Outils mathématiques et numériques pour la physique

Nicolas Fressengeas

UE SPM-PHY-S07-101
Outils mathématiques et numériques pour la physique

N. Fressengeas

Laboratoire Matériaux Optiques, Photonique et Systèmes
Unité de Recherche commune à l'Université Paul Verlaine Metz et à Supélec

Document à télécharger sur `http://moodle.univ-metz.fr/`

Quelques ouvrages. . .
[GJP05, Pie01, Bis04]


Christopher M. Bishop.
Neural Networks for Pattern Recognition, chapter 7 :Parameter Optimization Algorithms.
Oxford University Press, 2004.


2005 Grivet Jean-Philippe.
Analyse numérique pour les sciences physiques.
Association *Libre Cours*, 2005.


Nougier Jean Pierre.
Méthodes de calcul numérique.
Hermes Sciences, 2001.

Partie I

Formats numériques et codage

I Formats numériques et codage

Fonctionnement élémentaire d'un ordinateur

Courte introduction pour ceux qui ne sauraient pas

Un ordinateur est un outil pour le traitement des données

- Il utilise des données d'entrée
- Effectue dessus un traitement programmmé
- Fournit des données en sortie
- Et c'est tout !
- Les programmes les plus complexes se résument à ça

3 composants principaux

Le(s) microprocesseur(s) CPU

- Effectue(nt) toutes[1] les tâches de traitement
- C'est un circuit électronique
- Les informations sont transmises sur des bus : ensembles de fils électriques

La mémoire

- Stockage des données d'entrée et de sortie
- Stockage des résultats intermédiaires
- Stockage des *programmes de traitement*

Les périphériques

Sans eux, ni entrée, ni sortie de donnée

[1] Certaines tâches de traitement, comme la gestion de l'affichage, peuvent être sous-traitées à des cartes spécialisées

La mémoire

2 grands types de mémoire

La mémoire vive — RAM

- Très rapide (ns)
- Capacitée limitée à quelques Giga Octets
- Sert au stockage temporaire des données

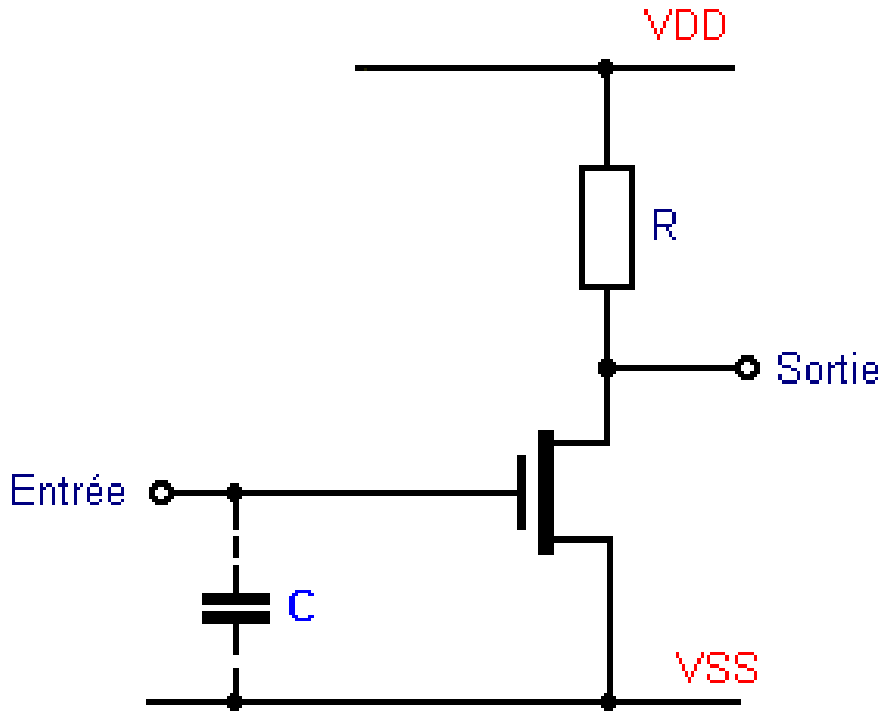
Le Disque Dur — HDD

- 10^3 à 10^6 fois plus lent que la RAM
- Grandes capacités (Tera Octet)
- Stockage permanent
- Emulation de la RAM (swap) si elle vient à manquer

Cellule (BIT) de RAM

Un simple condensateur BIT

- chargé/non chargé : 1/0
- Très volatile
- Rafraichissement régulier (ms)



Organisation et traitement de la mémoire

BITs regroupés en Octets

- 1 octet : 8 BITS à 0 ou 1
- 1 octet $\leftrightsquigarrow$ entier de 0 à $2^8 - 1 = 255$

Traitement des octets par le microprocesseur

- Un par un pour les microprocesseurs 8 bits — Z81,6809
- 2 par 2 pour les microprocesseurs 16 bits — Motorola,68000
- Quatre à la fois pour les 32 bits — Intel
- 8 à la fois pour les 64 bits — AMD/Intel

Octets organisé en un tableau unique

Chacun porte un numéro : son adresse

Prenons un exemple

Comment stocker les entiers négatifs ou supérieurs à 255 ?

Stockage des grands entiers

- 8 bits ne suffisent pas : prenons 2 octets
- 2 octets : entiers de 0 à $2^{16} - 1 = 65535$
- $b1111\,1111\,1111\,1110$ vaut donc 65534

Nombre négatifs

- Prenons la convention du complément[2] à 2 :

  Si le premier BIT est 1, le nombre représenté est l'opposé du complément à 2 des autres bits
- $b1111\,1111\,1111\,1110$ vaut $-b000\,0000\,0000\,0001$ donc -1

[2] Cette convention est commode car, grâce à elle, l'addition relative est compatible avec les additionneur binaires de nombres entiers naturels

Un format pour les entiers

$b1111\,1111\,1111\,1110$ — 65534 ou -1 ?

- Stocke-t-on des entiers relatif (ou non) ?
- Il faut le définir à priori
- C'est le format de ces 2 octets

Même les entiers naturels posent problème

Big Endian Little Endian

- Prenons $b1000\,0000\,0000\,0000$, entier naturel sur 2 octets
- Stockons l'octet de poids fort ($b1000\,0000$) dans l'adresse la plus basse
- Puis l'octet de poids faible ($b0000\,0000$) dans l'adresse la plus haute
- C'est le format Big Endian
- On aurait pu faire le contraire

Définition préalable du format

- Un entier naturel : 2 octets et un format
- Si on se trompe de format $2^{15} = 32768$ devient $2^7 = 128$
- Chaque processeur sa convention

  (Intel :Little Endian, Motorola,SUN :Big Endian)

Comment enregistrer la mémoire sur le disque ?

C'est simple, BIT à BIT, non ?

Format binaire brut

- Ecriture de la mémoire telle quelle sur le disque (BIT à BIT)
- Rapide, simple et économe
- Exemple en C : le fonction `write`

Inconvénients majeurs

- Ne peut être relu QUE sur une machine du même type[3]
- Souvent uniquement par le même programme

[3] La convention BigEndian/LittleEndian doit par exemple rester inchangée

Exemple de format binaire simple bien connu

`*.EXE,*.DLL` sous `Windows`™

Les fichiers exécutables

- Ils doivent être transcrits tel quels en mémoire
- Pour y être exécutés
- Ils contiennent des codes d'iunstructions du microprocesseur

Corrolaire

- Ne sont lisible que sur le type de machine qui l'a écrit
- Souvent avec le même système d'exploitation uniquement

Lorsque la simple copie de mémoire ne suffit plus

Il faut complexifier les formats binaires

Stocher des documents complexes

Nécessité de stocker des informations de structure en plus des copies mémoire

Exemples de formats binaires complexes

- Fichiers Microsoft Office (avant 2007) : `*.DOC`...
- Format HDF (Hierarchical Data File)
- Format Origin...

Inconvénients majeurs

- Formats propriétaires, structure inconnue
- Interopérabilité nulle
- Sauf quand le format est publié (HDF)

Le code ASCII

American Standard Code for Information Interchange

Un code standard pour coder les caractères

- Standardisé dans les années 60
- Un octet = un caractères

Caractères de contrôle 0 à 31

- 7 : beep
- 10 : Line Feed
- 13 : Carriage Return

Exemples

- 48 à 57 : les chiffres
- 65 à 90 : les majuscules
- 97 à 122 : les minuscules[4]

[4] Entre `A` et `a` : modification du BIT 6

Code ASCII... encore un problème de format

Pour aller à la ligne avec une *vieille* machine à écrire

- Retour charriot — CR
- Descente d'une ligne — LF

Codage du retour à la ligne

- `Windows`^{TM} : CR+LF
- MacOS : CR
- Unix/Linux : LF

Conversion de format texte entre plateforme

- Soit faite par le logiciel de transfert — *e.g.* `ftp` en mode texte
- Soit à faire a posteriori

Notion d'encodage

Codage des accents et autres cédilles

Le code ASCII définit 7 bits de 0 à 127

- Les codes de 128 à 255 sont disponibles
- Il faut en définir le format
- C'est l'encodage

Format d'encodage

- Les formats d'encodage sont très variables
- D'une plateforme à une autre
- D'un pays à un autre
- Peu de normalisation...
- *e.g.* UTF-8, Latin1 (ISO 8859-1)...

Formats ASCII simples

LA solution à l'interopérabilité

Utilisation du codage ASCII de préférence sans encodage

- Interopérabilité maximum
- Lisible par la plupart des ordinateurs et logiciels
- *e.g.* : stockage des nombres par leur écriture décimale

Utilisation très répandue

- Tous les fichiers de configuration de Linux
- Format Comma[5]Separated Value
- Et bien d'autres...

Un inconvénient

- Taille des fichiers beaucoup plus importante qu'en binaire
- Solution : la compression

[5] La *Comma* du format est une virgule qui peut être remplacée par autre

Les formats ASCII complexes

Des formats simples qui se sont complexifiés peu à peu

Des formats polyvalents

- Interopérabilité des formats ASCII
- Flexibilité des formats complexes
- Permettent de décrire à peu près tout
- Normalisation des formats complexes : la norme XML
- Formats très répandus

Exemples de formats ASCII complexes

Formats répondant à la norme XML

- HTML — Protocole WWW
- Open Document[1] — OpenOffice `*.odt,*.ods...`
- OpenXML[1] — MS Office `*.docx,*.xlsx...`
- ...

Autres formats ASCII complexes

- LaTeX
- PostScript, PortableDocumentFormat
- ...

[1] Si vous tentez d'ouvrir ces fichiers avec un éditeur de texte simple, vous aurez l'impression que c'est un format binaire. Il s'agit cependant d'une simple compression (ZIP) de fichiers ASCII.

Caractéristiques d'une image numérique

Une image analogique échantillonnée — Pas toujours

- Ensemble fini de points
- Echantillonage 2D : un pas en x, un autre en y
- Un codage de couleur en chaque point

Caractéristiques d'une image numérique

- Sa résolution, éventuellement différente en x et y

  $$\text{Resolution} = \frac{\text{Nombre de points}}{\text{Taille}}$$

- Sa profondeur de couleur

  Nombre de BITs utilisés pour le codage des couleurs

Prenons un exemple

Prise de vue avec un appareil numérique conventionnel 5Mpixels

Caractéritiques de l'image

- Nombre de points : $1944 * 2592 = 5\,038\,848$
- Profondeur de couleur : $3 * 8 = 24$ BITs

  256 niveaux pour chaque couleur primaire

  soit $2^{24} = 16\,777\,216$ couleurs
- Mémoire totale utilisée :

  $3 * 5\,038\,848 = 15\,116\,544$ octets $\approx$15Mo.

Sa résolution dépend de la taille physique souhaitée *e.g.* 30*40cm

$$\frac{1944}{30} = 64,8 \approx \frac{2592}{40} = 64,9 \text{points/cm} \approx 165 \text{DotPerInch}$$

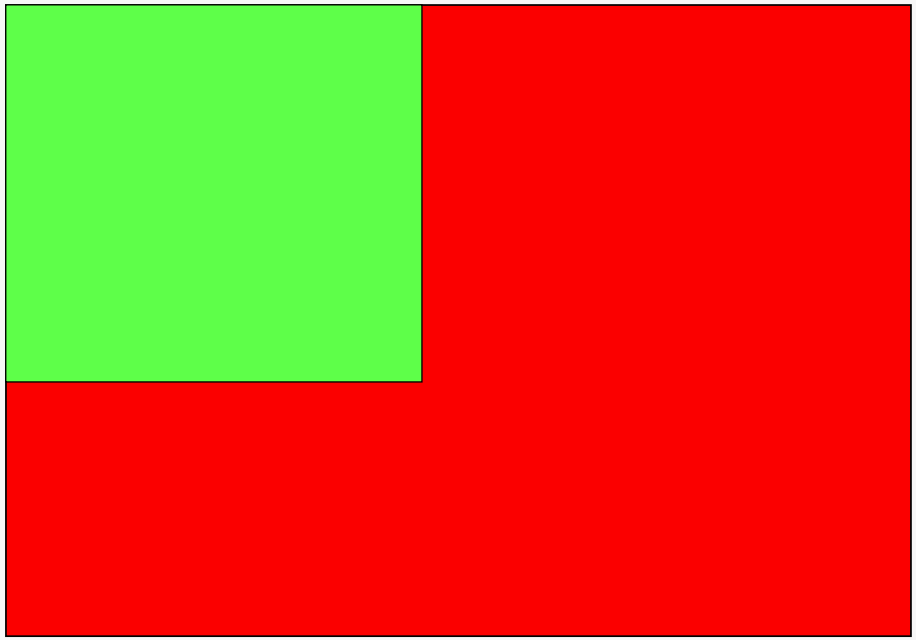
Format BitMap *vs.* format vectoriel

Codage BitMap

1	1	1	0	0	0
1	1	1	0	0	0
1	1	1	0	0	0
0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0

Codage vectoriel

- Un carré rouge (x_1, y_1)
- Un carré vert (x_2, y_2)



Les formats vectoriels

Pour la description des figures géométriques

Avantages

- Très faible encombrement mémoire
- Description indépendante de la résolution
- Résolution virtuellement infinie

Inconvénients

- IL n'y en a pas pour les objets géométriques

  A part (peut être) le manque d'outils populaires pour les manipuler[6]
- Encombrement mémoire énorme pour une image échantillonée

  Sauf ci celle-ci est considérée comme un objet BitMap

[6] Citons `Inkscape`, excellent logiciel libre qui manipule la plupart des formats vectoriels

Formats combinés

Insertion d'une BitMap dans un format vectoriel

La plupart des formats vecoriels permettent d'insérer des objets BitMap en tant qu'objets vecoriels

Fig.: Insertion d'une image BitMap dans cette présentation vectorielle

En pratique

Choix d'un format BitMap

- Photos
- Images analogiques numérisées

Taille du fichier

- Enorme
- Recours à la compression

Formats utilisés

- Graphics Interchange Format
- Joint Photographic Experts Group
- Portable Network Graphics
- Tagged Image File Format

Choix d'un format vectoriel

- Diagrammes
- Schémas
- Images géométriques

Taille du fichier

Tout petit

Formats utilisés

- PostScript
- Portable Document Format
- Scalable Vector Graphics
- Windows Meta File
- Enhanced Meta File

Formats comprimés sans perte PNG,GIF...

Principe : élimination de la redondance

$$\begin{matrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix} \Rightarrow \begin{matrix} 3 & 1 & 3 & 0 \\ 3 & & & \\ 6 & 0 & & \\ 3 & & & \end{matrix}$$

Même principe que la compression ZIP standard

- Fonctionne très mal avec des photos
- A réserver aux images géométriques que l'on ne peut avoir en format vectoriel

Formats comprimés avec perte

Prise en compte des performances limitées de l'œil humain

Les performances de l'œil – et du cerveau – humain

- Vision Noir & Blanc détaillée et périphériques
- Gestion des couleurs centrale et peu résolue

Conséquences pour le codage des images

- La luminance doit être bien résolue
- Les couleurs – la chrominance – peuvent l'être moins

Et donc. . . le codage JPEG

- Décomposition Luminance-Chrominance
- Transformée de Fourier spatiale 2D
- Suppression des hautes fréquences spatiales invisibles
- Compression jusqu'à un facteur 25 sans perte apparente de qualité

JPEG : attention aux schémas et graphiques

Les codages avec perte sont conçus pour coder les images analogiques numérisées

Ça bave...

- Schémas et graphiques : hautes fréquences spatiales
- Codage JPEG adapté aux image analogiques numérisées
- Résultat peu convaincant...

Les formats vidéo

MPEG

Du fait de l'énorme taille des fichiers, les formats vidéo sont des formats de codage

Codage JPEG image par image

Norme MJPEG. . . abandonnée

Exploitation de la redondance temporelle

- On ne code que les changements
- MPEG 1/2 ou 4
- Trois normes qui diffèrent par le taux de compression

Utilisation

- MPEG 1 : abandonnée
- MPEG 2 : DVD / TNT Gratuite
- MPEG 4 : TNT payante / télévision sur IP

Partie II

Résolution numérique des systèmes linéaires

II Résolution numérique des systèmes linéaires

Résoudre des systèmes linéaires, pourquoi ?

Et pourquoi faire un cours là-dessus, vous l'avez appris au lycée !

On en trouve partout

- Physique, Chimie, Mécanique...
- Généralement issus de la résolution des Équations Différentielles (ED)

Pas si faciles à résoudre

- Pour les systèmes linéaires simples : substitution, addition...
- Les ED génèrent de grands systèmes : 1000 inconnues ou plus
- Nécessité d'une méthode systématique programmable

Méthodes systématiques de résolution

Deux grandes classes

Les méthode directes

- Le pivot de Gauss en est le meilleur représentant
- Elles donnent un résultat exact aux erreurs d'arrondi près

Les méthode indirectes

- Ce sont des méthodes itératives
- On construit une suite convergent vers la solution
- La solution trouvée est toujours approchée

La méthode du Pivot de Gauss

C'est la méthode reine, toutes les autres en découle

Principe

- Objectif : transformer un système linéaire en un système du type $Rx = c$
- avec R triangulaire supérieure

$$R = \begin{pmatrix} r_{11} & \cdots & r_{1n} \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & & r_{nn} \end{pmatrix}$$

La solution d'un système triangulaire est directe

- Par substitution à partir de la dernière ligne
- On peut le résoudre formellement

$$\forall i \ : \ r_{ii} \neq 0 \Rightarrow x_i = \frac{1}{r_{ii}} \left(c_i - \sum_{k=i+1}^{n} r_{ik} x_k \right)$$

Description formelle de la méthode du pivot de Gauss

Système à résoudre $Ax = b$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Pour mettre des 0 sur la première colonne de la ligne k

- Si L_1 est la première ligne
- Soustraire $\frac{a_{k1}}{a_{11}} L_1$ à la ligne k
- a_{11} est appelé le pivot

Après la première étape

Un nouveau système à résoudre $A'x = b'$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a'_{22} & \cdots & a'_{1n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a'_{n2} & \cdots & a'_{nn} \end{pmatrix} \qquad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b'_2 \\ \vdots \\ b'_n \end{pmatrix}$$

Et on recommence sur la sous matrice. . .

Quelques remarques. . .

- La première ligne est inchangée
- le second membre b doit subir les même modifications
- Ceci n'est possible que si tous les a_{ii} sont non nuls

Choix du pivot

Que faire si le pivot est nul ou trop petit ?

$Ax = b$

Si le pivot est nul

- Une permutation de lignes ou de colonnes résout le problème
- Lignes permutées ? Éléments de b aussi !
- Colonnes permutées ? x doit l'être aussi !

Un pivot trop petit ?

Un pivot trop petit induit des erreurs d'arrondi

L'ordinateur n'aime pas diviser par de petits nombres

- Si δ est connu à ε près, comme dans tout ordinateur
- Comparez l'erreur relative obtenue sur le calcul de $1/\delta$
  - Pour $\delta = 2\varepsilon$
  - Pour $\delta = 10^6\varepsilon$

Un bon pivot doit être grand . . . voire le plus grand possible

- Méthode du pivot partiel : permuter les lignes pour obtenir le plus grand pivot
- Méthode du pivot total : permuter lignes et colonnes

Et si, malgré tout le pivot est nul

De l'inconvénient d'avoir un petit pivot

Tous les pivots possibles sont nuls

- A un pas de la méthode, impossibilité de trouver un pivot non nuls
- Cela signifie qu'une des inconnues a toujours un coefficient nul
- Le système n'est pas solvable : il est dit singulier
- Il possède une infinité de solution ou pas du tout

Si le pivot est trop petit

- Le système est sûrement mal conditionné (presque singulier)
- On en parle à la fin de cette partie

Algorithme du Pivot de Gauss

$Ax = b$

Résumé

1. Déterminer (r, s) tel que $|a_{rs}| = \max_{i,j} |a_{i,j}|$
2. Si $|a_{rs}| = 0$ alors STOP, le système est singulier
3. Sinon échanger lignes (et colonnes) pour obtenir le système $\overline{A}\overline{x} = \overline{b}$
4. Pour $i > 1$:
   - Si L_1 est la première ligne
   - Soustraire $\frac{\overline{a_{i1}}}{\overline{a_{11}}} * L1$ à la ligne i
   - Pour obtenir le nouveau système $A' * x' = b'$
5. Recommencer en (1) avec la sous-matrice A' de A privée des premières ligne et colonne

Notations matricielles des permutations

Permutation des lignes i et j $\quad \overline{A} = \mathcal{P}_{ij} * A$

$$\mathcal{P}_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & 0 & \cdots & 1 & \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & \\ & & 1 & \cdots & 0 & \\ & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

- Matrice identité dont les éléments (i,i) et (j,j) sont permutés avec (i,j) et (j,i)
- Multiplication à gauche : permutation des lignes
- A droite : permutation des colonnes
- Remarque : ${\mathcal{P}_{ij}}^{-1} = \mathcal{P}_{ij}$

Notation matricielle de l'opération Pivot

Comment mettre des 0 dans une colonnes à l'aide d'un produit matriciel

Soustraire Soustraire $\frac{\overline{a_{i1}}}{\overline{a_{11}}} * L1$ à la ligne i $\quad A' = \mathcal{G}\overline{A}$

$$\mathcal{G} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ -\frac{\overline{a_{21}}}{\overline{a_{11}}} & 1 & \ddots & & & \vdots \\ -\frac{\overline{a_{31}}}{\overline{a_{11}}} & 0 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & 1 & 0 \\ -\frac{\overline{a_{n1}}}{\overline{a_{11}}} & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Remarque sur l'inverse de $\mathcal{G}$

Il est facile à trouver[7]

$$\mathcal{G}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ +\frac{\overline{a_{21}}}{\overline{a_{11}}} & 1 & \ddots & & & \vdots \\ +\frac{\overline{a_{31}}}{\overline{a_{11}}} & 0 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & 1 & 0 \\ +\frac{\overline{a_{n1}}}{\overline{a_{11}}} & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

[7] Chercher une démonstration sans calcul

Notation matricielle de la méthode de Gauss

Chaque étape conduit à produire des 0 sur la colonne suivante

- $A \longrightarrow A^{[1]} \longrightarrow A^{[2]} \longrightarrow \cdots \longrightarrow A^{[j]} \longrightarrow \cdots \longrightarrow R$
- $b \longrightarrow b^{[1]} \longrightarrow b^{[2]} \longrightarrow \cdots \longrightarrow b^{[j]} \longrightarrow \cdots \longrightarrow c$

Forme de $A^{[j]}$

$$A^{[j]} = \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} * & \cdots & * \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & & * \end{bmatrix}_{(jj)} & & * \\ & 0 & * \end{pmatrix}$$

avec $A^{[j]} = \mathcal{G}^{[j]}\mathcal{P}^{[j]}A^{[j-1]}$ et $b^{[j]} = \mathcal{G}^{[j]}\mathcal{P}^{[j]}b^{[j-1]}$

Expression matricielle de la matrice triangulaire R

Rappel

- $A^{[j]} = \mathcal{G}^{[j]}\mathcal{P}^{[j]}A^{[j-1]}$
- $b^{[j]} = \mathcal{G}^{[j]}\mathcal{P}^{[j]}b^{[j-1]}$

On en déduit

- $R = \left(\prod_{k=n-1}^{1} \mathcal{G}^{[k]}\mathcal{P}^{[k]}\right) A$
- $c = \left(\prod_{k=n-1}^{1} \mathcal{G}^{[k]}\mathcal{P}^{[k]}\right) b$

Décomposition[8] L.R : produit de deux matrices triangulaires

Dans le cas particulier où aucune permutation n'est requise

Si aucune permutation n'est nécessaire

- Si $\forall k, \mathcal{P}^{[k]} = I$ alors $R = \left(\prod_{k=n-1}^{1} \mathcal{G}^{[k]} \right) A$
- Donc $A = \underbrace{\left(\prod_{1}^{k=n-1} \mathcal{G}^{[k]^{-1}} \right)}_{\text{Triangulaire inférieure}} \times R = L.R$

[7] On parle aussi de décomposition L.U. (Lower.Upper)

Décomposition LR dans le cas général

La permutation de A est parfois nécessaire

- Pour éviter les pivots non nuls
- Mais aussi pour choisir les meilleurs pivots

Décomposition LR conventionnelle

- $A = \mathcal{P}LR$ où $\mathcal{P}$ est une matrice de permutation

De l'utilité de la décomposition LR

Résolution de systèmes linéaires pour divers seconds membres

- Supposons $A = \mathcal{P}LR$
- A résoudre : $Ax = b_i$ pour divers i
- $\mathcal{P}L(Rx) = b_i$
- $\begin{cases} Rx = y \\ \mathcal{P}Ly = b_i \end{cases}$
- Ce sont deux systèmes triangulaires[9] simples à résoudre
- Utiliser la décomposition LR formellement revient à utiliser la méthode de Gauss

Autres utilisations

- Inversion matricielle
- Calcul de déterminant

[9] Le deuxième système est triangulaire à une permutation près, ce qui ne change pas la complexité de sa résolution.

De la supériorité numérique de la méthode de Gauss

Tous les logiciels de calcul utilisent la méthode de Gauss pour le calcul de déterminant, l'inversion...

Pivot de Gauss ou calcul de l'inverse ?

- $Ax = b$ pourrait se résoudre par le calcul de l'inverse : $x = A^{-1}b$
- Le calcul de l'inverse pourrait être fait par une autre méthode[10]
- La méthode du Pivot est la plus rapide (complexité en $n^3/2$)

[10] *e.g.* en utilisant $A \times {}^t comm A = \det A \times I$

Élimination de Gauss-Jordan

Une autre présentation de la méthode de Gauss

Résolution d'un système $Ax = b$

$$([A]\,[b]) \Rightarrow \left(\begin{bmatrix} * & \cdots & \cdots & * \\ 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & * \end{bmatrix} [c] \right) \Rightarrow \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix} [x] \right)$$

Système triangulaire résolu à l'aide du Pivot de Gauss (inversé)

Remarque sur le Pivot Total

- Si le Pivot Total est utilisé, la permutation des colonnes permute le vecteur solution $[x]$
- La *remontée* ne peut faire l'objet de recherche de pivot

Élimination de Gauss-Jordan

Application au calcul de l'inverse matriciel

Déterminer l'inverse de A, c'est résoudre des systèmes

- Chaque colonne de l'inverse est solution d'un système :
  - dont la matrice est A
  - le second membre est un vecteur de base
- Proposition : les résoudre tous en même temps

Le calcul de l'inverse le plus rapide qui soit

$$\left([A] \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \Longrightarrow \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \left[A^{-1}\right] \right)$$

Un système mal conditionné ?

Prenons un exemple

Système A

$$\begin{cases} x_1 - x_2 = 1 \\ 1,002x_1 - x_2 = 1 \end{cases}$$

Système B

$$\begin{cases} x_1 - x_2 = 1,001 \\ 1,002x_1 - x_2 = 1 \end{cases}$$

Solution

$$\begin{cases} x_1 = 0 \\ x_2 = -1 \end{cases}$$

Solution

$$\begin{cases} x_1 = 0,5 \\ x_2 = -0,5 \end{cases}$$

Deux systèmes quasi identiques

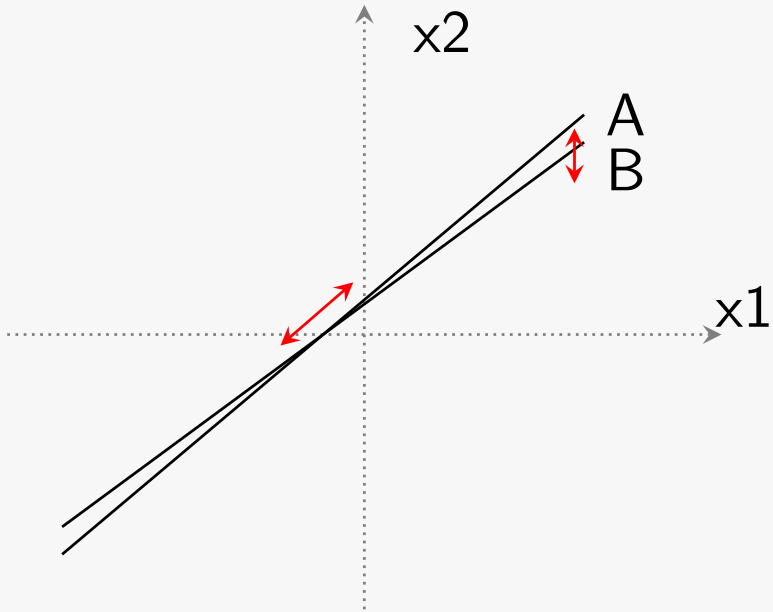
- Ils ne diffèrent que de $0,1\%$
- Leurs solutions sont très différentes
- Ils sont dits mal conditionnés

Systèmes mal conditionnés

Interprétation graphique pour un système à 2 inconnues

Droites quasi-parallèles

Une variation infime de l'ordonnée à l'origine ou de la pente modifie le point d'intersection substantiellement



De l'importance du conditionnement d'un système linéaire

Sources d'erreur

- Analyse numérique toujours faite par ordinateur
- Le stockage en mémoire crée des erreurs d'arrondi

Si je résous un système mal conditionné

- Les coefficients sont entachés d'erreurs
- Le résultat n'a aucune signification

Définition quantitative du conditionnement

En anglais, le *Condition Number*

Conditionnement de $Ax = b$

$$\mathrm{cond}\,(A) = \|A\|.\|A^{-1}\|$$

Cette définition est valide quelle que soit la norme matricielle choisie

Erreur sur le second membre

$$\frac{\|\triangle x\|}{\|x\|} \leq \mathrm{cond}\,(A)\,\frac{\|\triangle b\|}{\|b\|}$$

Erreur sur la matrice

$$\frac{\|\triangle x\|}{\|x+\triangle x\|} \leq \mathrm{cond}\,(A)\,\frac{\|\triangle A\|}{\|A\|}$$

Un bon conditionnement est petit

Un système mal conditionné est un problème mal posé

Quand le système n'est pas inversible

- Un système non inversible est un système qui n'a pas de solution (ou une infinité)
- Chercher une solution à ce système n'a pas de sens

Quand il est mal conditionné

- Système non inversible + erreurs ?
  - Chercher une solution n'a pas de sens
- Problème mal posé
  - Ne demande qu'à devenir non inversible

Premier réflexe : reconsidérer le problème posé

Ne suis je pas en train de chercher à résoudre un problème qui n'a pas de solution ?

Méthode de résolution d'un système mal conditionné

Méthode de résolution d'un problème mal posé... donc faillible

$Ax = b$

Idée : considérer que la solution du système n'est qu'approchée

- x^* solution approchée de $Ax = b$
- x^* n'est pas solution donc $Ax^* = b^*$
- Par différence : $A(x - x^*) = (b - b^*)$
- On retrouve le même système[a] : $A \triangle x = \triangle b$
- Dont la solution approchée est $\triangle x^*$

[a] Seul le second membre variant, penser à la décomposition LR

Solution obtenue en itérant le processus

$$x^* + \triangle x^* + \triangle\triangle x^* + \triangle\triangle\triangle x^* + \ldots$$

Le pré-conditionnement

Une attitude alternative face à un mauvais conditionnement

Définition

P est appelé *pré-conditionneur* de A si $\mathrm{cond}\left(P^{-1}A\right) < \mathrm{cond}\left(A\right)$

Principe

- Résoudre $\left(P^{-1}A\right)x = \left(P^{-1}b\right)$ au lieu de $Ax = b$

Détermination de P

- P n'est en général pas calculée directement
- Elle est souvent issue d'un algorithme dérivé de la méthode de Gauss

Utilisation de pré-conditionnement

- En général peu d'intérêt pour les méthodes directes
- Peut présenter un intérêt pour les méthodes itératives

Pourquoi résoudre des systèmes linéaires ?

Résolution Numérique des Équations Différentielles

- De grands systèmes : autant d'inconnues que de points de discrétisation
- Des systèmes dits creux[11] : avec beaucoup de 0

Problèmes posés :

- Grands systèmes : beaucoup de mémoire utilisée
- Temps de calcul important
- parfois impraticable même sur les ordinateurs actuels

Solution proposée : ne pas stocker les 0

- Il faut utiliser des algorithmes de calcul qui travaillent avec des matrices creuses
- Ce n'est pas le cas du Pivot de Gauss

[11] *Creux* en anglais : *sparse*

Comment conserver des systèmes creux ?

Les matrices creuses

- Elles sont issues de relations différentielles
- Qui impliquent en général les points voisins
- Les éléments non nuls sont donc proches de la diagonale
- On parle de matrices multidiagonales

Proposition de méthode itérative

- Construction d'une suite n'impliquant que des matrices creuses
- Définie par une relation de récurrence
- Son point fixe est la solution du système
- La suite converge vers la solution[12]

[12] Une suite définie par une relation de récurrence ne peut que converger vers son point fixe, si elle converge

Méthodes itératives : des suites vectorielles

Avantages et inconvénients

Avantages des méthodes itératives

- Limiter les besoins en mémoire vive
- Et donc limiter le temps de calcul

Inconvénients

- Convergence en général assez lente
- Solution nécessairement approchée

Quel type de méthode choisir ?

- Pour les petits systèmes (creux ou denses) : Gauss
- Pour les grands systèmes creux : méthode itératives
- Pour les grands systèmes denses : Gauss (mais ce sera difficile)

Construction de la suite vectorielle $Ax = b$

Une matrice arbitraire B permet de faire apparaître la solution x comme point fixe

Introduction d'une matrice arbitraire B

$$Ax = b \quad \Leftrightarrow \quad Bx + (A - B)x = b$$

Construction de la suite vectorielle

- $Bx_{i+1} + (A - B)\, x_i = b$
- $x_{i+1} = x_i - B^{-1}(Ax_i - b)$
- $x_{i+1} = \left(I - B^{-1}A\right) x_i + B^{-1}b$
- $x_{i+1} = Mx_i + p$

Jacobi, Gauss-Seidel... Le choix d'un pré-conditionnement

- Le choix de B correspond au choix d'une méthode
- La vitesse de convergence en dépendra

Convergence, valeurs propres et choix de B

Convergence de la suite $x_{i+1} = Mx_i + p$

- Elle converge[13] si $\rho(M) < 1$
- $\rho(M)$ est le rayon spectral de M
- $\rho(M) = \max_i |\lambda_i|$, si les λ_i sont les valeurs propres de M

Le choix de B est donc guidé par

- $\rho\left(I - B^{-1}A\right) < 1$ et le plus petit possible
- $Bx_{i+1} + (A - B)\, x_i = b$ aisément inversible

[13] Une démonstration élémentaire de cette propriété pour la suite $x_{i+1} = Mx_i$ peut être faite en se plaçant dans la base des vecteurs propres.

Quelques matrices auxiliaires

$Ax = b$

Décomposition de A en matrice diagonale (D) et deux matrices triangulaires (E et F)

$$A = D - E - F$$

$$D = \begin{pmatrix} a_{11} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_{nn} \end{pmatrix}$$

$$E = -\begin{pmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ a_{21} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} L = D^{-1}E \\ U = D^{-1}F \\ J = L + U \\ H = (I - L)^{-1}U \end{cases}$$

$$F = -\begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & a_{n-1,n} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

Méthode de Jacobi

Aussi connue sous le nom de *méthode du pas total*

$B = D$

$B = D$ $\quad M = \left(I - B^{-1}A\right) = J$

$$x^{[i+1]} = Mx^{[i]} + B^{-1}b$$

$$x_j^{[i+1]} = \frac{1}{a_{jj}}\left(b_j - \sum_{k \neq j} a_{jk} x_k{}^{[i]}\right)$$

Méthode de Gauss-Seidel

Aussi connue sous le nom de *méthode du pas unique*

$B = D - E$ $\qquad M = \left(I - B^{-1}A\right) = (I - L)^{-1}U = H$

$$x^{[i+1]} = Mx^{[i]} + B^{-1}b$$

B étant triangulaire, la détermination de M se fait par résolution d'un système triangulaire[14]

$$\forall i, \sum_{k<j} a_{jk} x_k{}^{[i+1]} + a_{jj} x_j{}^{[i+1]} + \sum_{k>j} a_{jk} x_k{}^{[i]} = b_j$$

[14] On rappelle qu'en analyse numérique, il est absolument proscrit de calculer un inverse autrement que par la méthode de Gauss ou via une méthode itérative. Dans ce cas ci, l'application de la formule pour i croissant à partir de 1 suffit.

Relaxation de Gauss Seidel

Généralisation de la méthode de Gauss-Seidel

Paramètre de relaxation : $\omega \in \mathbb{R}$

$$B(\omega) = \frac{1}{\omega} D(I - \omega L)$$

- $\omega = 1$:Gauss-Seidel
- $\omega < 1$: sous-relaxation
- $\omega > 1$: sur-relaxation
- Le choix de ω est un point difficile hors du périmètre de ce cours
- Permet cependant d'ajuster le rayon spectral

Partie III

Optimisation et systèmes non linéaires

III Optimisation et systèmes non linéaires

Équivalence entre Résolution et Optimisation

Optimisation

- L'optimisation est la détermination du paramètre qui permet de maximiser ou de minimiser une fonction
- Se traduit par l'annulation de dérivée : $f\left(x\right)_{\min}^{\max} \Leftrightarrow f'\left(x\right) = 0$
- Ou de gradient : $f\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}_{\min}^{\max} \Rightarrow \forall i, \frac{\partial f}{\partial x_i} = 0$

Équivalence

- Équivalence entre résolution et optimisation
- Moyennant une dérivée

Problèmes des dimensions de l'espace d'arrivée

$f : \mathcal{E} \mapsto \mathcal{F}$ avec $\mathcal{E} = \mathbb{R}^n$ et $\mathcal{F} = \mathbb{R}^m$

Fonctions à valeurs réelles $\mathcal{F} = \mathbb{R}$

- Peut être optimisée
- Peut servir dans une résolution
- Quelle que soit la dimension n de l'espace de départ

Fonctions à valeurs vectorielles $m > 1$

- Ne peut pas être optimisée : $\mathbb{R}^m$ n'est pas muni d'une relation d'ordre
- Peut servir dans une résolution : correspond alors à m problèmes réels

Méthodes itératives : construction $f(x) = 0$

Principe

- Construction d'une suite convergent vers la solution
- Définie par une relation de récurrence $\Phi : \mathcal{E} \mapsto \mathcal{E}$
- Point fixe ξ solution : $\Phi(\xi) = \xi \Leftrightarrow f(\xi) = 0$

Construction de Φ

- Elle peut être évidente
  - A résoudre $x = \cos(x) \Rightarrow f(x) = x - \cos(x)$
  - $\Phi = \cos$
- Si elle n'est pas évidente
  - Un développement limité peut aider

La méthode de Newton

Une construction de Φ sur la base d'un développement limité

Développement de $f(x) = 0$

- Soit x : $f(x) = 0$
- ξ au voisinage de x
- $f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(x-\xi)^n}{n!} f^{(n)}(\xi)$

$f(x) = 0$ — Troncature ordre 1 ou 2

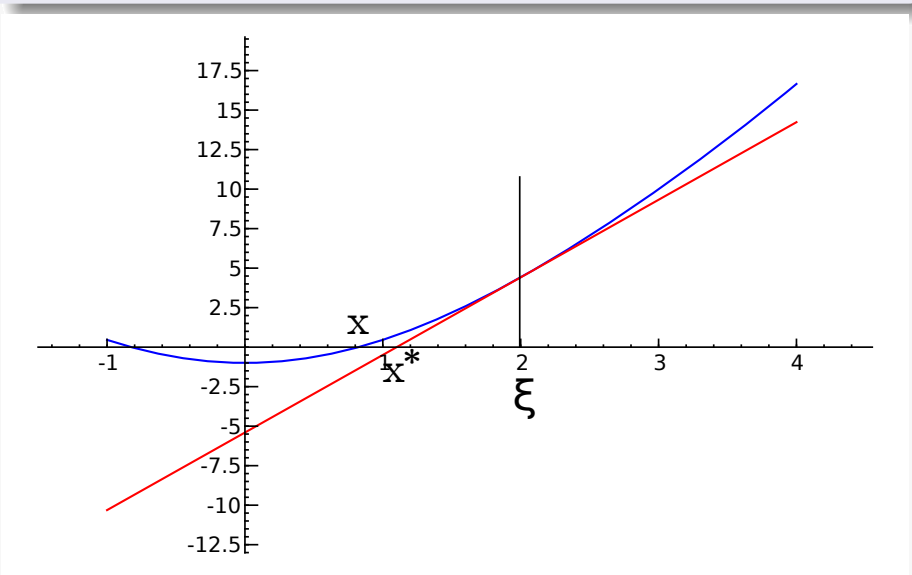
- $x^* = \xi - \frac{f(\xi)}{f'(\xi)}$ $\qquad$ $x^* = \xi - \frac{f'(\xi) \pm \sqrt{f'(\xi)^2 - 2f(\xi)f''(\xi)}}{f''(\xi)}$
- ξ donné, x^* approche x à l'ordre idoine
- x^* peut servir de nouveau ξ : Φ naturellement définie

La méthode de Newton

Formulation formelle et interprétation graphique

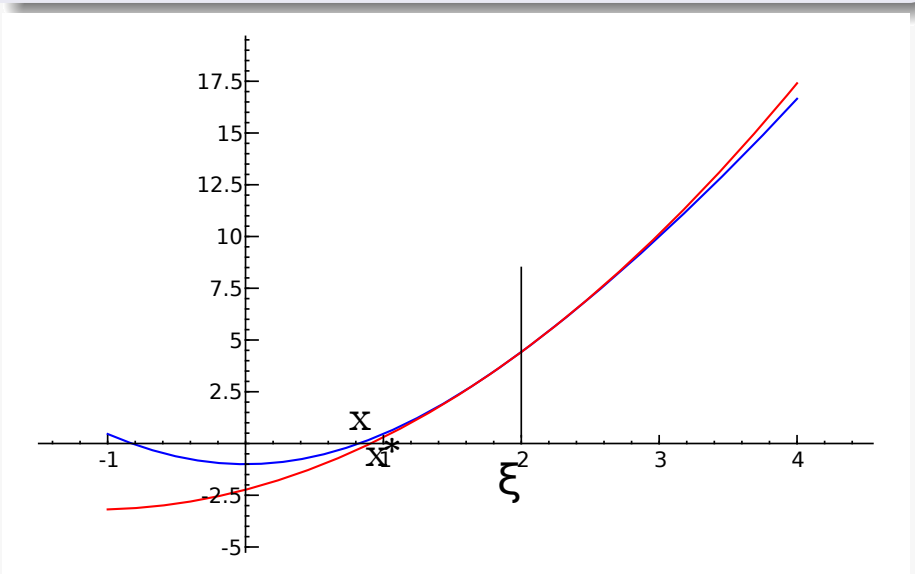
Relation de récurrence ordre 1

$$\Phi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$



Relation de récurrence ordre 2

$$\Phi(x) = x - \frac{f'(x) \pm \sqrt{f'(x)^2 - 2f(x)f''(x)}}{f''(x)}$$



Newton⇔Approximation par un polynôme

- f est approchée par un polynôme d'ordre N
- Une des racines est prise comme solution approchée

Méthode de la fausse position

Aussi connue sous le nom de *Regula falsi* ou méthode de la sécante

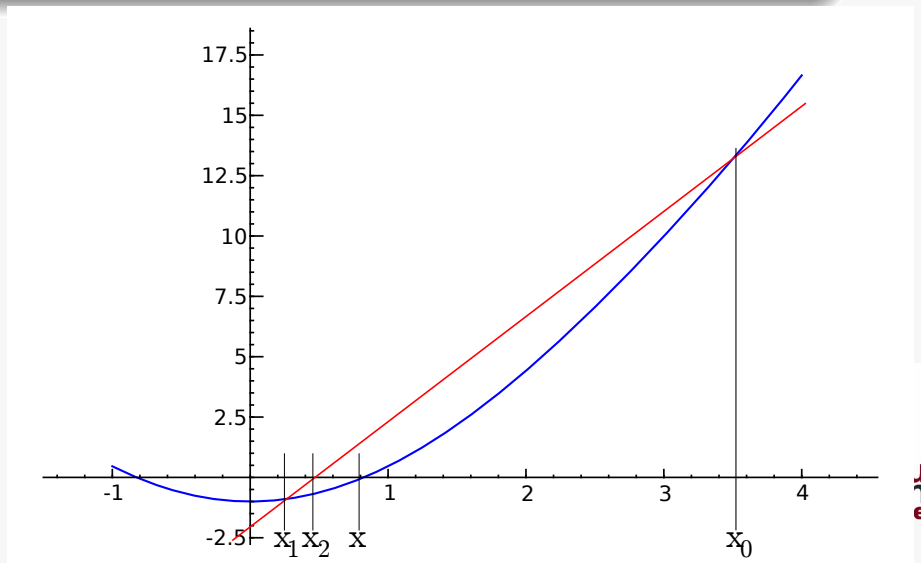
Principe

- Dérivée de la méthode Newton
- Quand la dérivée n'est pas calculable
- Approximation de la dérivée par une sécante
- $f'(x) = \lim_{x \to x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \Rightarrow f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$

Récurrence

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n) \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})}$$

Application aux ▸ équations différentielles



Méthode de Newton multidimensionnelle

Équation dans $\mathbb{R}^n$ $\quad f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$

$$f(x) = 0 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} f_1(x_1, \ldots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, \ldots, x_n) \end{pmatrix} = 0$$

Développement limité à l'ordre 1

$$f(x) \approx f(\xi) + D_\xi^f . (x - \xi)$$

La Jacobienne

$$D_x^f = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

La relation de récurrence

- Si D est inversible
- $\Phi(x) = x - \left(D_x^f\right)^{-1} f(x)$

Application aux ▸ Equations Différentielles

Optimisation dans $\mathbb{R}$

Recherche d'extrema dans $\mathbb{R}$

- Annulation de la dérivée
- Recherche de racine de la dérivée
- Méthodes de résolution

Exemples avec la méthode Newton

- ordre 1 : $\Phi(x) = x - \frac{f'(x)}{f''(x)}$
- ordre 2 : $\Phi(x) = x - \frac{f''(x) \pm \sqrt{f''(x)^2 - 2f'(x)f'''(x)}}{f'''(x)}$

Exemple dans $\mathbb{R}^2$

$f : \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}$

Le skieur minimise son altitude f

- Méthode de la plus grande pente
- $\Phi(x) = x - \mathrm{grad}_x(f)$

Plusieurs stratégies sont possibles

- Facteur correctif matriciel η
- $\Phi(x) = x - \eta.\mathrm{grad}_x(f)$
- Choix de η : choix de la méthode[15]

[15] Méthode de la plus grande pente : η constant

Choix de la méthode de descente

Inconvénient de la plus grande pente

La convergence peut être lente

Comment y remédier ?

- Par le choix correct du facteur correctif η
- Il existe beaucoup de propositions pour η
- Présentons quelques unes d'entre elles : :
  - La méthode de Newton et ses dérivées

Méthode de Newton

$\eta = H^{-1}$

Méthode dérivée du développement limité multidimensionnel à l'ordre 2

Relation de récurrence

$$\Phi(x) = x - \left(H_x^f\right)^{-1}.\mathrm{grad}_x(f)$$

La Hessienne

$$H_x^f = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}$$

Méthodes dérivées

- N'est pas sans rappeler la méthode dans $\mathbb{R}$
- D'autres méthodes consistent à approcher H
  - Remplacer H par sa diagonale pour mieux l'inverser
  - Remplacer H par $H + \lambda I$
    - intermédiaire entre Newton et plus grande pente
    - réglable par λ

Partie IV

Interpolation, dérivation et intégration

IV Interpolation, dérivation et intégration

L'interpolation

Pourquoi interpoler ?

- Obtenir une valeur approchée là où il n'y a pas de valeur exacte
- Dériver une fonction numérique
- Intégrer numériquement avec d'avantage de précision

Interpolation par les polynômes de Lagrange

Faire passer un polynôme de degré $n-1$ par n points

n points à interpoler

$$\forall i \in [1, n], (x_i, y_i)$$

Polynôme de degré $n-1$

$$p(x) = \sum_{i=1}^{n} y_i L_i(x)$$

Polynôme de Lagrange associé aux n points $\langle x_i \rangle$ $\langle L_i \rangle$

- Degré $n-1$
- $L_i(x_k) = \delta_{ik}$: 1 pour $i = k$, 0 sinon.

Expression du polynôme de Lagrange

- Annulation pour $i \neq k$
- Normalisation à 1

L_i

$$L_i(x) = \prod_{k=1, k\neq i}^{n} \frac{x - x_k}{x_i - x_k}$$

Autre formes d'interpolation polynômiale

Polynôme de Newton

- Même degré que le polynôme d'interpolation de Lagrange
- Passe par les même points
- C'est le même
- Juste une autre façon de calculer

Interpolation de Hermite

$$p(x) = \sum_{i=1}^{n} y_i H_i(x) + \sum_{i=1}^{n} y_i' \bar{H}_i(x)$$

- Les H_i interpollent y, les $\bar{H}_i$ interpolent y'
- n contraintes supplémentaires : degré $2n-1$
- $H_i(x) = (1 - 2(x - x_i)L_i'(x_i))\,[L_i(x)]^2$
- $\bar{H}_i(x) = [L_i(x)]^2\,(x - x_i)$

Principe de de l'interpolation par *splines*

L'interpolation par des règles de caoutchouc ou de contreplaqué

Principe

- Fonctions d'interpolation définie par morceaux
- Continument dérivable 2 fois

A interpoler $\forall i \in [1, n], (x_i, y_i)$

- n points, $n-1$ *splines* $s(x)$ à calculer
- $s(x) = a_i + b_i x + c_i x^2 + d_i x^3$
- $4(n-1)$ inconnues
- Interpolation par f, n contraintes : $\forall i \in [1, n], f(x_i) = y_i$
- Continuité de f,f' et f'' aux frontières des intervalles : $3 * (n-2)$ contraintes
- $3 * (n-2) + n = 4n - 6$: il en manque 2, à inventer

Fonction analytique ou fonction numérique ?

Deux grands classes de fonctions à distinguer

- Celles qui sont définies analytiquement
- Celles qui sont connues uniquement en certains points

Deux grandes classes de méthodes

Les méthode de dérivations et d'intégration numériques peuvent être différentes dans les deux cas.

Différences finies via le théorème de Taylor

L'application du développement limité au calcul de la dérivée

Théorème de Taylor ordre 1

$$f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h} + o(1)$$

Quelle valeur pour le pas h ?

- Pas trop petit
  - Division par zéro
  - Troncature numérique
- Pas trop grand
  - Troncature du DL

Estimation de l'erreur de troncature

- Deuxième terme du développement
- $\frac{h}{2} f''(x+\theta h) \ : \ 0 \leq \theta \leq 1$

Différences finies : les trois formules

Réduction de l'erreur de troncature

- $f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + o(h^2)$
- $f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + o(h^2)$
- $f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} + o(h)$

Les trois formules[16]

- A droite : $f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h} + o(1)$
- A gauche : $f'(x) = \frac{f(x)-f(x-h)}{h} + o(1)$
- Centrée : $f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} + o(h)$

[16] Il y en a d'autres : imaginez une formule en cinq points pour prendre en compte un terme de plus du DL.

Différences finies : pour aller plus loin

Dérivée première : un ordre de plus dans le DL

- Dérivée centrée avec deux pas différents (*e.g.* doubles)
- Différenciation pondérée
- ...

Dérivée seconde : une formule centrée ?

- Dérivée à droite
- Dérivée à gauche
- $f''(x) = \frac{f(x+h)+f(x-h)-2f(x)}{h^2} + o(1)$

Méthode des coefficients indéterminés

Ou comment produire des formules aux différences finies pour une approximation à un ordre arbitraire

Exemple au premier ordre coefficients inconnus : a_0, a_- et a_+

- Supposons une approximation de la dérivée
- $f'(x) \approx a_+ f(x+h) + a_0 f(x) + a_- f(x-h)$
- Supposons la relation vérifiée exactement lorsque f est un polynôme
- Trois inconnues, trois polynômes : 1,x et x^2
  - $a_0 = 0$
  - $a_+ = -a_- = \frac{1}{2h}$

Aller plus loin ?

- Plus d'inconnues
- Plus de polynômes

Cas d'une fonction connue seulement par ses valeurs en certains points

Si c'est une fonction issue d'un calcul

- Lorsque les points d'échantillonnage sont équidistants : méthodes précédentes applicables
- Sinon : il faut avoir recours à l'interpolation

Si ce sont des données expérimentales

- Nécessairement irrégulièrement espacées
- Incertitude sur l'abscisse
- Grosses erreurs sur la dérivée
- Seule méthode possible : dérivation d'une fonction construite
  - Par interpolation
  - Par approximation

Deux grandes classes de méthodes

On cherche à intégrer numériquement f sur l'intervalle $[a, b]$

Les méthodes de Newton-Cotes

- Choix à priori d'un pas fixe h : $nh = (b - a)$
- Interpolation polynomiale
- Intégration du polynôme

L'intégration de Gauss

- Échantillonnage variable
- Algorithme plus performant mais plus complexe

Newton-Cotes : interpolation polynômiale à pas fixe

Pas $h = (b-a)/n, x_i = a + ih$

Intégration et interpolation polynômiale

- Interpolation polynomiale par les $n+1$ points
- Intégration du polynôme

Calcul faisable une fois pour toute : *les nombres de Cotes*

$$\int_a^b f \approx \sum_{i=0}^{n} hAW_i f(x_i)$$

n	A	W_0	W_1	W_2	W_3	W_4
0	1	1				
1	1/2	1	1			
2	1/3	1	4	1		
3	3/8	1	3	3	1	
4	2/45	7	32	21	32	7

Inconvénient quand n croît

Comportement oscillatoire d'un polynôme de degré élevé

Méthodes composées

Pour augmenter la précision de Newton-Cotes

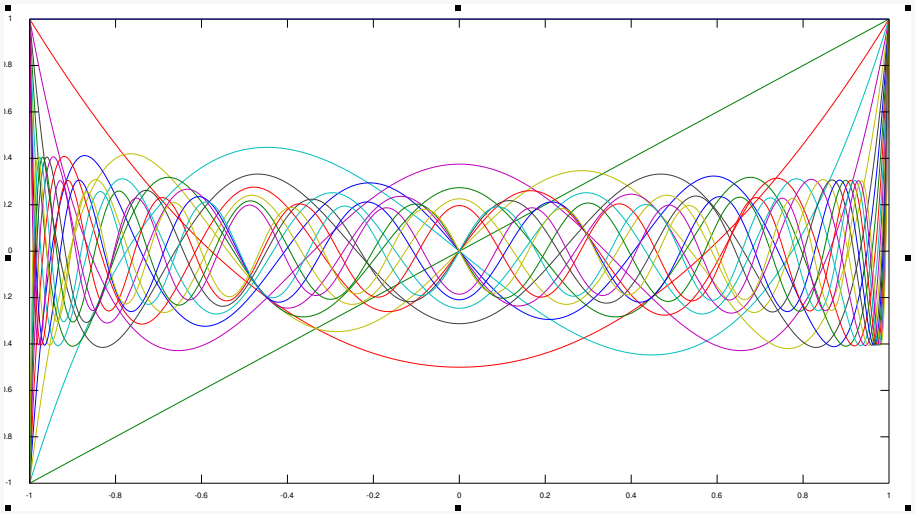
Découpage du domaine en sous-intervalles

- n intervalles
- n interpolation d'ordre 0 : méthode des rectangles
- $n-1$ interpolations d'ordre 1 : méthode des trapèzes
- $2/n$ interpolations d'ordre 2 : méthode de Simpson
- ... Simpson (ordre 3) et Villarceau (ordre 4)

Prélude : polynômes de Legendre

Polynômes de Legendre

- $P_0(x) = 1$
- $P_1(x) = x$
- $(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)$



Orthogonalité sur $[-1, 1]$

$$\forall m \neq n, \int_{-1}^{1} P_n(x) P_m(x) dx = 0 \Leftrightarrow \forall m \neq n, P_n \perp P_m$$

Intégration de Gauss et interpolation de Hermite

A intégrer : f sur $[a, b]$

- Interpolation de Hermite

$$f(x) \approx \sum_{i=1}^{n} f(a_i) H_i(x) + \sum_{i=1}^{n} f'(a_i) \bar{H}_i(x)$$

- Intégration terme à terme :

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{n} f(a_i) \mathcal{H}_i(x) + \sum_{i=1}^{n} f'(a_i) \bar{\mathcal{H}}_i(x)$$

Il reste à annuler le terme contenant la dérivée inconnue

Interpolation de Hermite : $\bar{\mathcal{H}}_i(x) = \int_a^b (x - a_i) L_i^2(x)\,dx$

Intégration de Gauss : choix des points d'échantillonnage

Des racines. . . $\pi(x) = \prod_{k=0}^{n} (x - x_k)$

- A annuler $\bar{\mathcal{H}}_i(x) = \int_a^b (x - a_i) L_i^2(x) = \int_a^b \pi(x) \frac{L_i(x)}{\pi'(a_i)} dx$
- Si les L_i et π ont les $\langle a_i \rangle$ comme racines communes, π a une racine (donc un degré) de plus
- Même racines que les polynômes de Legendre : identiques (à un facteur près)
- Si les $\langle a_i \rangle$ sont racines des polynômes de Legendre : $\pi \perp L_i$

Intégration de Gauss : bilan

Les polynômes de Legendre ne sont définis que sur $[-1, 1]$

Changement de variable $\xi = \frac{1}{2}(a+b) - \frac{1}{2}(a-b)\,x$

Formule obtenue

- $\int_{-1}^{1} f(\xi)\, d\,\xi \approx \sum_{i=1}^{n} f(a_i)\, \mathcal{H}_i(\xi)$
- $\mathcal{H}_i = \int_{-1}^{1} L_i$

Intégration de Gauss : variantes

Méthode précédente inapplicable pour les intervalles ouverts

- On prendra les racines d'autres polynômes orthogonaux
- sur $]-1,1[$: Chebychev
- sur $\mathbb{R}^+$: Laguerre
- sur $\mathbb{R}^-$: Hermite
- Modification de la notion d'orthogonalité

Partie V

Interprétation de données expérimentales

V Interprétation de données expérimentales

Modélisation et points expérimentaux

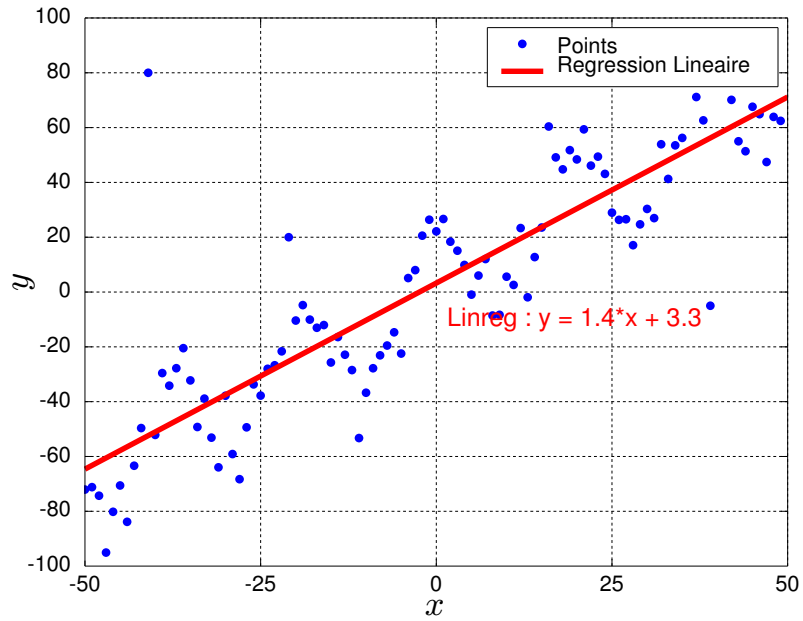
Comment *ajuster* une courbe continue sur des points expérimentaux ?

A l'œil

- Guide pour les yeux
- Interprétation
- Grandeurs quantitatives peu pertinentes

En ajustant $g\left(\langle x_i \rangle ; \langle a_j \rangle\right)$

- $\langle x_i \rangle$: abscisses connues
- $\langle a_j \rangle$: paramètres à déterminer



Questions

- Meilleurs valeurs pour $\langle a_j \rangle$?
- Qualité de la représentation ?

Le problème de l'ajustement de paramètres

Ajustement de paramètres, ou approximation, ou, en anglais, *fit*

Un problème statistique

- $\langle (x,y)_i \rangle$, $i \in \{0..N\}$: $N+1$ points expérimentaux
- $\langle a_j \rangle$, $j \in \{0..M\}$: $M+1$ paramètres à déterminer
- $M \ll N$: sinon ce n'est pas un ajustement

Minimisation des moindres carrés

- Détermination d'un modèle : $y = g\left(x; \langle a_j \rangle\right)$
- Estimation d'une erreur : $S = \sum_{i=0}^{N} \left[y_i - g\left(x_i; \langle a_j \rangle\right)\right]^2 = \sum_{i=0}^{N} \left[y_i - g_i\right]^2 = \sum_{i=0}^{N} \left(G_i M_i\right)^2$
- Minimisation de l'erreur
  - Via une méthode d'optimisation
  - Via un système $\forall j \in \{0..M\}$, $\frac{\partial S}{\partial a_j} = 0$

Équivalence avec un système de M+1 équations

Une application de l'équivalence optimisation/résolution

Minimisation de l'erreur

- $\forall j \in \{0..M\}\,,\ \frac{\partial S}{\partial a_j} = 0$
- $\forall j \in \{0..M\}\,,\ \sum_{i=0}^{N} 2\,(y_i - g_i)\left(-\frac{\partial g_i}{\partial a_j}\right)$
- $\forall j \in \{0..M\}\,,\ \displaystyle\sum_{i=0}^{N} g_i \frac{\partial g_i}{\partial a_j} = \sum_{i=0}^{N} y_i \frac{\partial g_i}{\partial a_j}$
- Système linéaire ou non, à résoudre avec la méthode ad. hoc.

Qualité de l'approximation

Valeur de S avec les $\langle a_j \rangle$ trouvés

Pondération des moindres carrés

Une variante permettant de donner plus d'importance à certains points

En Général

$$S = \sum_{i=0}^{N} w_i \left[y_i - g\left(x_i; \langle a_j \rangle\right)\right]^2 = \sum_{i=0}^{N} w_i \left[y_i - g_i\right]^2 = \sum_{i=0}^{N} w_i \left(G_i M_i\right)^2$$

Pour une incertitude relative constante : $w_i = (\Delta y_i)^2 = 1/y_i^2$

$$S_r = \sum_{i=0}^{N} \left(\frac{G_i M_i}{y_i^2}\right)^2$$

$S = \chi^2$

Ceci est un cas particulier de la méthode des moindres χ^2

Un écart type pour chacun

Chaque paramètre a_j, chaque mesure y_i, est supposé suivre une loi normale d'écart type σ_j ou σ_i

Rappel : la loi probabiliste normale (ou loi gaussienne)

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2}$$

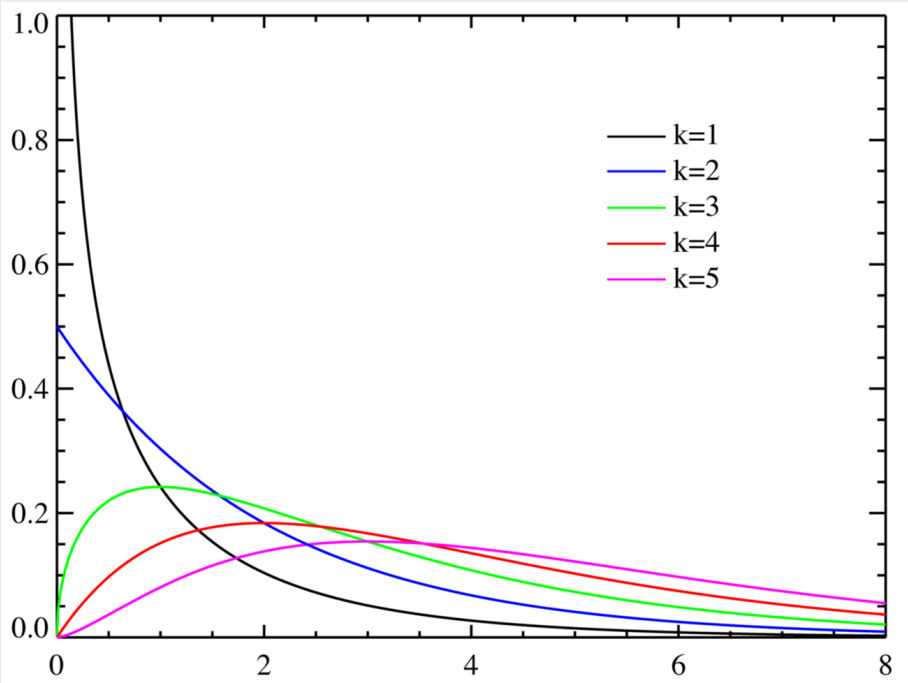
Quelques hypothèses

- Chaque paramètre a_j suit une loi normale d'écart type σ_j
- Chaque mesure y_i suit une loi normale d'écart type σ_i
- $\chi^2 = S_r = \sum_{i=0}^{N} \left(\frac{G_i M_i}{\sigma_i}\right)^2$
- Nombre de de degrés de liberté : $k = N - M$

Loi du χ^2

Densité de probabilité de la somme des carrés de k variables indépendantes

Répartition aléatoire du χ^2



$$\frac{\left(\chi^2\right)^{\frac{k}{2}-1} e^{-\frac{\left(\chi^2\right)}{2}}}{2^{\frac{k}{2}}\Gamma\left(\frac{k}{2}\right)}$$

Γ : extension de la factorielle

- $\Gamma(n) = (n-1)!$
- $\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt$

Utilisation pour calculer le *risque de se tromper* α

Risque de se tromper ou chance de ne pas se tromper !

2 façons de voir le risque α

- Risque de se tromper en affirmant que le modèle n'est pas bon
- Chance de ne pas se tromper en affirmant que le modèle est bon

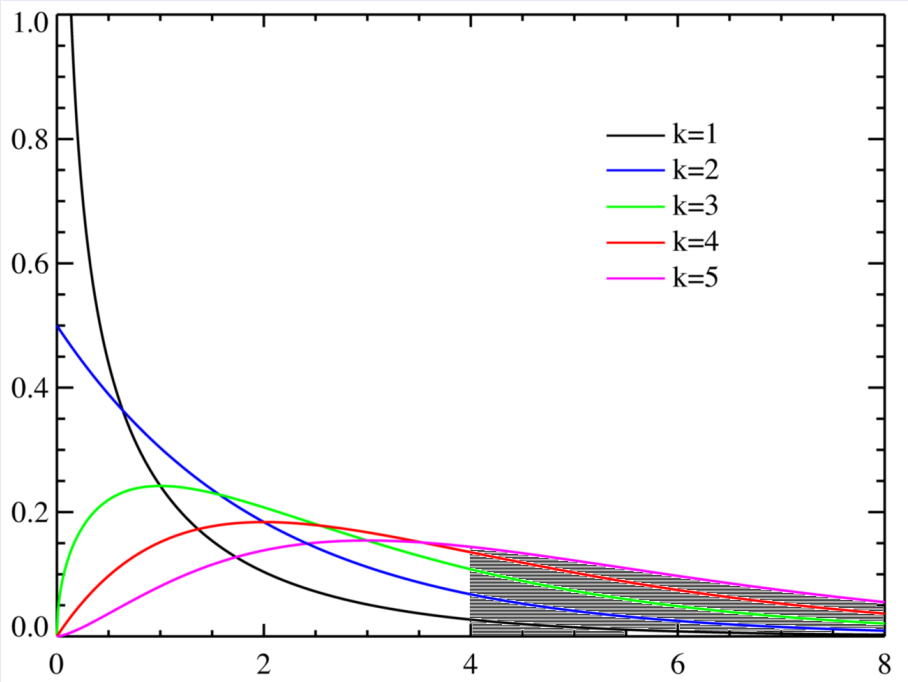
Calcul du risque α

- Selon nos hypothèses, le χ^2 suit sa distribution statistique
- En supposant notre modèle bon :
  - On a trouvé une valeur χ^2_0 suite à l'approximation
  - On peut estimer la probabilité que le χ^2 dépasse malgré tout la valeur trouvée χ^2_0
- C'est le risque de se tromper en affirmant que le modèle n'est pas bon

Evaluation numérique du risque α

Intégrale sous la courbe à droite de la valeur trouvée pour χ^2

Exemple pour $\chi^2 = 4$ et $k = 5$



Calcul numérique de l'intégrale

- Méthodes vues
- Valeurs tabulées
- Calculateurs préprogrammés

k grand

- approximation par une loi normale
- intégrale calculée via la fonction d'erreur
- $\alpha \approx \dfrac{\left(\mathrm{erf}\left(\dfrac{-\left(\chi^2-k\right)}{2\sqrt{k}}\right)+1\right)}{\left(\mathrm{erf}\left(\frac{1}{2}\sqrt{k}\right)+1\right)}$

Calcul du seuil χ^2 pour peu de degrés de libertés

Source : ftp://econometrie-mse.univ-paris1.fr/pub/ecmtrmse/pradel/TablesStatistiques/CHI-DEUX.PDF

k \ α	0.90	0.80	0.70	0.50	0.30	0.20	0.10	0.05	0.02	0.01
1	0,0158	0,0642	0,148	0,455	1,074	1,642	2,706	3,841	5,412	6,635
2	0,211	0,446	0,713	1,386	2,408	3,219	4,605	5,991	7,824	9,210
3	0,584	1,005	1,424	2,366	3,665	4,642	6,251	7,815	9,837	11,341
4	1,064	1,649	2,195	3,357	4,878	5,989	7,779	9,488	11,668	13,277
5	1,610	2,343	3,000	4,351	6,064	7,289	9,236	11,070	13,388	15,086
6	2,204	3,070	3,828	5,348	7,231	8,558	10,645	12,592	15,033	16,812
7	2,833	3,822	4,671	6,346	8,383	9,803	12,017	14,067	16,622	18,475
8	3,490	4,594	5,527	7,344	9,524	11,030	13,362	15,507	18,168	20,090
9	4,168	5,380	6,393	8,343	10,656	12,242	14,684	16,919	19,679	21,666
10	4,865	6,179	7,267	9,342	11,781	13,442	15,987	18,307	21,161	23,209
11	5,578	6,989	8,148	10,341	12,899	14,631	17,275	19,675	22,618	24,725
12	6,304	7,807	9,034	11,340	14,011	15,812	18,549	21,026	24,054	26,217
13	7,042	8,634	9,926	12,340	15,119	16,985	19,812	22,362	25,472	27,688
14	7,790	9,467	10,821	13,339	16,222	18,151	21,064	23,685	26,873	29,141
15	8,547	10,307	11,721	14,339	17,322	19,311	22,307	24,996	28,259	30,578
16	9,312	11,152	12,624	15,338	18,418	20,465	23,542	26,296	29,633	32,000
17	10,085	12,002	13,531	16,338	19,511	21,615	24,769	27,587	30,995	33,409
18	10,865	12,857	14,440	17,338	20,601	22,760	25,989	28,869	32,346	34,805
19	11,651	13,716	15,352	18,338	21,689	23,900	27,204	30,144	33,687	36,191
20	12,443	14,578	16,266	19,337	22,775	25,038	28,412	31,410	35,020	37,566
21	13,240	15,445	17,182	20,337	23,858	26,171	29,615	32,671	36,343	38,932
22	14,041	16,314	18,101	21,337	24,939	27,301	30,813	33,924	37,659	40,289
23	14,848	17,187	19,021	22,337	26,018	28,429	32,007	35,172	38,968	41,638
24	15,659	18,062	19,943	23,337	27,096	29,553	33,196	36,415	40,270	42,980
25	16,473	18,940	20,867	24,337	28,172	30,675	34,382	37,652	41,566	44,314
26	17,292	19,820	21,792	25,336	29,246	31,795	35,563	38,885	42,856	45,642
27	18,114	20,703	22,719	26,336	30,319	32,912	36,741	40,113	44,140	46,963
28	18,939	21,588	23,647	27,336	31,391	34,027	37,916	41,337	45,419	48,278
29	19,768	22,475	24,577	28,336	32,461	35,139	39,087	42,557	46,693	49,588
30	20,599	23,364	25,508	29,336	33,530	36,250	40,256	43,773	47,962	50,892

Stratégie d'approximation

Une fois la meilleure approximation trouvée : que faut-il en penser ?

Approximation faite

- σ_i choisis — méthodes encore à déterminer
- χ^2 déterminé
- $k = N - M$ connu

Risque α de se tromper — chance α de ne pas se tromper

- Formules précédentes
- Un *bon* α : $\alpha < 5\%$

Si α est trop grand

- Le modèle g n'est pas bon
- Les σ_i sont trop petits
- Les y_i ne suivent pas une loi normale

Comment choisir les écarts types ?

Les écarts types sont des facteurs déterminant pour le calcul de la qualité de l'approximation

Méthode idéale

- Répéter plusieurs fois l'expérience (ou la simulation) pour chaque x_i
- Vérifier que les y_i obtenus suivent une loi normale
- Affecter à σ_i l'écart type trouvé[a]

[a] Rappel : la probabilité pour qu'une valeur s'écarte de la moyenne de plus de $1,96 * \sigma_i$ vaut 5%

Méthode difficile à appliquer en pratique

Ajustements sur des mesures expérimentales

Choix des écarts type lorsque les couples $\langle (x, y) \rangle$ sont issus de mesures expérimentales

Lié à l'incertitude Δy_i sur y_i au risque β

- Incertitude au risque β :

  y_i a une probabilité β de se trouver en dehors de $[y_i - \Delta y_i, y_i + \Delta y_i]$

- Pour une loi normale et une incertitude à 5% : $\sigma_i = \frac{\Delta y_i}{1{,}96}$
- Pour une loi normale et une incertitude à 1% : $\sigma_i = \frac{\Delta y_i}{2{,}58}$

Ajustement

- Fixer les σ_i en fonction de l'incertitude expérimentale
- Ajuster au mieux et évaluer χ^2
- Vérifier que le risque α correspondant ne dépasse pas le risque que l'on est prêt à prendre
- Si c'est le cas, l'ajustement est validé

Quand on a aucune information sur les écarts types

Cette situation ne devrait jamais arriver. . . sauf cas particuliers

Si l'on sait que l'incertitude est constante $\forall i \in [0, N]\,,\ \sigma_i = \sigma$

- On remarque que χ^2 est de l'ordre de $k = N - M$
- $\chi^2 = \sum_{i=0}^{N} \left(\frac{G_i M_i}{\sigma} \right)^2 \approx N - M$
- $\sigma^2 \approx \frac{1}{N-M} \sum_{i=0}^{N} (G_i M_i)^2$
- Méthode
  - Faire un premier ajustement avec $\sigma = 1$
  - Déterminer σ
  - Refaire l'ajustement avec cette nouvelle valeur : déterminer χ^2
  - Utiliser ce χ^2 pour décider de la validité de l'ajustement

Si on sait juste que l'incertitude relative est constante

$\forall i \in [0, N]\,,\ \sigma_i / y_i = C$

- χ^2 est toujours de l'ordre de $k = N - M$
- $\chi^2 = C^2 \sum_{i=0}^{N} \left(\frac{G_i M_i}{y_i} \right)^2 \approx N - M$
- $C^2 \approx \frac{1}{N-M} \sum_{i=0}^{N} \left(\frac{G_i M_i}{y_i} \right)^2$
- Méthode
  - Faire un premier ajustement avec $\sigma_i = y_i$
  - Déterminer C
  - Refaire l'ajustement avec cette nouvelle valeur : déterminer χ^2
  - Utiliser ce χ^2 pour décider de la validité de l'ajustement

Marche à suivre pour incertitudes expérimentales connues

Comment effectuer une modélisation correcte de données expérimentales

Si l'on connait l'incertitude de mesure, absolue ou relative

- $\sigma_i = \Delta y_i / 1,96$ ou $\sigma_i = \Delta y_i / 2,58$
  pour $\alpha = 5\%$ ou $\alpha = 1\%$ de risque sur Δy_i
- Choix d'une modélisation $y = g\left(x, \langle a_k \rangle\right)$
- Ajustement
- Calcul de χ^2 et vérification de l'adéquation du modèle
  - Sa valeur doit être inférieure à la valeur calculée pour le risque α souhaité

Marche à suivre pour incertitudes expérimentales inconnues

Mais cela ne devrait pas arriver. . .

Si l'on ne connait pas l'incertitude de mesure

- On doit au moins savoir si l'incertitude absolue, ou relative, est constante
- On doit faire le choix d'une modélisation $y = g\left(x, \langle a_k \rangle\right)$
- Ajustement par les moindres carrés absolus ou relatifs
- On en déduit les écarts types
- On refait l'ajustement avec les nouveaux écarts types
- Calcul de χ^2 et vérification de l'adéquation du modèle
  - Sa valeur doit être inférieure à la valeur calculée pour le risque α souhaité

L'ajustement : une aide au choix du modèle

Si l'on hésite sur le choix de g

On choisit celui qui donne le meilleur χ^2

Partie VI

Equations Différentielles Ordinaires

VI Equations Différentielles Ordinaires

16 Résolution numérique des problèmes différentiels
- Classification
- Forme canonique

17 Problèmes aux conditions initiales $y' = f(t, y), y(0) = y_0$
- Méthode d'Euler
- Méthodes Runge & Kutta
- Méthodes d'Adams

18 Problèmes aux conditions limites
- Méthode de Tir
- Méthode matricielle

Un problème différentiel ordinaire

Équation Différentielle Ordinaire (EDO) $y(t) \in \mathbb{R}^m$

$$f\left(t, y, y', \ldots, y^{(n)}\right) = 0$$

Conditions initiales ou conditions aux limites ?

- Un tel problème différentiel n'est pas complètement défini

  Il dispose de n degrés de liberté
- Une solution unique est obtenue par ajout de n contraintes

Unicité de la solution indispensable

La résolution numérique est possible seulement si les contraintes sont posées

Définition des contraintes

Problèmes aux conditions initiales — Problème de Cauchy

- Les contraintes sont imposées en un point unique
- Elles concernent l'inconnue et ses $n-1$ premières dérivées
- Ce sont les conditions initiales

Contraintes imposées en divers points

- Elles peuvent concerner l'inconnue ou ses dérivées
- Elles peuvent être exprimées en plusieurs points
- Elles doivent être au nombre de n

Forme canonique

$$y' = f(t, y)$$

EDO d'ordre 1

- Le problème que nous allons étudier dans cette partie
- Est-il si restrictif ?

Ordre supérieur

$$w^{(n)} = g\left(t, w, w', \cdots, w^{(n-1)}\right)$$

Changement de variable

$$y_i = w^{(i)}$$

Équation d'ordre 1 équivalente

$$\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_{n-2} \\ y_{n-1} \end{bmatrix}' = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ g\left(t, y_0, \cdots, y_{n-1}\right) \end{bmatrix}$$

Dans la suite, nous étudierons et prendrons des exemples pour des inconnues à valeurs réelles, mais l'on pourra généraliser aisément

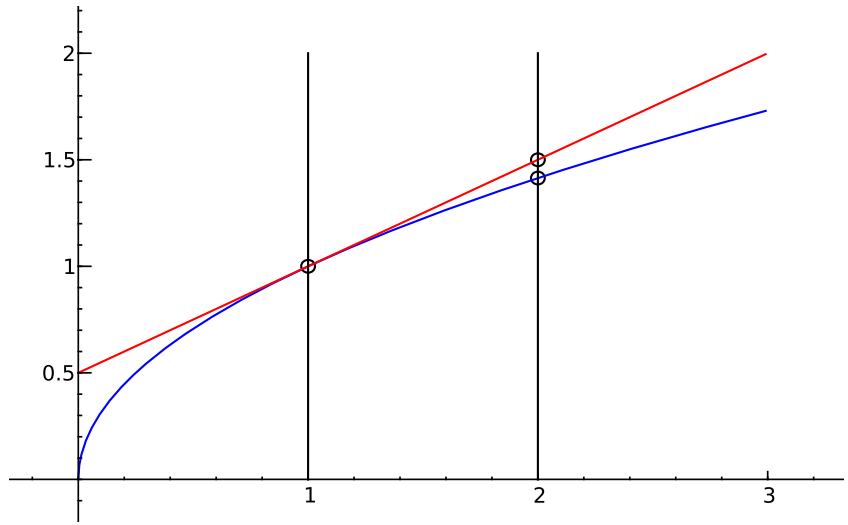
La méthode d'Euler

$y' = f(t, y)$

Une méthode simple mais très peu utilisée car imprécise et instable

DL ordre 1 $y(t + \Delta t) = \cdots$

- $y(t) + \Delta t y'(t) + o(\Delta t)$
- $y(t) + \Delta t f(t, y) + o(\Delta t)$
- $y^{[i+1]} = y^{[i]} + \Delta t f\left(t, y^{[i]}\right)$



Erreur de troncature du DL

- $\frac{\Delta t^2}{2!} y'' + \frac{\Delta t^3}{3!} y''' + \cdots$
- $\frac{\Delta t^2}{2!} f'(t, y) + \frac{\Delta t^3}{3!} f''(t, y) + \cdots$
- Cumulée à chaque pas

Méthode d'Euler implicite

Les méthodes implicites sont plus stables que les méthodes explicites

Explicite *vs.* Implicite ?

- Méthode explicite : $y^{[i]}$ ne dépend que des $y^{[k]}$ pour $k < i$
- Méthode implicite : $y^{[i]}$ ne dépend que des $y^{[k]}$ pour $k \leq i$

Euler implicite

- Explicite : $y'^{[i]} = \frac{y^{[i+1]} - y^{[i]}}{\Delta t}$ dérivée à droite
- Implicite : $y'^{[i+1]} = \frac{y^{[i+1]} - y^{[i]}}{\Delta t}$ dérivée à gauche
- $y^{[i+1]} = y^{[i]} + \Delta t \times f\left(t, y^{[i+1]}\right)$
- Équation à résoudre à chaque pas
  - Formellement, une fois pour toute si possible
  - Numériquement, valeur de départ fournie par méthode explicite

Les Méthodes Runge & Kutta (RK)

Méthodes dites *A pas unique*

De nombreux avantages

- Faciles à programmer
- Très stables
- Largeur du pas aisément modifiable pour une précision souhaitée
- La condition initiale suffit

Quelques inconvénients

- Pour une même précision, il y a plus économe en temps de calcul
- Instables dans certains cas

Très utilisées en pratique

Utilisation préférentielle de RK4... sauf si instable

RK2 : Runge & Kutta à l'ordre 2

Centrons les différences finies sur le milieu

Différences finies centrées au point milieu

$$y' = f(t,y) \Rightarrow \frac{1}{\Delta t}\left(y(t+\Delta t) - y(t)\right) + o(\Delta t) = f\left(t+\frac{\Delta t}{2}, y\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right)\right)$$

Allégeons les notations

- $t^{[i]} + \Delta t = t^{[i+1]}$
- $t^{[i]} + \frac{\Delta t}{2} = t^{\left[i+\frac{1}{2}\right]}$
- $y\left(t^{[k]}\right) = y^{[k]}$

Différences finies centrées au point milieu

$$y' = f(t,y) \Rightarrow \frac{y^{[i+1]} - y^{[i]}}{\Delta t} = f\left(t^{\left[i+\frac{1}{2}\right]}, y^{\left[i+\frac{1}{2}\right]}\right)$$

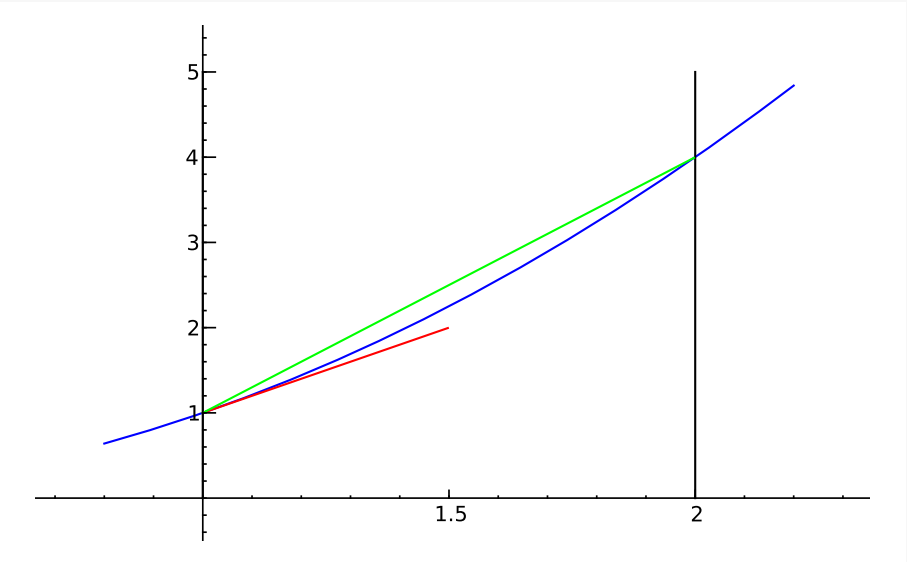
RK2 : Runge & Kutta à l'ordre 2

Différences centrées au point milieu

$$f\left(t^{[i+\frac{1}{2}]}, y^{[i+\frac{1}{2}]}\right) = \frac{y^{[i+1]} - y^{[i]}}{\Delta t}$$

Estimation de $y^{[i+1/2]}$ par Euler

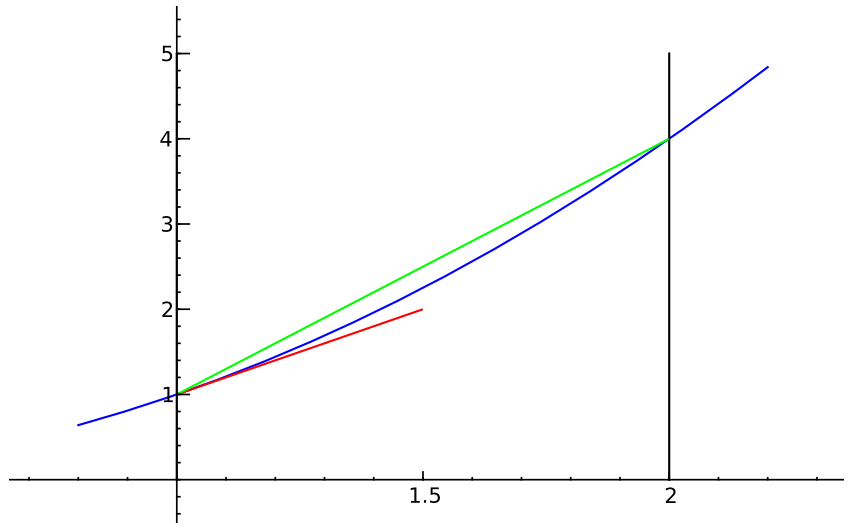
- $y^{[i+1/2]} = y^{[i]} + \frac{\Delta t}{2} f\left(t^{[i]}, y^{[i]}\right)$
- $y^{[i+1]} = y^{[i]} + \Delta t \times f\left(t^{[i+\frac{1}{2}]}, y^{[i+1/2]}\right)$



Formule à l'ordre 2

RK2 : formulation standardisée

- $r_1 = f\left(t^{[i]}, y^{[i]}\right)$
- $r_2 = f\left(t^{\left[i+\frac{1}{2}\right]}, y^{[i]} + \frac{\Delta t}{2} r_1\right)$
- $y^{[i+1]} = y^{[i]} + \Delta t \times r_2$



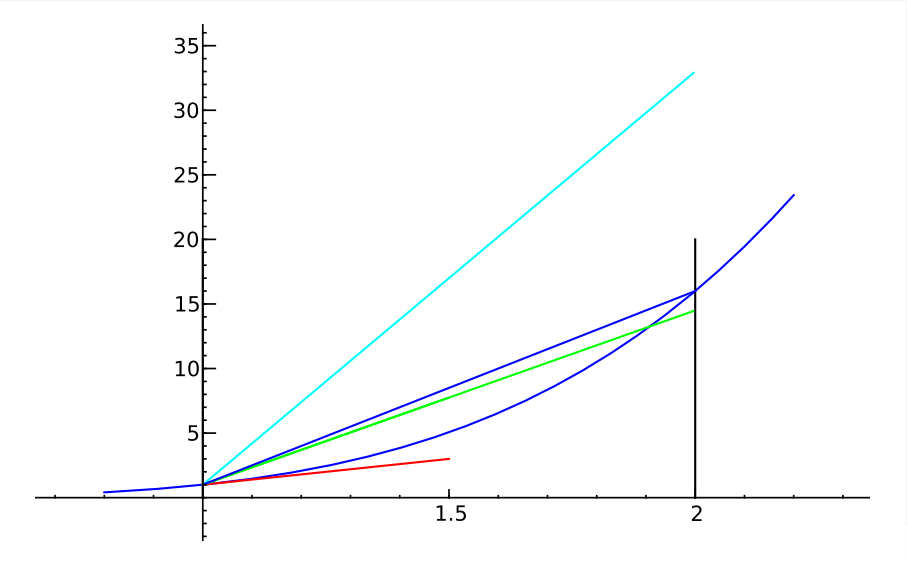
Runge & Kutta à l'ordre 4

LA méthode reine

RK4

RK4 est obtenue par pondération successive des dérivées à droite, à gauche et centrée

- $r_1 = f\left(t^{[i]}, y^{[i]}\right)$
- $r_2 = f\left(t^{[i+\frac{1}{2}]}, y^{[i]} + \frac{\Delta t}{2} r_1\right)$
- $r_3 = f\left(t^{[i+\frac{1}{2}]}, y^{[i]} + \frac{\Delta t}{2} r_2\right)$
- $r_4 = f\left(t^{[i+1]}, y^{[i]} + \Delta t \times r_3\right)$
- $y^{[i+1]} = y^{[i]} + \frac{\Delta t}{6}\left(r_1 + 2r_2 + 2r_3 + r_4\right)$



Les méthode d'Adams ouvertes

Des méthodes à pas multiples

Adams-Bashforth

(nécessitant plusieurs points précédents)

Principe : encore une fois le Développement Limité

- Développement limité
- Différences finies
- Ordre augmenté en augmentant l'ordre du DL
- Le calcul de $y^{[i]}$ nécessite $y^{[i-1]}, y^{[i-2]} \ldots$

Développement limité à droite — Différences finies à gauche

- $y(t+\Delta t) = y(t) + \Delta t \times y'(t) + \frac{\Delta t^2}{2!} y''(t) + \frac{\Delta t^3}{3!} y'''(t) + \cdots$
- $y^{[i+1]} = y^{[i]} + \Delta t \times f^{[i]} + \frac{\Delta t^2}{2!} f'^{[i]} + \frac{\Delta t^3}{3!} f''^{[i]} + \ldots$

  En notant $f\left(t_i, y^{[i]}\right) = f^{[i]}$
- Dérivées évaluées par différences finies à gauche

  Calcul simple mais fastidieux

Les méthodes d'Adam ouvertes : exemples

Ordres 1 à 2

Ordre 1 — Euler

$$y^{[i+1]} = y^{[i]} + \Delta t \times f^{[i]} + o(\Delta t)$$

Ordre 2

- $y^{[i+1]} = y^{[i]} + \Delta t \times f^{[i]} + \frac{\Delta t^2}{2!} f'^{[i]} + o(\Delta t^2)$
- $f'^{[i]} = \frac{f^{[i]} - f^{[i-1]}}{\Delta t} + o(\Delta t)$
- $y^{[i+1]} = y^{[i]} + \frac{\Delta t}{2}\left(3f^{[i]} - f^{[i-1]}\right) + o(\Delta t^2)$

Démarrage de la méthode

- Nécessité de trouver un premier point par une autre méthode d'ordre au moins égal
- Par exemple : RK2

Méthode ouverte d'Adams à l'ordre 3

Encore une fois pour être sûr de bien comprendre

Expression du DL à droite, compte tenu de l'équation différentielle

$$y^{[i+1]} = y^{[i]} + \Delta t \times f^{[i]} + \frac{\Delta t^2}{2!} f'^{[i]} + \frac{\Delta t^3}{3!} f''^{[i]} + o\left(\Delta t^3\right)$$

$f'^{[i]}$ Formule en $o(\Delta t)$

$$\frac{3f^{[i]} - 4f^{[i-1]} + f^{[i-2]}}{2\Delta t} + o(\Delta t)$$

$f''^{[i]}$

$$\frac{f^{[i]} - 2f^{[i-1]} + f^{[i-2]}}{\Delta t^2} + o(1)$$

Formule d'Adams ouverte à l'ordre 3

$$y^{[i+1]} = y^{[i]} + \frac{\Delta t}{12}\left[23f^{[i]} - 16f^{[i-1]} + 5f^{[i-2]}\right] + o\left(\Delta t^3\right)$$

Méthodes d'Adams fermées

Des méthodes implicites

Adams-Moulton

Développement limité à gauche — Différences finies à gauche

- $y(t) = y(t+\Delta t) - \Delta t \times y'(t+\Delta t) + \frac{\Delta t^2}{2!} y''(t+\Delta t) - \frac{\Delta t^3}{3!} y'''(t+\Delta t) + \cdots$
- $y^{[i]} = y^{[i+1]} - \Delta t \times f^{[i+1]} + \frac{\Delta t^2}{2!} f'^{[i+1]} - \frac{\Delta t^3}{3!} f''^{[i+1]} + \ldots$
- $y^{[i+1]} = y^{[i]} + \Delta t \times f^{[i+1]} - \frac{\Delta t^2}{2!} f'^{[i+1]} + \frac{\Delta t^3}{3!} f''^{[i+1]} + \ldots$
- Dérivées évaluées par différences finies à gauche

On a besoin du résultat pour avoir le résultat . . . ?

- Estimation du résultat par une méthode ouverte (prédiction)
- Correction par une méthode fermée d'ordre au moins égal
- Itération jusqu'à obtention de la précision voulue

Adams-Moulton : deux exemples

Ordres 1 & 4

Ordre 1 — Euler implicite

$$y^{[i+1]} = y^{[i]} + \Delta t \times f^{[i+1]} + o(\Delta t)$$

Ordre 4 — La plus utilisée en pratique

$$y^{[i+1]} = y^{[i]} + \frac{\Delta t}{24}\left[9f^{[i+1]} + 19f^{[i]} - 5f^{[i-1]} + f^{[i-2]}\right] + o(\Delta t^4)$$

Méthodes de prédiction correction

En pratique : combinaison des méthodes d'Adams ouvertes et fermées

Avantages

- Stabilité des méthodes implicites
- Quantité de calcul proche des méthodes explicites

Principe

- Estimation par une méthode ouverte — Adams-Bashforth
- Correction par une méthode fermée — Adams-Moulton
  - d'ordre au moins égal
  - en pratique : même ordre ou un de plus

Méthode de Tir

Résolution itérative des problèmes à conditions limites

Principe

- Transformer en un problème à conditions initiales
- Une condition inconnue
- Trouver l'inconnue

Fig.: Source de la Photo : Ray Bilcliff, `http://www.trueportraits.com`

Méthode de Tir pour une équation du second ordre

Problème à résoudre

- Équation du second ordre : deux degrés de liberté

  $A(x,y)\,y'' + B(x,y)\,y' + C(x,y)\,y = D(x,y)$
- Deux contraintes sous forme de conditions aux limites

  $y(0) = y_0$ et $y(L) = y_L$

Transformation en un problème aux conditions initiales

- $y'(0) = u$ inconnue : conditions initiales fixées
- Pour u donné, une estimation de y est calculée : y_u
- Au point L, sa valeur est $y_u(L)$
- C'est une fonction de u, nommons là $y_L : u \mapsto y_L(u)$
- Le problème différentiel devient une recherche de racine $y_L(u) = y_L$

Recherche de la racine

Trouver u, c'est résoudre le problème

$$y_L(u) = y_L$$

Méthode de l'artilleur

- Je tire un coup au dessus
- Je tire un coup au dessous
- J'ajuste le tir
- Je recommence si nécessaire
- C'est la Méthode de la sécante ▸ Voir chapitre précédent

Application dans notre cas

- Résoudre pour deux valeurs arbitraires $u^{[1]}$ et $u^{[2]}$
- $u^{[3]}$ sera la valeur trouvée pour u en interpolant y_L linéairement entre $u^{[1]}$ et $u^{[2]}$
- $$u^{[n+1]} = \frac{\left[y_L\left(u^{[n]}\right)-y_L\right]u^{[n-1]}-\left[y_L\left(u^{[n-1]}\right)-y_L\right]u^{[n]}}{\left[y_L\left(u^{[n]}\right)-y_L\left(u^{[n-1]}\right)\right]}$$

Et si les conditions aux limites impliquent la dérivée ?

Supposons des conditions aux limites linéaires

- $\alpha_0 y(0) + \alpha_1 y'(0) = c_0$
- $\beta_0 y(L) + \beta_1 y'(L) = c_L$

Remplaçons par un problème à conditions initiales

- $\alpha_0 y(0) + \alpha_1 y'(0) = c_0$
- $\gamma_0 y(0) + \gamma_1 y'(0) = u$
- En imposant $\alpha_0\gamma_1 - \alpha_1\gamma_0 = 1$:
  - $y(0) = -\alpha_1 u + c_0\gamma_1$
  - $y'(0) = \alpha_0 u - c_0\gamma_0$

Méthode de la sécante

- Évaluation de y_u pour $u^{[1]}$ et $u^{[2]}$ arbitraires
- Méthode de la sécante pour résoudre $\beta_0 y_u(L) + \beta_1 y'_u(L) = c_L$

Équation du second ordre linéaire

Équation différentielle linéaire du second ordre

- Les coefficients ne dépendent que de x
- $A(x)\,y'' + B(x)\,y' + C(x)\,y = D(x)$
- La combinaison linéaire de deux solutions est solution

Cas particulier de la méthode de la sécante

- L'interpolation linéaire est exacte
- Un pas suffit
- $u^{[3]}$ est la solution

Équations d'ordres supérieurs — ordre n

Équivalence équation premier ordre

Équation vectorielle, ordre 1, n composantes

Les n conditions limites

- n_0 d'entre elles sont en x_0 : $c_0 = (c_{0,1}, \cdots, c_{0,n_0})$
- $n_L = n - n_0$ d'entre elles sont en x_L : $c_L = (c_{L,1}, \cdots, c_{L,n_L})$

Transformation en problème à conditions initiales en x_0

- n_0 premières conditions connues, n_L suivantes inconnues
- Posons $u = (c_0, c_u)$ et $e(u) = c_L(u) - c_L$

Méthode de Newton discrétisée

▸ Voir chapitre précédent

$e(u) = 0$

$$e(u + \delta u) \approx e(u) + D_e^u \delta u = 0 \Rightarrow u^{[n+1]} = u^{[n]} - (D_e^u)^{-1} \delta u$$

Estimation numérique de D_e^u car dérivation impossible

EDO linéaires à conditions limites : méthode matricielle

Aussi connue sous les noms de *méthode de relaxation* ou *méthode aux différences finies*

Une EDO linéaire discrétisée est un système linéaire

- Différences finies en chaque point : n équations
- La valeur de y en chaque point : n inconnues

Résolution du système

- Les différences finies ne font référence qu'aux voisins
- C'est un système multidiagonal, donc creux
- Méthodes itératives et matrices creuses pour n grand

Mais attention à la troncature du Développement Limité

- Il est prudent de comparer la solution obtenue en doublant n
- Et de le doubler encore si nécessaire

Méthode matricielle pour les EDO non linéaires

Le système à n équations et n inconnues n'est plus linéaire

Résolution d'un système non linéaire

- Un air de déjà vu
- Méthode de Newton multidimensionnelle ▸ vue précédemment