

Table des matières

Préface	3
1 Interpolation et approximation	1
1.1 Introduction	1
1.2 Approximation d'une fonction par une autre fonction	1
1.2.1 Fonctions d'approximation	1
1.2.2 Approximation polynomiale	2
1.3 Détermination des polynômes d'interpolation	4
1.3.1 Calcul du polynôme d'interpolation	4
1.3.2 Polynôme d'interpolation de Newton	5
1.3.3 Polynôme d'interpolation de Lagrange	9
1.3.4 Interpolation polynomiale avec des points régulièrement espacés	10
1.3.5 Polynômes de Hermite	13
1.3.6 Polynômes de Chebyshev et points irrégulièrement espacés	15
1.3.7 Interpolation par polynôme cubique de Hermite	21
1.3.8 Interpolation par fonctions splines	24
1.3.9 Interpolation par des courbes splines paramétriques	28
1.4 Courbes de Bézier	30
1.5 Discussion et conclusion	33
2 Intégration numérique	35
2.1 Introduction	35
2.2 Formules d'intégration de Newton et Cotes fermées	35
2.2.1 Intégration globale sur l'intervalle $[a, b]$	35
2.2.2 Intégration sur des sous-intervalles	38
2.3 Formules d'intégration de Newton et Cotes ouvertes	40
2.4 Conclusions sur les formules d'intégration de Newton et Cotes	41
2.5 Intégration répétée par dichotomie et intégration de Romberg	41
2.6 Intégration numérique avec des points irrégulièrement espacés	45
2.6.1 Rappels sur les polynômes orthogonaux	45
2.6.2 Quadrature de Gauss-Legendre	48
2.6.3 Quadrature de Gauss-Laguerre	52
2.6.4 Quadrature de Gauss-Chebyshev	53
2.6.5 Quadrature de Gauss-Hermite	53
2.7 Discussion et conclusion	53

3	Résolution d'équations par des méthodes itératives	55
3.1	Introduction	55
3.2	Méthode de Graeffe	56
3.3	Méthode de Bernoulli	57
3.4	Méthode de Bairstow	60
3.5	Existence d'une racine d'une fonction	64
3.6	Méthodes de dichotomie et regula falsi	65
3.6.1	Méthode de dichotomie	65
3.6.2	Méthode regula falsi	66
3.7	Méthode des substitutions successives	68
3.8	Méthode de Newton et méthodes dérivées	71
3.8.1	Méthode de Newton	71
3.8.2	Méthode de la sécante	74
3.9	Méthode de Wegstein	75
3.10	Méthode de Aitken	78
3.11	Méthode d'homotopie	79
3.11.1	Introduction	79
3.11.2	Méthode de continuation	80
3.12	Discussion et conclusion	84
4	Opérations numériques sur les matrices	87
4.1	Introduction	87
4.2	Rappels sur les matrices	87
4.3	Rappels sur les vecteurs	89
4.4	Transformations linéaires et sous-espaces	91
4.4.1	Théorème de Gershgorin	93
4.4.2	Théorème de Cayley-Hamilton et conséquences	95
4.4.3	Méthode de la puissance	96
4.5	Matrices semblables et polynômes de matrices	97
4.6	Matrices symétriques et matrices hermitiennes	98
4.7	Réduction de matrices sous une forme plus simple	103
4.8	Méthode LR de Rutishauser	103
4.9	Méthode de Householder	108
4.10	Méthode QR de Francis	113
4.11	Discussion et conclusion	123
5	Résolution des systèmes d'équations algébriques	125
5.1	Introduction	125
5.2	Résolution de systèmes linéaires triangulaires	125
5.3	Résolution de systèmes linéaires : méthode d'élimination de Gauss	126
5.4	Calcul du déterminant d'une matrice	133
5.5	Algorithme de Gauss-Jordan	134
5.6	Factorisation LDL^T	137
5.7	Décomposition de Cholesky	138
5.8	Décomposition en valeurs singulières	140
5.9	Méthode des moindres carrés pour les systèmes linéaires sur-déterminés	141
5.10	Résolution itérative de grands systèmes linéaires (Jacobi, Gauss-Seidel)	143
5.11	Résolution de systèmes linéaires : cas d'une matrice tridiagonale	148
5.12	Résolution de systèmes non linéaires : méthode de Newton-Raphson	149
5.13	Résolution de systèmes non linéaires par optimisation	152

5.14	Discussion et conclusion	152
6	Intégration numérique des équations différentielles ordinaires	155
6.1	Introduction	155
6.1.1	Equations différentielles linéaires et non-linéaires	156
6.1.2	Unicité de la solution	157
6.2	Problèmes à valeur initiale	157
6.2.1	Méthodes à un pas	158
6.2.2	Méthodes à pas multiples	174
6.2.3	Formules d'intégration ouvertes	174
6.3	Stabilité des méthodes d'intégration numérique	182
6.4	Cas des systèmes raides	184
6.5	Systèmes algébro-différentiels	185
6.6	Equations différentielles à frontières multiples	187
6.7	Discussion et conclusion	188
7	Intégration numérique des équations aux dérivées partielles	191
7.1	Introduction	191
7.2	Quelques exemples de systèmes physiques	191
7.2.1	Transfert de chaleur par conduction	192
7.2.2	Transfert de matière par diffusion	193
7.2.3	Equation des ondes	193
7.2.4	Equation de Laplace	194
7.3	Propriétés des équations aux dérivées partielles	195
7.3.1	Généralités	195
7.3.2	Problème bien posé	196
7.3.3	Classification	196
7.3.4	Caractérisation des solutions	197
7.4	Méthode des caractéristiques	197
7.4.1	Equation aux dérivées partielles linéaire de premier ordre	198
7.4.2	Equation aux dérivées partielles non linéaire de premier ordre	205
7.4.3	Equation aux dérivées partielles quasi-linéaire de second ordre	205
7.5	Méthode des différences finies	208
7.5.1	Introduction	208
7.5.2	Discrétisation	208
7.6	Calcul automatique des dérivées partielles	234
7.6.1	Calcul de $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_0$ et $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_N$	235
7.6.2	Calcul de $\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_0$ et $\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_N$	237
7.6.3	Quelques autres schémas de différentiation	238
7.6.4	Dérivation numérique par les nombres complexes	240
7.7	Méthode des lignes	241
7.7.1	Cas de conditions aux limites de Dirichlet	242
7.7.2	Cas de conditions aux limites de Neumann	242
7.7.3	Application to the simulation of a heat exchanger	244
7.8	Différences finies sur un maillage irrégulier	248
7.9	Résolution d'une équation aux dérivées partielles par les splines	249
7.10	Méthodes spectrales	252
7.10.1	Méthode des résidus pondérés	253

7.10.2	Fonctions radiales de base	255
7.10.3	Collocation polynomiale, ODE à valeur initiale	262
7.10.4	Résidus pondérés, ODE à conditions aux limites	263
7.10.5	Résidus pondérés, équation aux dérivées partielles	268
7.11	Maillage mobile	272
7.11.1	Théorie	272
7.11.2	Test sur une fonction analytique	275
7.11.3	Implémentation sur des problèmes physiques	276
7.11.4	Brève présentation du cadre de travail général	279
7.11.5	Application : chromatographie en phase liquide, équilibre	279
7.11.6	Application : chromatographie en phase liquide, LDF rigoureux	280
7.12	Méthode des volumes finis	284
7.12.1	Introduction	284
7.12.2	Maillage	284
7.12.3	Intégration sur un volume de contrôle quelconque	286
7.12.4	Prise en compte des conditions aux limites à gauche	288
7.12.5	Prise en compte des conditions aux limites à droite	289
7.12.6	Deux milieux solides en contact, conductivités différentes	291
7.12.7	Résolution numérique	292
7.12.8	Problème bidimensionnel	296
7.12.9	Extension au cas des écoulements	297
7.12.10	Conservation appliquée à un volume de contrôle	298
7.12.11	Algorithme SIMPLER	300
7.13	Méthode des éléments finis	300
7.13.1	Etape 1 : Eléments et noeuds	303
7.13.2	Etape 2 : Fonctions d'interpolation polynomiales	304
7.13.3	Etapes 3-4 : matrices de conductance, vecteurs nodaux de flux	307
7.13.4	Convergence, compatibilité, complétude	334
7.13.5	Cas des systèmes dynamiques	335
7.13.6	Transfert de chaleur et transport de fluide dans un tube	341
7.13.7	Ecoulement dans un milieu poreux	348
7.13.8	Diffusion - Réaction chimique	349
7.13.9	Mécanique des fluides	352
7.13.10	Formulation bidimensionnelle (2D)	355
7.13.11	Exemples de simulations 2D et 3D	357
7.14	Méthode des éléments de frontière	362
7.14.1	Préliminaires mathématiques	363
7.14.2	Problèmes de potentiel	364
7.14.3	Méthode de la fonction de Green	366
7.14.4	Méthode analytique-numérique des éléments de frontière	372
7.14.5	Méthode des éléments de frontière en transfert de chaleur 2D	378
7.15	Discussion et conclusion	384
8	Méthodes analytiques d'optimisation	395
8.1	Introduction	395
8.2	Quelques rappels mathématiques	395
8.3	Introduction	396
8.4	Fonctions d'une seule variable	397
8.4.1	Intervalle infini	397
8.4.2	Intervalle fini	401

8.4.3	Présence de discontinuités	401
8.5	Fonctions de plusieurs variables	402
8.5.1	Intervalle infini	402
8.5.2	Intervalle fini	402
8.5.3	Présence de discontinuités	402
8.6	Fonction soumise à des contraintes d'égalité	403
8.6.1	Méthode de Jacobi	403
8.6.2	Multiplicateurs de Lagrange	405
8.6.3	Signification des multiplicateurs de Lagrange	407
8.6.4	Conditions de minimum	407
8.6.5	Minimum, gradient projeté, contraintes d'égalité	407
8.7	Fonction soumise à des contraintes d'inégalité	412
8.7.1	Utilisation de variables d'écart	412
8.7.2	Paramètres de Karush-Kuhn-Tucker	414
8.7.3	Minimum, gradient projeté, contraintes d'inégalité	418
8.8	Fonction soumise à des contraintes d'égalité et d'inégalité	423
8.8.1	Position du problème	423
8.8.2	Dualité de Lagrange	425
8.9	Analyse de sensibilité	425
8.10	Discussion et conclusion	427
9	Méthodes numériques d'optimisation	431
9.1	Introduction	431
9.2	Fonctions d'une seule variable	431
9.2.1	Méthode de dichotomie	432
9.2.2	Méthode de Newton	433
9.2.3	Méthode de Fibonacci	435
9.3	Fonctions de plusieurs variables	437
9.4	Méthodes de recherche directe	438
9.4.1	Recherche simple monovariante	438
9.4.2	Méthode du simplexe	438
9.4.3	Méthodes d'accélération	440
9.4.4	Simplexe de Nelder-Mead	444
9.4.5	Méthode du complexe de Box	447
9.4.6	Algorithme génétique	450
9.5	Méthodes de gradient	452
9.5.1	Cas d'une fonction quadratique	453
9.5.2	Cas d'une fonction non quadratique	457
9.5.3	Méthode de la plus grande pente	458
9.5.4	Problème de la recherche dans une direction \mathbf{s} donnée	460
9.5.5	Méthode des gradients conjugués	463
9.5.6	Méthode de Newton-Raphson	470
9.5.7	Méthode de quasi-Newton	475
9.5.8	Méthodes pour les sommes de carrés	480
9.5.9	Méthode de Gauss-Newton	481
9.5.10	Méthode de Levenberg-Marquardt	481
9.5.11	Approximation de quasi-Newton	485
9.5.12	Systèmes d'équations non linéaires	486
9.6	Discussion et conclusion	486

10	Programmation linéaire	489
10.1	Introduction	489
10.2	Formulation du problème à partir d'exemples	490
10.2.1	Utilisation de variables d'écart	490
10.2.2	Utilisation de variables d'écart et de variables artificielles	492
10.2.3	Conditions d'optimalité	493
10.3	Résolution du problème, tableau du simplexe	494
10.3.1	Interprétation géométrique de l'exemple 10.1	494
10.3.2	Tableau du simplexe avec variables d'écart et artificielles	499
10.4	Solution théorique	502
10.5	Cas de contraintes simultanées d'inégalité et d'égalité	506
10.6	Dualité	509
10.6.1	Exemple de dualité	510
10.6.2	Démonstration du théorème de dualité	510
10.6.3	Lagrangian based demonstration of duality	514
10.7	Méthodes de point intérieur	517
10.7.1	Méthode de projection de Karmarkar	518
10.7.2	Transformation affine	525
10.8	Discussion et conclusion	527
11	Optimisation quadratique et non linéaire	531
11.1	Introduction	531
11.2	Optimisation quadratique, Karush-Kuhn-Tucker, simplexe	532
11.2.1	Première présentation	532
11.2.2	Deuxième présentation	532
11.2.3	Solution sous forme d'un problème de simplexe	533
11.3	Optimisation quadratique, méthode de barrière	534
11.4	Optimisation non linéaire par optimisation quadratique successive	539
11.4.1	Introduction	539
11.4.2	Notion de région possible et de cône tangent	540
11.4.3	Optimisation quadratique successive	540
11.4.4	Spécificités et difficultés du problème SQP	546
11.5	Discussion et conclusion	551
12	Optimisation dynamique	555
12.1	Introduction	555
12.2	Position du problème	557
12.3	Méthode variationnelle classique dans le cadre mathématique	559
12.3.1	Variation du critère	560
12.3.2	Problème variationnel sans contraintes, à limites fixes	561
12.3.3	Problème variationnel avec contraintes, cas général	562
12.3.4	Equation de Hamilton-Jacobi	565
12.4	Optimisation dynamique en temps continu	567
12.4.1	Méthodes variationnelles	567
12.4.2	Variation du critère	568
12.4.3	Equation et conditions d'Euler	569
12.4.4	Condition de Weierstrass et maximisation du hamiltonien	571
12.4.5	Equation et conditions de Hamilton-Jacobi	572
12.4.6	Principe du maximum	576
12.4.7	Arcs singuliers	578

12.4.8	Problèmes numériques	584
12.5	Programmation dynamique (temps discret)	589
12.5.1	Programmation dynamique classique	589
12.5.2	Equation de Hamilton-Jacobi-Bellman	598
12.6	Conclusion	599
13	Exercices	603
13.1	Interpolation et approximation	603
13.2	Intégration numérique	613
13.3	Résolution d'équations par des méthodes itératives	616
13.4	Opérations numériques sur les matrices	622
13.5	Résolution des systèmes d'équations algébriques	626
13.6	Intégration numérique des équations différentielles ordinaires	634
13.7	Intégration numérique des équations aux dérivées partielles	645
13.8	Méthodes analytiques d'optimisation	649
13.9	Méthodes numériques d'optimisation	661
13.10	Optimisation linéaire	670
13.11	Optimisation quadratique et non linéaire	676
13.12	Optimisation dynamique	681
Index		696