

# TABLE DES MATIÈRES

<b>Avant-propos</b> .....	<b>1</b>
<b>Chapitre 1. Représentation graphique de fonctions</b> .....	<b>5</b>
1.1. Les tableaux .....	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
<b>Chapitre 2. Calcul et approximation de fonctions</b> .....	<b>19</b>
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
<b>Chapitre 3. Représentation des grandeurs physiques .....</b>	<b>45</b>
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
<b>Chapitre 4. L'interpolation .....</b>	<b>53</b>
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

<b>Chapitre 5. Résolution d'équations non linéaires</b> .....	<b>81</b>
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
<b>Chapitre 6. Résolution de systèmes d'équations linéaires</b> .....	<b>105</b>
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
<b>Chapitre 7. Polynômes orthogonaux .....</b>	<b>141</b>
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. Tschebychef .....	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
<b>Chapitre 8. Dérivation et intégration numériques .....</b>	<b>155</b>
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
<b>Chapitre 9. Analyse spectrale, transformation de Fourier numérique .....</b>	<b>183</b>
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
<b>Chapitre 10. Valeurs propres, vecteurs propres</b>	<b>205</b>
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
<b>Chapitre 11. Problèmes différentiels à conditions initiales .....</b>	<b>235</b>
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
<b>Chapitre 12. Problèmes à conditions aux limites et problèmes aux valeurs propres .....</b>	<b>281</b>
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



<b>Chapitre 13. Équations aux dérivées partielles</b> .....	<b>301</b>
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
 <b>Chapitre 14. Probabilités et erreurs</b> .....	 <b>335</b>
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 $\chi^2$ 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
<b>Chapitre 15. Méthodes de Monte Carlo .....</b>	<b>363</b>
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 $\pi$ .....	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
<b>Index .....</b>	<b>385</b>