1

Leçons à l'oral de modélisation et calcul scientifique

* (Rapport 2021) : 7 leçons de calcul scientifique sont au programme.

* Déroulement

→ 10 minutes : plan (+2 Dvpt)

→ 20 minutes : développement avec partie informatique

→ 30 minutes : questions + exercices (sur le plan)

* Références bibliographiques :

→ Demailly : Analyse Numérique et équations différentielles [Dem]

→ Schatzman : Analyse numérique : une approche mathématique [Sch]

→ Ciarlet : Introduction à l'analyse numérique matricielle [Cia]

→ Lascaux Théodore [LaTh]

→ Allaire/Kaber : Algèbre linéaire numérique [All]

→ Filbet : Analyse numérique [Fil]

→ Hubert/Hubbard : calcul scientifique, tome 1 (voire tome 2) [Hub]

Leçon n° 1

1. Calcul numérique : intégration, différentiation, sommation, résolution d'équations algébriques ou différentielles.

Il s'agit de parler des aspects numériques pour différents sujets :

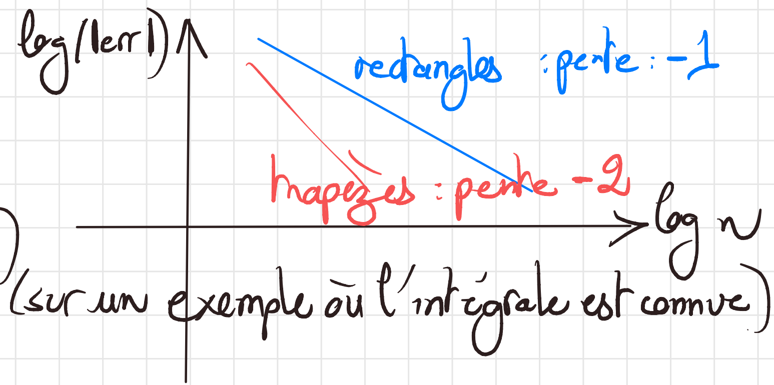
- → intégration
- → gestion des arrondis numériques dans les opérations (linéaires)
- → résolution d'équations non linéaires
- → résolution d'équations différentielles

* Ref : [Dem], chapitre 1 (en intégralité)

Autres possibilités de développement : ~~2~~

→ intégration numérique :

comparaison de la vitesse de convergence de la méthode des rectangles et des trapèzes (+ illustration)



(sur un exemple où l'intégrale est connue)

Leçon n° 2

2. Méthodes numériques pour les systèmes linéaires : conditionnement, factorisation LU, méthode du gradient pour systèmes d'équations linéaires symétriques définis positifs. Recherche de valeurs propres (méthode de la puissance). Moindres carrés linéaires sans contraintes.

→ Toute l'algèbre numérique est proposée dans cette leçon : il faut faire des choix, en gardant certains aspects comme le conditionnement.

↗ Systèmes linéaires : 1 directe, 1 itérative $Ax=b$, $A \in GL_n(\mathbb{R})$

→ Recherche de valeurs propres : puissance (+ Jacobi) $[\lambda \mid \exists X \neq 0,\ AX = \lambda X]$

↘ Moindres carrés $\min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax-b\|^2$, $A \in \mathcal{M}_{p,n}(\mathbb{R})$, $p>n$ (*)

(*) équation normale : $\underbrace{{}^tAA}_{n\times n}\, x = \underbrace{{}^tAb}_{n\times 1}$

* Références : [Sch], [Fil], [Cia], [All]

* Exemples de développement

→ existence et unicité de LU (+ implémentation sur un exemple)

→ convergence de Jacobi ($\rho(M^{-1}N)<1$) (+ vérification)

→ preuve de convergence de la méthode de la puissance (+ exemple (**), éventuellement en modélisation)

(**) $A = P \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} P^{-1}$

aléatoire

Leçon n°3

3. Résolution de systèmes d'équations non linéaires : Méthode de Newton, vitesse de convergence, estimation de l'erreur.

* Référence : [Dem], chapitre 4 (difficile) ; [Hub], tome 1

* Séparer les aspects $n = 1$ et $n > 1$ ($n = 1$ n'est pas au cœur de la leçon)

* Exemples : issus des références (modélisation : GPS, voir séance 2)

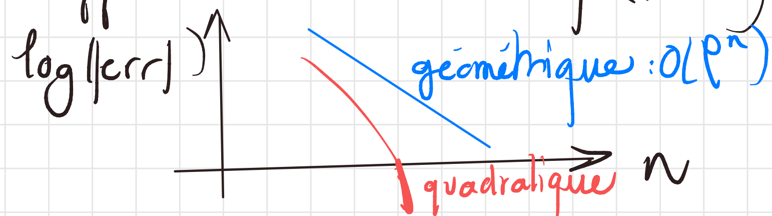
* Exemples de développement

→ 1 dvpt pour $n = 1$ (Newton, sécante, pt fixe) + exemple avec comparaison des vitesses de convergence ([Dem])

→ 1 dvpt pour $n > 1$: théorème de Kantorovitch ([Hub]) + exemple

$$x_{n+1} = x_n - Df(x_n)^{-1} \cdot f(x_n)$$

(pour approcher une solution de $f(x) = 0$)



Leçon n° 4.

4. Equations différentielles ordinaires : Méthodes d'Euler explicite et implicite. Consistance, stabilité, convergence, ordre.

* Outre les méthodes d'Euler explicites et implicites, on peut présenter le cadre général des méthodes à un pas, avec l'exemple de la méthode de Heun :

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}\Delta T\left[f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_n + \Delta T f(t_n, y_n))\right]$$

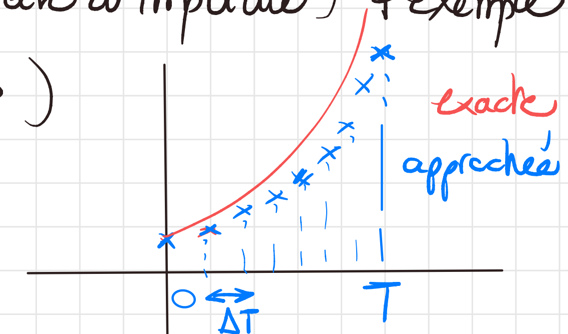
(voir RK 4)

* <u>Références</u> [Dem]
  (aussi : [Sch], [Fil])

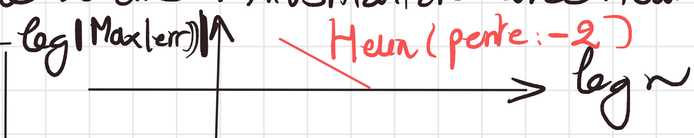
* Attention à ne pas faire trop de théorie sur les EDO (prérequis : Cauchy-Lipschitz)

* Exemples de développements :

→ Preuve directe de convergence d'Euler (explicite ou implicite) + exemple ($y' = ay + b$)



→ sur une des 4 notions, faire le lien entre la définition et la propriété sur Φ. (exemple : ordre + illustration avec Heun)



Leçon n° 5 : tome 1 (ou [Sch], [Fil]) 6

7. Calcul matriciel : opérations élémentaires sur lignes et sur colonnes, méthode du pivot de Gauss.

* Attention à ne pas refaire la leçon 48 (Algèbre). On peut cependant garder les développements théoriques en les illustrants.

* Il faut introduire les difficultés numériques liées au passage à un outil de calcul numérique (et non formel) :

→ conditionnement (cf Hilbert, ...)

→ stratégie de pivot

* Références : [Cia], [La Th]

* Exemples de développements :

→ existence de M inversible tq $MA = U$ (triangulaire supérieure) + expression de M (permutation, transvection) (+ implémentation Gauss)

→ complexité de Gauss ($\sim \frac{2n^3}{3}$ op.) (+ illustration sur la rapidité du calcul sur un ordinateur à 1 Gflops $\sim 10^9$ op/s)

→ Cas particulier : matrices creuses (+ illustration avec le laplacien discret)

Leçon 6 :

Polynômes à une indéterminée : évaluation (Horner), interpolation (Lagrange), localisation des racines dans R et dans C.

* Références : [Dem] (chap. 2), [Hub]

→ Lagrange : multiples exemples de démonstrations pouvant servir de développements, avec l'exemple numérique

$$f(x) = \frac{1}{1+x^2} \text{ sur } [-\alpha, \alpha]$$

$\alpha = 5$ ⊕ pts équidistants : non convergence
$\alpha = 1$ ⊕ " " : convergence
$\alpha = 5$ ⊕ pts de Tchebychev : convergence

* Pour l'algorithme de calcul, on peut soit utiliser l'algorithme des différences divisées, soit utiliser la matrice de Vandermonde.

→ Hörner : voir [Dem] chap. 1 (+ illustration dans l'algo. des différences divisées)

→ localisation des racines : voir [Hub], p. 223 (dont : disques de Gershgöring ou suite de Sturm).

→ lien avec la recherche des valeurs propres.

Leçon 7 : appliquer et comparer des méthodes numériques de recherche de valeurs propres et vecteurs propres. Applications

* Références : [Ci], [All]

→ conditionnement

→ difficulté du problème (lien avec la recherche de racines)

→ exemples de modélisation (matrice de Google, dynamique des populations)

↗ valeurs propres : Jacobi, puissance, QR

↘ vecteurs propres : puissance

→ preuve de convergence de la méthode de la puissance (+ exemple(**), éventuellement en modélisation)

(**) $A = P \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} P^{-1}$

aléatoire

→ preuve de Jacobi ($A \in S_n(\mathbb{R})$) + implémentation

Leçon 8 : application des formules de Taylor à une ou plusieurs variables

* Références : [Dem], [Fil] (optimisation)

Plusieurs types d'applications :

→ résolution de systèmes par la méthode de Newton

(→ interpolation de Lagrange)

→ calcul approché d'intégrales

→ Recherche de minimum par la méthode du gradient

(voir leçons correspondantes)

→ Newton

→ Simpson

→ gradient

} à implémenter

→ approximation par différences divisées