

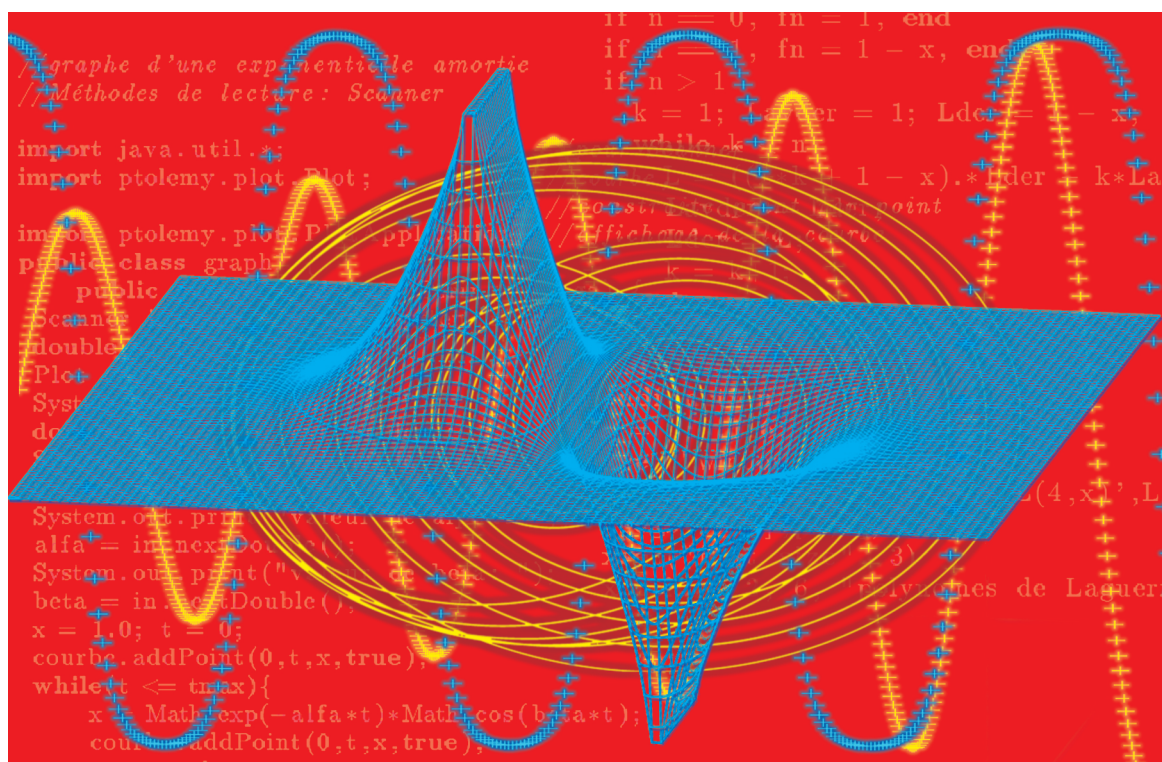


MÉTHODES NUMÉRIQUES APPLIQUÉES

POUR LE SCIENTIFIQUE ET L'INGÉNIEUR

Nouvelle édition

 **Jean-Philippe GRIVET**



MÉTHODES NUMÉRIQUES APPLIQUÉES
POUR LE SCIENTIFIQUE ET L'INGÉNIEUR

Grenoble Sciences

Grenoble Sciences est un centre de conseil, expertise et labellisation de l'enseignement supérieur français. Il expertise les projets scientifiques des auteurs dans une démarche à plusieurs niveaux (référés anonymes, comité de lecture interactif) qui permet la labellisation des meilleurs projets après leur optimisation. Les ouvrages labellisés dans une collection de Grenoble Sciences ou portant la mention «Sélectionné par Grenoble Sciences» («*Selected by Grenoble Sciences*») correspondent à :

- des projets clairement définis sans contrainte de mode ou de programme,
- des qualités scientifiques et pédagogiques certifiées par le mode de sélection (les membres du comité de lecture interactif sont cités au début de l'ouvrage),
- une qualité de réalisation assurée par le centre technique de Grenoble Sciences.

Directeur scientifique de Grenoble Sciences

Jean BORNAREL, Professeur à l'Université Joseph Fourier, Grenoble 1

Pour mieux connaître Grenoble Sciences :

<http://grenoble-sciences.ujf-grenoble.fr>

Pour contacter Grenoble Sciences :

Tél : (33) 4 76 51 46 95, e-mail : *grenoble.sciences@ujf-grenoble.fr*

Livres et pap-ebooks

Grenoble Sciences labellise des livres papier (en langue française et en langue anglaise) mais également des ouvrages utilisant d'autres supports. Dans ce contexte, situons le concept de **pap-ebook** qui se compose de deux éléments :

- un **livre papier** qui demeure l'objet central avec toutes les qualités que l'on connaît au livre papier,
- un **site web compagnon** qui propose :
 - › des prérequis permettant de combler certaines lacunes,
 - › des exercices pour s'entraîner,
 - › des compléments pour approfondir un thème, trouver des liens sur internet, etc.

Le livre du **pap-ebook** est autosuffisant et certains lecteurs n'utiliseront pas le site web compagnon. D'autres pourront l'utiliser et ce, chacun à sa manière. Un livre qui fait partie d'un **pap-ebook** porte en première de couverture un logo caractéristique et le lecteur trouvera le site compagnon du présent livre à l'adresse internet suivante :

<http://grenoble-sciences.ujf-grenoble.fr/pap-ebooks/grivet>

Grenoble Sciences bénéficie du soutien du **Ministère de l'Enseignement supérieur et de la Recherche** et de la **Région Rhône-Alpes**.
Grenoble Sciences est rattaché à l'**Université Joseph Fourier de Grenoble**.

**MÉTHODES NUMÉRIQUES APPLIQUÉES
POUR LE SCIENTIFIQUE ET L'INGÉNIEUR**

Jean-Philippe GRIVET

avec la contribution de Magali RIBOT



17, avenue du Hoggar
Parc d'Activité de Courtabœuf - BP 112
91944 Les Ulis Cedex A - France

Méthodes numériques appliquées pour le scientifique et l'ingénieur

Cet ouvrage, labellisé par Grenoble Sciences, est un des titres du secteur Mathématiques de la Collection Grenoble Sciences d'EDP Sciences, qui regroupe des projets originaux et de qualité. Cette collection est dirigée par Jean BORNAREL, Professeur à l'Université Joseph Fourier, Grenoble 1.

Comité de lecture de l'ouvrage

- Laurent DEROME, maître de conférences à l'Université Joseph Fourier, Grenoble
- Magali RIBOT, maître de conférences à l'Université de Nice-Sophia Antipolis
- Claude BARDOS, professeur à l'Université Denis Diderot, Paris 7
- Michael SANREY, docteur de l'Université Joseph Fourier, Grenoble

Cette nouvelle édition a été suivie par Stéphanie TRINE pour la partie scientifique et par Anne-Laure PASSAVANT et Stéphanie TRINE pour sa réalisation pratique. L'illustration de couverture est l'œuvre d'Alice GIRAUD d'après des éléments fournis par l'auteur.

Autres ouvrages labellisés sur des thèmes proches (chez le même éditeur)

Outils mathématiques à l'usage des scientifiques et ingénieurs (*E. Belorizky*)
• Analyse numérique et équations différentielles (*J.-P. Demailly*) • Analyse statistique des données expérimentales (*K. Protassov*) • Mathématiques pour l'étudiant scientifique - Tome I (*P.-J. Haug*) • Mathématiques pour l'étudiant scientifique - Tome II (*P.-J. Haug*) • Exercices corrigés d'analyse avec rappels de cours - Tome I (*D. Alibert*) • Exercices corrigés d'analyse avec rappels de cours - Tome II (*D. Alibert*) • Mécanique - De la formulation lagrangienne au chaos hamiltonien (*C. Gignoux et B. Silvestre-Brac*) • Problèmes corrigés de mécanique et résumés de cours. De Lagrange à Hamilton (*C. Gignoux et B. Silvestre-Brac*) • Approximation hilbertienne. Splines, ondelettes, fractales (*M. Attéia et J. Gaches*) • Introduction aux variétés différentielles (*J. Lafontaine*) • Nombres et algèbre (*J.-Y. Mérandol*) • Mathématiques pour les sciences de la vie, de la nature et de la santé (*J.P. et F. Bertrandias*) • La mécanique quantique. Problèmes résolus - Tome I (*V.M. Galitski, B.M. Karnakov et V.I. Kogan*) • La mécanique quantique. Problèmes résolus - Tome II (*V.M. Galitski, B.M. Karnakov et V.I. Kogan*) • Description de la symétrie. Des groupes de symétrie aux structures fractales (*J. Sivardière*) • Symétrie et propriétés physiques. Du principe de Curie aux brisures de symétrie (*J. Sivardière*)

et d'autres titres sur le site internet :

<http://grenoble-sciences.ujf-grenoble.fr>

ISBN 978-2-7598-0829-8

© EDP Sciences, 2013

TABLE DES MATIÈRES

Avant-propos	1
Chapitre 1. Représentation graphique de fonctions	5
1.1. Les tableurs	5
1.2. Java et PtPlot	6
1.3. Python et Matplotlib	7
1.4. Gnuplot	8
1.5. Maple	9
1.6. Scilab	10
1.7. Grace	12
1.8. Pour en savoir plus	12
1.9. Exercices	14
Chapitre 2. Calcul et approximation de fonctions	19
2.1. Polynômes et fractions rationnelles	20
2.2. Relations de récurrence	21
2.3. Développement limité	22
2.4. Approximant de Padé	24
2.5. Utilisation de bibliothèques de programmes	26
2.6. Approximation de fonctions	27
2.7. Développement asymptotique	28
2.8. Représentation des nombres en machine	30
2.8.1. Les nombres entiers	30
2.8.2. Les nombres fractionnaires	31
2.9. Pour en savoir plus	32
2.10. Exercices	33
2.11. Projets	39
2.11.1. Fonction de Riemann	39

2.11.2. Diffraction de Fresnel	40
2.11.3. Champ magnétique d'une boucle de courant	41
2.11.4. Transformation conforme	43
Chapitre 3. Représentation des grandeurs physiques	45
3.1. Une méthode simple de « dédimensionnement »	46
3.2. Construction systématique de variables sans dimension	47
3.3. Pour en savoir plus	49
3.4. Exercices	49
Chapitre 4. L'interpolation	53
4.1. Définition de l'interpolation	54
4.2. Méthode des coefficients indéterminés	55
4.3. Le polynôme d'interpolation de Lagrange	56
4.4. Le polynôme de Newton	58
4.4.1. Interpolation linéaire	58
4.4.2. Les différences divisées	59
4.4.3. La formule de Newton	59
4.5. L'erreur d'interpolation	62
4.6. Interpolation entre pivots équidistants	64
4.6.1. Les différences finies latérales	64
4.6.2. La formule d'interpolation de Newton	65
4.7. Le polynôme d'interpolation de Hermite	67
4.8. L'interpolation inverse	68
4.9. L'interpolation par intervalle	69
4.10. L'interpolation « spline »	70
4.11. Interpolation à deux ou plusieurs dimensions	74
4.12. Pour en savoir plus	75
4.13. Exercices	75
4.14. Projets	78
4.14.1. La forme « barycentrique » de l'interpolation de Lagrange	78
4.14.2. Courbes de Bézier	79
4.14.3. Algorithme de Neville	80

Chapitre 5. Résolution d'équations non linéaires	81
5.1. Méthode de bisection ou de dichotomie	82
5.2. Méthode « Regula falsi » ou des parties proportionnelles	83
5.3. Méthode du point fixe ou d'itération	84
5.4. Méthode de Newton	87
5.5. Méthode de la sécante	89
5.6. Résolution de systèmes d'équations	89
5.7. Racines des polynômes	92
5.7.1. Division des polynômes	92
5.7.2. Séparation des racines	94
5.7.3. Suites de Sturm	95
5.7.4. La méthode de Newton pour les polynômes	97
5.7.5. Scilab et les polynômes	98
5.7.6. Condition du problème	99
5.8. Pour en savoir plus	100
5.9. Exercices	101
Chapitre 6. Résolution de systèmes d'équations linéaires	105
6.1. Le « conditionnement »	107
6.2. Orientation	108
6.3. Méthode de Gauss	109
6.3.1. Algorithme	109
6.3.2. Méthode de Gauss–Jordan	113
6.3.3. Décomposition LU	113
6.3.4. Représentation matricielle de l'élimination	115
6.3.5. Permutation de lignes	117
6.3.6. Nombre d'opérations	120
6.3.7. Calcul de l'inverse de \mathbf{A}	121
6.4. Factorisation directe	121
6.4.1. Variantes	122
6.5. Matrices particulières	123
6.5.1. Matrice à diagonale dominante	123
6.5.2. Matrice symétrique définie positive	123

6.5.3. Matrice bande	124
6.5.4. Système tridiagonal	125
6.6. Méthodes itératives de résolution des systèmes linéaires	126
6.6.1. Méthode de Jacobi	126
6.6.2. Méthode de Gauss–Seidel	128
6.6.3. Méthode de surrelaxation	129
6.6.4. Convergence des méthodes itératives	130
6.7. Système surdéterminé	131
6.8. Pour en savoir plus	132
6.9. Exercices	133
6.10. Projet : simulation d’une usine chimique	135
6.11. Annexe : rappels d’algèbre linéaire	136
6.11.1. Base et sous-espace	136
6.11.2. Image, noyau et rang	136
6.11.3. Inverse et déterminant	137
6.11.4. Normes vectorielles	137
6.11.5. Normes de matrices	138
6.11.6. Opérations sur des blocs	139
Chapitre 7. Polynômes orthogonaux	141
7.1. Définition, existence	141
7.2. Relation avec les polynômes habituels	143
7.3. Propriétés des zéros	143
7.4. Relation de récurrence	144
7.5. Équation différentielle	145
7.6. Fonction génératrice	145
7.7. Formule de Rodrigues	146
7.8. Identité de Darboux–Christofel	146
7.9. Polynômes particuliers	146
7.9.1. Legendre	146
7.9.2. Hermite	147
7.9.3. Laguerre	148
7.9.4. Tscheychef	149

7.10. Autres polynômes classiques	150
7.10.1. Jacobi	150
7.10.2. Laguerre généralisé	150
7.11. Pour en savoir plus	150
7.12. Exercices	151
Chapitre 8. Dérivation et intégration numériques	155
8.1. Rappels d'analyse	155
8.2. Dérivée d'une fonction analytique	156
8.2.1. Développements limités	156
8.2.2. Méthode des coefficients indéterminés	158
8.2.3. Dérivée du polynôme d'interpolation	159
8.2.4. Accélération de la convergence	159
8.3. Dérivée d'une fonction empirique	160
8.4. Généralités sur l'intégration numérique	161
8.5. Méthodes élémentaires d'intégration	162
8.6. Méthodes de Newton–Cotes	164
8.6.1. Intervalle fermé	164
8.6.2. Intervalle ouvert	166
8.6.3. Formules composites	167
8.7. Méthode de Romberg	168
8.8. Intégration de Gauss	170
8.9. Généralisations de la méthode de Gauss	172
8.10. Les intégrales généralisées	173
8.11. Les intégrales multiples	173
8.12. L'intégrale sans peine	174
8.13. Pour en savoir plus	175
8.14. Exercices	175
8.15. Projet : champ magnétique et lignes de champ	180
Chapitre 9. Analyse spectrale, transformation de Fourier numérique	183
9.1. Les méthodes de Fourier	183
9.1.1. Série de Fourier	183

9.1.2. Intégrale ou transformée de Fourier (TF)	184
9.1.3. Vocabulaire et notations	185
9.1.4. Échantillonnage	185
9.1.5. Transformée de Fourier d'une fonction échantillonnée (TFTD)	186
9.2. Transformée de Fourier discrète (TFD)	187
9.2.1. Définition	187
9.2.2. La TFD comme approximation de l'intégrale de Fourier	187
9.2.3. Notation matricielle pour la TFD	188
9.3. Transformée de Fourier rapide (TFR)	189
9.3.1. Algorithme de Cooley–Tukey ou « entrelacement en temps »	190
9.3.2. Le renversement binaire	193
9.3.3. Factorisation de la matrice V et variantes de l'algorithme TFR	193
9.4. Propriétés de la transformée de Fourier discrète	195
9.5. Pour en savoir plus	201
9.6. Exercices	201
9.7. Projet : diffraction de Fraunhofer	203
Chapitre 10. Valeurs propres, vecteurs propres	205
10.1. Les éléments propres sans peine	206
10.2. Méthode de la puissance n -ième et méthodes dérivées	207
10.2.1. Puissance n -ième	207
10.2.2. Puissance n -ième avec décalage	209
10.2.3. Puissance n -ième de l'inverse	209
10.2.4. Puissance n -ième de l'inverse avec décalage	209
10.2.5. Quotient de Rayleigh	210
10.3. Méthode de Jacobi	211
10.3.1. Principe	211
10.3.2. Mise en œuvre	212
10.4. Transformation de Householder	217
10.5. Factorisation QR et algorithme QR	220
10.5.1. Factorisation QR	220
10.5.2. Algorithme QR	221

10.6. Réduction à la forme tridiagonale et calcul des valeurs propres	223
10.6.1. Tridiagonalisation	223
10.6.2. Calcul des valeurs propres	225
10.7. Matrices hermitiennes	226
10.8. Pour en savoir plus	227
10.9. Exercices	228
10.10. Projets	230
10.10.1. Vibrations d'une « molécule » linéaire	230
10.10.2. Modèle de Hückel	232
Chapitre 11. Problèmes différentiels à conditions initiales	235
11.1. Méthodes analytiques	237
11.1.1. Développement de Taylor	237
11.1.2. Méthode des coefficients indéterminés (Frobenius)	238
11.1.3. Méthode de Picard, ou d'approximations successives	238
11.2. Méthodes d'Euler et de Taylor	239
11.3. Méthodes de Runge–Kutta	242
11.3.1. Méthodes d'ordre 2	242
11.3.2. Méthode d'ordre 4	243
11.3.3. Avantages et inconvénients des méthodes de Runge–Kutta	246
11.3.4. Organisation d'un programme	247
11.4. Ordre, stabilité et convergence des méthodes à un pas	247
11.5. Méthodes à pas multiples	251
11.5.1. Schémas explicites (ouverts)	251
11.5.2. Schémas implicites (fermés)	253
11.5.3. Méthodes de prédiction-corrrection	254
11.5.4. Surveillance de l'erreur	256
11.5.5. Formules d'ordre 4	256
11.5.6. Avantages et inconvénients des méthodes à pas multiples	257
11.6. Ordre, stabilité et convergence des méthodes multi-pas	257
11.7. Méthodes pour les équations du second ordre	258
11.7.1. Algorithme de Verlet ou de saute-mouton	258

11.7.2. Algorithme de Numerov	259
11.8. Équations « raides »	260
11.9. Résoudre une équation différentielle en dormant	261
11.10. Pour en savoir plus	265
11.11. Exercices	265
11.12. Projets	269
11.12.1. Pendule élastique	269
11.12.2. Pendule double	270
11.12.3. Trajectoires de particules chargées dans le champ magnétique terrestre	271
11.12.4. Le vent solaire ou l'effet Stark–Lo Surdo	272
11.12.5. Objectif de microscope électronique à focalisation magnétique	273
11.12.6. Calcul de sections efficaces	274
11.12.7. Le chemostat	277
Chapitre 12. Problèmes à conditions aux limites et problèmes aux valeurs propres	281
12.1. La méthode du tir	283
12.1.1. Problème aux limites	283
12.1.2. Problème de valeurs propres	285
12.2. Méthodes des différences finies	286
12.2.1. Problème aux limites	286
12.2.2. Problème de valeurs propres	288
12.3. Les boîtes noires	291
12.4. Pour en savoir plus	292
12.5. Exercices	292
12.6. Projets	294
12.6.1. Flexion d'une poutre	294
12.6.2. Tuyau sonore	295
12.6.3. Modèle de Kronig–Penney	297
12.6.4. Vibrations d'une membrane circulaire	298

Chapitre 13. Équations aux dérivées partielles	301
13.1. Équations de Laplace et de Poisson	301
13.1.1. Discrétisation par différences finies	302
13.1.2. Discrétisation par éléments finis	305
13.2. Équation de la chaleur	312
13.2.1. Discrétisation par différences finies	312
13.2.2. Condition de stabilité pour la discrétisation en temps	314
13.2.3. Discrétisation par éléments finis	316
13.2.4. Méthodes de splitting pour l'équation de la chaleur en dimension 2	319
13.3. Équation de transport et équation des ondes	322
13.3.1. Discrétisation par différences finies de l'équation de transport	323
13.3.2. Discrétisation par différences finies et éléments finis de l'équation des ondes	327
13.4. Pour en savoir plus	329
13.5. Exercices	330
 Chapitre 14. Probabilités et erreurs	 335
14.1. Probabilité	335
14.2. Lois de probabilité	337
14.2.1. Loi binomiale	337
14.2.2. Loi de Poisson	338
14.2.3. Loi uniforme	339
14.2.4. Loi normale ou de Gauss	339
14.2.5. Loi du χ^2 ou de Pearson	340
14.2.6. Paramètres de la loi de probabilité et paramètres de l'échantillon	341
14.2.7. Vérification d'une loi de probabilité	342
14.3. Erreurs	343
14.4. Propagation des erreurs	346
14.5. Méthode du maximum de vraisemblance	347
14.6. Méthode des moindres carrés	349
14.6.1. Ajustement sur une fonction affine	350

14.6.2. Linéarisation	352
14.7. Qualité de l'ajustement	352
14.8. Coefficient de corrélation	355
14.9. Ajustement sur une fonction linéaire de plusieurs paramètres	355
14.10. Pour en savoir plus	357
14.11. Exercices	358
Chapitre 15. Méthodes de Monte Carlo	363
15.1. Générateurs de nombres aléatoires	364
15.1.1. Principe	364
15.1.2. Vérification d'un GNA	365
15.1.3. Validation d'un GNA à l'aide d'une marche aléatoire	366
15.2. Nombres aléatoires à répartition non-uniforme	367
15.2.1. Fonction d'une variable aléatoire	368
15.2.2. Méthode de la fonction réciproque ou du changement de variable	369
15.2.3. La méthode du rejet de von Neumann	370
15.2.4. La distribution normale	371
15.3. Simulation de phénomènes aléatoires	372
15.3.1. La radioactivité	373
15.3.2. L'agrégation	374
15.4. Méthodes de Monte Carlo déterministes : calcul d'intégrales	375
15.4.1. Calcul de π	375
15.4.2. Avantages et inconvénients des méthodes stochastiques pour le calcul d'intégrales	376
15.4.3. Intégrales par la méthode du rejet	377
15.4.4. Intégrales par la valeur moyenne	378
15.5. Pour en savoir plus	379
15.6. Exercices	380
15.7. Projet : le modèle d'Ising	382
Index	385

AVANT-PROPOS

Qu'est-ce que l'analyse numérique ? C'est un ensemble d'outils qui permet d'obtenir une solution numérique approchée d'un problème mathématique, lui-même modèle d'une question technique ou scientifique.

Pourquoi étudier (et enseigner) l'analyse numérique conçue de cette manière ? N'est-il pas suffisant d'appuyer sur la touche « solve » d'une calculatrice pour résoudre une équation algébrique ? Si l'on veut vraiment utiliser un logiciel, pourquoi faire plus que d'appeler, à l'intérieur d'un logiciel de haut niveau, la fonction « solve » ? En réalité, il est toujours profitable de connaître le principe de fonctionnement des outils que l'on utilise afin de les employer au mieux et pour être conscient de leurs limites. De plus, il peut arriver qu'un programme, bien qu'immédiatement disponible, ne soit pas parfaitement adapté à l'usage prévu ; seul l'utilisateur bien informé pourra le modifier en connaissance de cause et étendre son domaine de validité. Enfin, la curiosité est une qualité légitime chez l'ingénieur ou le scientifique et ce livre aide à soulever les couvercles des « boîtes noires » que sont les algorithmes numériques.

C'est dans cette optique qu'a été conçu l'ouvrage que vous avez entre les mains : le principe de chaque algorithme important est présenté simplement, puis son fonctionnement est illustré par des exemples et les limites sont précisées.

Le livre est fait pour des scientifiques de niveau L2, L3 ou M1 en physique et physique appliquée. L'ouvrage est donc destiné aux étudiants et élèves ingénieurs, mais aussi à tous les utilisateurs de l'outil numérique, en particulier ceux qui ont peu de goût ou de temps pour les démonstrations rigoureuses et qui souhaitent aborder rapidement les applications concrètes.

Le texte est orienté vers la « physique numérique ». Il y a quinze ans, ce terme (ou plutôt ses équivalents anglais, « numerical physics » ou « computational physics ») suscitait une centaine de réponses sur un moteur de recherche. Il en évoque plusieurs millions aujourd'hui. Bien que cet ouvrage ne soit pas, au sens strict, un livre de physique numérique, il s'en approche, par l'intermédiaire de certains exemples, exercices et projets.

Par rapport aux programmes habituels de mathématiques, sont inclus des chapitres qui ne font pas traditionnellement partie de l'analyse numérique comme les polynômes orthogonaux et un rappel de calcul des probabilités. Certains sujets qui, à l'expérience, semblent rébarbatifs, ont été omis, traités sommairement ou introduits assez tard dans le développement. D'autres, au contraire, qui paraissent plus motivants, ont été placés au début.

On trouve d'excellents livres d'analyse numérique en français. Ils s'adressent en général à un public de mathématiciens ou de futurs mathématiciens et sont aussi d'un niveau assez élevé. Nous renvoyons systématiquement à ces ouvrages (Crouzeix et Mignot, Schatzmann, Demailly, Allaire et Kaber, etc.) pour la plupart des démonstrations. Les aspects élémentaires, tels qu'on peut les assimiler pendant les deux premières années post-baccalauréat, ont été privilégiés.

Chaque fois que l'on traite de méthodes numériques, se pose la question du langage de programmation à utiliser. Si l'ouvrage contient quelques exemples de code rédigés en C/C++, en Java, en Python et en Maple, l'essentiel des exemples présentés est écrit en Scilab. Ce logiciel gratuit, puissant et facile à installer, intègre des fonctions graphiques de qualité raisonnable. Il permet la programmation à plusieurs niveaux : niveau global (fonctions telles que « `fsolve` » pour résoudre une équation non-linéaire ou « `ode` » pour intégrer une équation différentielle avec conditions initiales) jusqu'au niveau des opérations élémentaires. Cette souplesse est pédagogiquement utile et permet une vérification commode des programmes. Un autre avantage de Scilab est que la syntaxe en est fort simple et facilement assimilable par toute personne formée, même sommairement, à Fortran, C ou Java. Sa ressemblance avec Matlab, un logiciel très répandu, constitue un autre facteur positif.

Chaque chapitre est accompagné d'exercices qui ont été expérimentés par de nombreuses promotions d'étudiants et qui peuvent illustrer utilement le sujet traité. Sont également proposés des énoncés de projets en textes « ouverts » : les données peuvent être incomplètes, la méthode à suivre est parfois décrite assez sommairement. La réalisation du projet demandera donc un investissement personnel certain mais, en contrepartie, permettra au lecteur de se familiariser avec des applications de l'analyse numérique plus proches du monde réel. La liste des questions proposées pour chaque projet n'est pas limitative et peut être complétée selon les intérêts de chacun.

Les chapitres 1 à 3 constituent une sorte d'introduction ou de pré-requis avant d'appliquer une quelconque méthode numérique. Visualiser une fonction est la meilleure façon de découvrir ses propriétés. La programmation détaillée du calcul d'une fonction, même élémentaire, est un exercice profitable, tant du point de vue de l'algorithmique que du point de vue de l'analyse numérique. Enfin, la construction de variables sans dimension est une étape obligée de toute simulation numérique.

L'analyse numérique proprement dite apparaît au chapitre 4 avec l'interpolation. Si la pratique de l'interpolation a beaucoup diminué depuis l'apparition des ordinateurs, son rôle théorique, comme fondement des méthodes d'intégration et de résolution des équations différentielles, est resté. Les méthodes les plus simples de résolution des équations non-linéaires sont présentées (chapitre 5), en consacrant un paragraphe spécial aux polynômes. Puis suit une brève description des familles de polynômes orthogonaux et des leurs principales propriétés (chapitre 7). Bien que ces connaissances soient appliquées au chapitre suivant, lors de la construction de l'algorithme de Gauss-Legendre, cette partie peut être omise en première lecture. Les chapitres 8 et 9 sont consacrés au calcul numérique de dérivées et d'intégrales. Les algorithmes classiques sont passés en revue, y compris l'algorithme de Cooley–Tuckey pour la transformation de Fourier rapide.

L'algèbre linéaire est à l'honneur dans les chapitres 6 et 10. Tout d'abord, la résolution de systèmes d'équations linéaires (chapitre 6), y compris les systèmes surdéterminés, tels qu'on les rencontre lors de l'application de la méthode des moindres carrés. Ce chapitre est accompagné d'une annexe rassemblant quelques définitions et théorèmes d'algèbre linéaire. Le chapitre 10 traite du calcul des valeurs propres et des vecteurs propres.

Sont ensuite abordés les problèmes différentiels : équations différentielles ordinaires avec conditions initiales (chapitre 11), avec conditions aux limites (chapitre 12), puis équations aux dérivées partielles (chapitre 13).

L'ouvrage se termine par deux chapitres consacrés à des aspects non déterministes : quelques rudiments de probabilité appliqués à la propagation des erreurs expérimentales et au lissage par moindres carrés (chapitre 14) puis une description des méthodes de Monte Carlo.

De nombreux sujets ont dû être omis, soit parce qu'ils semblaient trop difficiles ou demandaient un exposé trop long. C'est notamment le cas des méthodes de descente et de gradient conjugué pour la résolution de systèmes linéaires, de certaines méthodes modernes de résolution numérique des équations aux dérivées partielles (collocation, méthodes spectrales) et de la décomposition d'une matrice en valeurs singulières. Les lecteurs pourront compléter leur information grâce aux références fournies en fin de chapitre.

Ces références, lorsqu'il s'agit de liens web, peuvent être directement consultées à partir du site compagnon du présent ouvrage à l'adresse

<http://grenoble-sciences.ujf-grenoble.fr/pap-ebooks/grivet>

Les lecteurs pourront également vérifier leur bonne compréhension des sujets traités en consultant les nombreuses solutions d'exercices proposées sur ce site. Certains programmes sont donnés sous forme de fichiers Scilab afin de pouvoir être directement exécutés. Ceci permettra à ceux qui le souhaitent de se concentrer sur des points de détail telle la dépendance par rapport à un paramètre du problème ou du schéma numérique utilisé pour le résoudre. Les lecteurs pourront encore se mettre au défi en affrontant de nouveaux projets, de niveau L1 cette fois. Des publications viennent documenter un certain nombre d'entre eux, permettant à chacun de progresser, quel que soit son niveau de départ.

REMERCIEMENTS

Pour la préparation du cours qui est l'ancêtre de ce livre, j'ai bénéficié des conseils de nombreux collègues, particulièrement de D. Mas et J.L. Rouet : je leur exprime ici ma reconnaissance. Ce livre n'existerait pas sans l'aide apportée par Grenoble Sciences. Les experts qui ont lu le manuscrit ont, non seulement corrigé un nombre incalculable de fautes de frappe et d'erreurs, mais ont aussi suggéré de nombreuses améliorations. Je rends ici hommage à leur dévouement, leur patience, leur esprit d'observation et leur rigueur mathématique. Le centre d'expertise de Grenoble Sciences a aussi droit à

ma reconnaissance. Mmes Capolo et Bordage ont géré la genèse de la première édition avec une extrême bonne volonté, elles ont détecté d'autres erreurs et, avec patience et habileté, redessiné toutes mes figures malhabiles ; je les en remercie vivement.

Cette deuxième édition a bénéficié de la collaboration très efficace de Magali Ribot, maître de conférences en mathématiques à l'Université de Nice (et déjà lectrice de la première édition). Madame Ribot, spécialiste reconnue des systèmes d'équations linéaires et des équations aux dérivées partielles, a entièrement réécrit le chapitre 13. Ce chapitre présente maintenant, en plus des méthodes élémentaires de résolutions des équations aux dérivées partielles, la méthode des éléments finis, actuellement d'usage universel dans ce domaine. Diverses améliorations plus localisées ont été apportées dans tout le texte et de nombreuses coquilles ont été corrigées, en particulier grâce à l'esprit d'observation et à la sagacité de Stéphanie Trine, de Grenoble Sciences. Nous espérons que cette nouvelle édition sera encore plus utile à ses lecteurs que l'édition précédente.

CHAPITRE 1

REPRÉSENTATION GRAPHIQUE DE FONCTIONS

L'une des activités les plus fréquentes en informatique scientifique consiste à représenter l'allure d'une fonction à l'aide d'un dessin, et de très nombreux logiciels peuvent répondre à cette attente légitime. Nous présentons dans ce chapitre des exemples choisis dans trois catégories de logiciels : un sous-programme que l'on doit incorporer dans un programme principal pour produire un tracé « en ligne », une application autonome capable de représenter graphiquement des données produites par un autre programme et enfin des logiciels puissants capables de calculer et de tracer. On peut encore distinguer deux cas un peu différents en pratique : ou bien la fonction est définie par une ou des formules ou un programme (c'est une fonction « analytique »), ou bien elle est représentée par un tableau de valeurs créé à l'avance (fonction « numérique »). Dans le premier cas, il faudra programmer la formule correspondante ; dans le deuxième cas, il faudra faire lire un fichier de données par le logiciel considéré, à moins de devoir entrer toutes les valeurs au clavier. Nous expliquons la marche à suivre, pour quelques logiciels pratiques et faciles d'accès, dans les paragraphes qui suivent.

1.1. LES TABLEURS

Tous les tableurs comportent des outils graphiques puissants. Pour cet exemple, nous utiliserons le programme **Calc** de la collection « OpenOffice.org ». Pour représenter les variations de la fonction $y = \exp(-x/3) \cos(2x)$, nous installons dans la colonne A la suite des valeurs de x . Il suffit de donner les deux premières valeurs (0 dans A1 et 0.05 dans A2 par exemple), de sélectionner ces deux cellules puis de créer toutes les valeurs suivantes (jusqu'à une limite choisie par l'utilisateur) dans la même colonne à l'aide de la « poignée de recopie ». Le programme demande si nous voulons engendrer une progression arithmétique, ce que nous confirmons. La cellule B1 contiendra l'expression de la fonction ; comme il s'agit d'une formule, nous écrivons `=exp(-A1/3)*cos(2*A1)`. Utilisant encore la poignée de recopie, nous reproduisons cette expression dans toutes les cellules utiles de la colonne B, en indiquant dans la

- rand(), 365
- rang, 136
- Rayleigh, 183
 - quotient de, 210
- rayon spectral, 131
- read, 12
- readdata, 9
- réduction à la forme tridiagonale, 223–226
- règle de Descartes, 94
- rejet (méthode du), 370, 377
- relation de récurrence, 21
- relaxation
 - matrice de, 131
 - méthode de, 304
- Remez (algorithme de), 28
- renversement binaire, 193
- Richardson (formule de), 159, 168, 176
- Riemann (fonction de), 39
- RK4 (méthode), 245
- Rodrigues (formule de), 146
- Rolle (théorème de), 62, 155
- Romberg (méthode de), 168
- rotation
 - de Givens, 213
 - de Jacobi, 213
- Runge (phénomène de), 63, 74
- Runge–Kutta (schéma de), 242–247, 286
- Runge–Kutta–Fehlberg (schéma de), 246
- saute-mouton (algorithme du), 258
- Scanner, 6
- schéma
 - à pas multiples, 251–257
 - d’Euler, 239–241
 - d’Euler amélioré, 243
 - d’Euler explicite, 312
 - d’Euler implicite, 257, 313
 - d’Euler modifié, 243
 - de Crank et Nicolson, 314
 - de Heun, 243
 - de Peaceman–Rachford, 321
 - de Runge–Kutta, 242–247, 286
 - de Runge–Kutta–Fehlberg, 246
 - explicite, 251
 - implicite, 253
 - upwind, 324
- Scilab, 10
- Scipy, 7
- sécante (méthode de la), 89
- série de Fourier, 183
- Shannon (théorème de), 186
- similitude, 206, 211, 222, 223
- Simpson (formule de), 165, 168
- sinc, 185
- spec, 206
- splin, 73
- spline (interpolation), 70–74
- splitting
 - de Strang (méthode de), 320
 - méthode de, 319
- stabilité d’un schéma numérique, 248, 316, 324
- Sturm
 - suites de, 95–97, 144, 225
 - théorème de, 95
- Sturm–Liouville (problème de), 283
- suites de Sturm, 95–97, 144, 225
- surrelaxation (méthode de), 129
- symbole de Kronecker, 56
- système
 - d’équations non linéaires, 89–92
 - différentiel, 236
 - surdéterminé, 131–132
 - tridiagonal, 125, 205, 314
- tableur, 5
- Taylor (formule de), 156
- TEST.CHI-DEUX, 343
- théorème
 - central limite, 371
 - de Buckingham, 48
 - de Lax–Richtmyer, 315
 - de Rolle, 62, 155
 - de Shannon, 186
 - de Sturm, 95
 - de Weierstrass, 27
 - des accroissements finis, 155
 - des valeurs intermédiaires, 81
- tir (méthode du), 283–287
- transformation
 - conforme, 43
 - de Fourier, 184
 - de Fourier discrète, TFD, 187
 - de Fourier rapide, TFR, 189
 - de Householder, 217–219, 223

- de Joukovsky, 44
- trapèzes
 - composée (méthode des), 167, 176
 - implicite (méthode des), 253, 254
 - méthode des, 162, 165, 169
- triangulation d'un domaine, 310
- tridiagonalisation, 205, 223
- Tschebychef, 28
 - points de, 63
 - polynôme de, 149
- tuyau sonore, 295

- valeur moyenne, 336
- valeurs intermédiaires (théorème des),
 - 81
- de la Vallée–Poussin, 28
- van der Monde (déterminant de), 55
- variable aléatoire, 335
- variance, 336
- Verlet (algorithme de), 258

- Wallis (algorithme de), 36
- Weierstrass (théorème de), 27
- Wilkinson (polynôme de), 99

- xmgrace, 12