385
2. Décomposition d'une fonction $f(x)$ sur la base des polynômes $W_k(x)$ orthogonaux sur l'intervalle (a, b)	390
3. Racines des polynômes orthogonaux	392
4. Relation de récurrence entre trois polynômes orthogonaux consécutifs	393
5. Généralisation de la méthode de Gauss	393
6. Expression de l'erreur en remplaçant I par J	394
7. Éléments de bibliographie	395

C. LES FRACTIONS CONTINUES

397

1. Un exemple de fraction continue.....	397
2. Les fractions continues finies	398
3. Les fractions continues infinies	400
4. Développement en fraction continue à partir d'un développement en série entière	401
5. Développement en fractions continues de séries usuelles	402
6. Développement en fraction continue à partir d'un produit infini.....	403
7. Éléments de bibliographie	404

D. LES APPROXIMANTS DE PADÉ ET DE MAEHLY

405

1. Le théorème fondamental de Padé.....	405
2. Sur le calcul effectif des coefficients	407
3. Estimation de l'erreur commise	407
4. Développement de quelques fonctions en approximants de Padé.....	408
5. Généralisation des approximants de Padé, méthode de Maehly	414
6. Erreur liée à l'usage des approximants de Maehly.....	418
7. Difficultés liées à la recherche d'une généralisation.....	419
8. Éléments de bibliographie	419

E. CALCUL DES FONCTIONS DE BIBLIOTHÈQUE ÉLÉMENTAIRES

421

1. Calcul de $\exp(x)$ pour x appartenant à $(-\infty, +\infty)$	421
2. Calcul de $\sin(x)$ et $\cos(x)$ pour x appartenant à $(-\infty, +\infty)$	423
3. Calcul de $\log_e(x)$ pour x appartenant à $(0, +\infty)$	425
4. Calcul de tangente et cotangente pour x appartenant à $(-\infty, +\infty)$	425
5. Calcul de $\operatorname{arctanh}(x)$ pour x appartenant à $(0, 1)$	426
6. Calcul de $\arctan(x)$ pour x appartenant à $(0, +\infty)$	426
7. Calcul de $\arcsin(x)$ et $\arccos(x)$ pour x appartenant à $(0, 1)$	426
8. Calcul de la racine carrée pour x appartenant à $(0, \infty)$	427
9. Éléments de bibliographie	427

8. CALCUL NUMÉRIQUE DES FONCTIONS DE BESSEL	429
1. L'équation différentielle des fonctions de Bessel (1784–1846).....	429
2. Relations de récurrence.....	430
3. Représentation de $J_\nu(x)$ par une intégrale définie.....	431
4. Technique de calcul.....	431
5. Calcul de l'erreur sur $J_0(x)$	432
6. Éléments de bibliographie.....	432
9. ÉLÉMENTS SUCCINCTS SUR LE TRAITEMENT DU SIGNAL	433
1. Puissance et énergie d'un signal.....	433
2. La corrélation et ses propriétés.....	435
3. Applications de la corrélation.....	437
4. La convolution.....	439
5. Notions sur le filtrage.....	440
6. Notion de bruit.....	441
7. Éléments de bibliographie.....	442
10. PROBLÈMES ET EXERCICES	443
1. Généralités sur le calcul numérique.....	443
2. Algorithmes accélérateurs de la convergence des suites.....	446
3. Les développements asymptotiques.....	447
4. Résolution des équations numériques.....	447
5. Éléments de calcul matriciel.....	453
6. L'interpolation.....	461
7. Intégration des équations différentielles dans le champ réel.....	462
8. Intégration des équations aux dérivées partielles.....	465
9. Les transformées de Fourier.....	467
10. Introduction aux méthodes de Monte-Carlo.....	470
11. Éléments de calcul des probabilités.....	471
12. Lois (Binomiale, Poisson, Gauss-Laplace).....	472
13. La fonction caractéristique.....	480
14. La loi du χ^2 et la loi de Student.....	481
15. Systèmes à plusieurs variables aléatoires.....	485
16. Critères de conformité.....	485
17. Étude des dépendances dans le cas linéaire.....	487
18. Analyse de corrélation.....	491
19. Les fractions continues.....	494
20. Éléments de traitement du signal.....	495

I. CORRIGÉS DES PROBLÈMES ET EXERCICES	497
1. Généralités sur le calcul numérique.....	497
2. Algorithmes accélérateurs	504
3. Les développements asymptotiques.....	504
4. Résolution des équations numériques.....	505
5. Éléments de calcul matriciel	513
6. Interpolation	523
7. Intégration des équations différentielles dans le champ réel	523
8. Intégration des équations aux dérivées partielles	530
9. Les transformées de Fourier	530
10. Introduction aux méthodes de Monte-Carlo	532
11. Éléments de calcul des probabilités.....	532
12. Lois	534
13. La fonction caractéristique	543
14. La loi du χ^2 et la loi de Student.....	545
15. Systèmes à plusieurs variables aléatoires	550
16. Critères de conformité	551
17. Étude des dépendances dans le cas linéaire	553
18. Analyse de régression-corrélation	560
19. Les fractions continues	563
20. Éléments de traitement du signal.....	564
 INDEX	 567

Christian
GUILPIN

MANUEL DE CALCUL NUMÉRIQUE APPLIQUÉ

www.edpsciences.com



Ce manuel est consacré au calcul numérique et au traitement statistique des données expérimentales. Il s'adresse d'abord à ceux qui souhaitent comprendre le fonctionnement des « boîtes noires » que les développements très féconds de l'électronique et de l'informatique ont imposés.

L'essentiel de l'ouvrage traite des thèmes suivants : résolution des équations $f(x) = 0$, interpolation, calcul matriciel, calcul des intégrales, résolution des équations différentielles et des équations aux dérivées partielles, transformées de Fourier, équation de convolution et suivi du traitement statistique des données expérimentales après une étude préalable des grandes lois de distribution.

Les deux derniers chapitres contiennent de nombreux problèmes et exercices corrigés. En outre, une centaine de programmes, écrits en langage C, peuvent être consultés sur le Web.

Enfin un manuel qui apporte à l'étudiant, tant en physique, en chimie, en biologie, ... qu'en sciences économiques, des méthodes lui permettant d'utiliser les mathématiques pour sa discipline de prédilection ! Les chercheurs et les ingénieurs y trouveront réunis en un seul ouvrage tous les outils nécessaires à leurs recherches.

Christian GUILPIN

Maître de Conférence à l'université Paris VII-Denis Diderot,
responsable de l'enseignement des mathématiques
appliquées.



9 782868 834065
ISBN 2-86883-406-X



EDP
SCIENCES