

Christian GUILPIN

MANUEL DE CALCUL NUMÉRIQUE APPLIQUÉ



MANUEL DE CALCUL NUMÉRIQUE APPLIQUÉ

Christian Guilpin

*Maître de Conférence, responsable de l'enseignement des mathématiques appliquées
en maîtrise de Physique et Applications à l'université Paris VII-Denis Diderot*



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

ISBN : 2-86883-406-X

Tous droits de traduction, d'adaptation et de reproduction par tous procédés, réservés pour tous pays. La loi du 11 mars 1957 n'autorisant, aux termes des alinéas 2 et 3 de l'article 41, d'une part, que les « copies ou reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective », et d'autre part, que les analyses et les courtes citations dans un but d'exemple et d'illustration, « toute représentation intégrale, ou partielle, faite sans le consentement de l'auteur ou de ses ayants droit ou ayants cause est illicite » (alinéa 1^{er} de l'article 40). Cette représentation ou reproduction, par quelque procédé que ce soit, constituerait donc une contrefaçon sanctionnée par les articles 425 et suivants du code pénal.

© EDP Sciences 1999

Avant-propos

Ce livre de calcul appliqué trouve son origine dans un cours dispensé aux étudiants de maîtrise de physique et applications (MPA) à l'université Paris VII depuis 1984, ainsi que dans quelques préoccupations de recherche au laboratoire.

Ce manuel ne constitue pas à proprement parler un cours au sens usuel du mot, et si certains chapitres ont des liens évidents et s'enchaînent naturellement, d'autres, plus isolés, ont été réunis sous forme d'annexes pour préserver au mieux l'unité, mais leur importance n'est pas secondaire.

L'organisation de cet ouvrage vise à une présentation suffisamment concise et assimilable des algorithmes numériques fondamentaux, développés jusqu'à leur mise en œuvre, de telle sorte qu'ils soient susceptibles d'aider l'étudiant, le chercheur et l'ingénieur dans l'exercice quotidien de leur art : il s'agit de pouvoir obtenir des résultats numériques convenables chaque fois qu'une méthode analytique fait défaut.

Pour ce qui concerne certains théorèmes très importants, nous nous sommes parfois borné à les énoncer sans les démontrer, le contraire eut risqué de nous éloigner de notre préoccupation majeure : le résultat numérique ; cependant, les indications bibliographiques permettent d'obtenir aisément ces démonstrations qui sont classiques.

Les objectifs poursuivis se situent sur deux plans que l'on a coutume de séparer mais qui sont indissociables de notre point de vue : l'acquisition d'algorithmes numériques indispensable à la résolution de problèmes usuels et la maîtrise du traitement des données expérimentales selon la méthode statistique. Traiter les données de l'expérience impose l'usage de techniques numériques appropriées, et l'examen des résultats entachés d'erreur et d'incertitude impose l'usage de la statistique. La propagation des erreurs à travers les algorithmes relève d'une analyse subtile qui est éternellement omise tant elle est délicate. Nous avons tenté de l'effleurer et c'est une des raisons qui nous a poussé à développer l'étude des lois de distribution ainsi que leurs fondements dans une partie qui est davantage dévolue aux statistiques.

De même qu'il est impensable de vouloir apprendre à jouer du piano la veille de donner un concert, de même il est impensable de vouloir apprendre l'algorithmique numérique le jour où le besoin s'impose. Dans les deux cas, il convient de recourir aux gammes afin d'acquérir une solide expérience. En calcul numérique il n'y a pas de voie royale, et aucun algorithme n'est capable de fournir de résultats corrects quelles que soient les données fournies. Il est toujours possible de mettre en défaut une procédure et d'obtenir des résultats aberrants pourvu que l'on s'en donne la peine... Un très bel exemple est étudié à l'occasion de la résolution des systèmes linéaires dépendant d'une matrice de Hilbert.

L'expérience pratique prend alors toute sa valeur, et c'est ainsi que notre enseignement comporte une séance hebdomadaire de trois heures sur calculateur arithmétique. Peu importe

le langage et la manière, seul le « résultat correct » compte et ce n'est pas une mince affaire que de se faire une opinion sur les erreurs qui entachent les résultats finals. Ensuite viendront éventuellement se greffer les problèmes d'élégance et d'optimisation.

En aucun cas, cet enseignement n'a pour but d'explorer et de recenser tous les algorithmes ayant trait à un type de problèmes. Nous avons voulu présenter ceux qui se sont montrés paradigmatiques soit sous l'angle de la simplicité soit sous l'angle de l'efficacité. Il s'agit de construire des programmes que nous aurons soigneusement testés, dont nous connaissons les limites et qui rempliront peu à peu notre boîte à outils.

Pour simplifier, nous dirons que ce livre peut se subdiviser en trois parties à savoir :

1. Études d'algorithmes numériques et leur mise en oeuvre.
2. Analyse statistique des résultats d'expériences.
3. Annexes, problèmes et corrigés.

Nous l'avons déjà dit, les deux premières parties interfèrent partiellement, et c'est une des raisons pour laquelle nous avons renoncé à présenter un ouvrage où tout ce qui est étudié dans un chapitre s'appuie nécessairement sur ce qui a été établi précédemment. Par souci d'unité nous avons préféré regrouper les titres par centre d'intérêt. Ainsi, il nous est apparu plus intéressant d'avoir rassemblé l'étude des polynômes orthogonaux plutôt que d'avoir dispersé l'information dans différents chapitres concernant l'interpolation et l'intégration numérique.

Il aurait été dommage de ne pas avoir abordé, ne serait-ce que rapidement, les méthodes de Monte-Carlo d'une part, et les problèmes mal posés d'autre part. Ces domaines illustrent bien la synthèse des deux premières parties, d'autant plus qu'ils s'intègrent remarquablement dans les préoccupations des chercheurs et des ingénieurs. Qui, en physique, n'a pas eu à résoudre numériquement une équation de convolution? Qui n'a pas tenté la résolution d'un problème au moyen d'une simulation?

Pour terminer nous proposons un avant-dernier chapitre constitué d'un ensemble de problèmes et d'exercices qui illustrent quelques usages des méthodes qui ont été présentées; ils servent également à éclairer quelques points de théorie qui seraient venus alourdir le cours s'ils avaient été intégrés dans les divers chapitres : on montre par exemple que le coefficient de conformité de Pearson obéit bien à une loi du χ^2 . Le dernier chapitre donne les solutions des problèmes présentés.

La plupart des chapitres font l'objet d'une illustration et se terminent par des programmes écrits dans le langage C : il s'agit du langage de base qui assure la portabilité. Ce point de vue s'explique par la facilité qu'il y a à changer de langage : Fortran, Pascal, etc., sans avoir grand chose à modifier dans le programme source. On n'est pas obligé de partager ces vues, mais il est très facile de modifier les programmes proposés pour qu'ils apparaissent moins « archaïques ».

Pour en finir avec les algorithmes choisis et les programmes présentés, nous dirons qu'ils sont fournis **sans garantie** d'aucune sorte malgré le grand soin porté à ce travail. Ils peuvent comporter des imprécisions voire des imperfections, à ceci s'ajoute le fait qu'aucun algorithme n'est irréprochable dans la mesure où il est toujours possible de trouver des valeurs numériques qui le mette en défaut.

Bien sûr, nous formons le vœu que cet ouvrage puisse apporter une aide solide aux étudiants, ingénieurs et chercheurs pour lesquels il constituera un outil dont le rôle favorise la réalisation de sa propre boîte à outils.

La rédaction d'un ouvrage ne se réalise jamais dans l'isolement, et il m'a fallu bien des oreilles attentives, bien des lecteurs vigilants, bien des conseillers éclairés. L'instant est venu de remercier tous ceux qui, à quelque titre que ce soit, m'ont apporté une aide inconditionnelle, je citerai par ordre alphabétique : Claude Bardos, Jean Bornarel, Jacques Gacougnolle, Patricia Guilpin,

Michel Jacques, Claude Marti, Yvan Simon ainsi que l'équipe de physique théorique de Chaouqui Misbah.

Pour terminer, j'ajouterai une mention particulière à EDP Sciences qui m'a offert un contexte de travail optimum afin d'obtenir la meilleure réalisation possible.

Christian GUILPIN

PROGRAMMES SOURCES ACCOMPAGNANT CE MANUEL

Les programmes sources cités dans ce livre sont disponibles sur le site Web d'EDP Sciences (adresse : <http://www.edpsciences.com/guilpin/>).

Chapitre 2	rutisacc.c	sn_x.txt	dfftin.v.h	Chapitre 26
aitken_0.c	danilev.c	un_x.txt	tf_image.c	regres.c
epsilon_0.c	dsyslin.h	vn_x.txt	inv_imag.c	
richard.h				Annexe A
richar_0.c	Chapitre 6	Chapitre 12	Chapitre 17	sturm.c
epsilon_1.c	lagpoly.c	argent.c	fredh_1.c	
epsilon_2.c	ascend.c	cotes_1.c	gaussien.h	Annexe F
epsilon_3.c	descend.c	cotes_2.c	dconvol.c	bessel1n.c
epsilon_4.c	lispline.c		dconvol.h	bessel1f.c
aitken_2.c	spline.h	Chapitre 13	intmonte.h	bessel2n.c
kacmarz1.c	sudeter.c	epsilon.h	xaleamen.h	bessel2f.c
fredholm.c	multma.h	combina.h		besseljf.h
newton_1.c	transpos.h	retrogra.c	Chapitre 18	besseljn.h
	dsyslin.h	runge.c	calculpi.c	bessel2f.h
Chapitre 4	invers.h	pendule.c	matmonte.c	
dichot0.c		moulton.c	intmonte.c	Annexe I
itera.c	Chapitre 7	bashfort.c	recuit.c	dzeta0.c
newton1d.c	legendre.c	taylor.c		dzeta1.c
newtonpp.c	decomleg.c		Chapitre 20	grosys1.c
kacmarz.c	r_legend.c	Chapitre 14	gaussleg.h	jacobi0.c
newton2d.c	getname.h	triode.c		jacobi1.c
bairstow.c		chaleur.c	Chapitre 22	pendule0.c
bairstow.h	Chapitre 9	corde.c	khi2.h	predcor0.c
racine.h	laguerre.c		student.h	souriau0.c
	r_laguer.c	Chapitre 15		sudeter.c
Chapitre 5		echantil.c	Chapitre 24	syslinit.c
systlin.c	Chapitre 10	gibbs.c	histogra.c	tangent2.c
triangle.c	hermite.c	dirac.c	kolmogor.c	gradconj.c
trianlin.c	r_hermit.c	filtre.c		refrig1.c
hilbert.c			Chapitre 25	mathieu9.c
trianinv.c	Chapitre 11	Chapitre 16	teststat.c	vanderp0.c
leverier.c	rn_x.txt	dfft0.h	varian_1.c	card0.c
givens.c			varian_2.c	

Sommaire

AVANT-PROPOS	3
---------------------	----------

1. GÉNÉRALITÉS SUR LE CALCUL NUMÉRIQUE	17
---	-----------

1. La notion d'algorithme en calcul numérique	17
2. Le calcul numérique ne concerne que les nombres entiers.....	18
3. Le calcul numérique traite du problème pratique de l'approximation de fonctions explicites ou implicites.....	18
4. Solutions littérales et solutions analytiques	20
5. Que sait-on calculer rigoureusement ?	20
6. Les erreurs et les incertitudes	21
7. Un problème difficile : la propagation des erreurs en calcul automatique	22
8. Réexamen des erreurs du point de vue statistique	26
9. Sur la représentation des nombres en machine	27
10. Éléments de bibliographie	30

2. QUELQUES ALGORITHMES ACCÉLÉRATEURS DE LA CONVERGENCE DES SUITES	31
---	-----------

1. L'algorithme Δ^2 d'Aitken (1895–1967).....	31
2. Le procédé d'extrapolation de Richardson (1881–1953).....	32
3. Présentation de l'epsilon-algorithme scalaire.....	35
4. L'epsilon-algorithme vectoriel.....	37
5. L'epsilon-algorithme matriciel	37
6. Remarques et propriétés de l'epsilon-algorithme	38
7. Propriétés remarquables du procédé Δ^2 d'Aitken et de l'epsilon-algorithme.....	39
8. Éléments de bibliographie	42

3. LES DÉVELOPPEMENTS ASYMPTOTIQUES	43
1. Un exemple de développement asymptotique	43
2. Quelques propriétés utiles des développements asymptotiques	45
3. Développement asymptotique de quelques fonctions spéciales.....	47
4. Éléments de bibliographie	49
4. RÉOLUTION DES ÉQUATIONS NUMÉRIQUES	51
1. Généralités sur la résolution des équations $f(x) = 0$	51
2. Résolution d'un système non linéaire de deux équations à deux inconnues	59
3. Racines d'un polynôme	63
5. ÉLÉMENTS DE CALCUL MATRICIEL	69
1. Multiplication de deux matrices	69
2. Résolution d'un système linéaire.....	70
3. Inversion d'une matrice carrée d'ordre n	78
4. Calcul des valeurs propres	79
5. Éléments de bibliographie	87
6. L'INTERPOLATION	89
1. De la légitimité de l'interpolation.....	90
2. Le polynôme de Lagrange (1736–1813).....	90
3. Évaluation de l'erreur.....	92
4. Comment minimiser $E(x)$	93
5. Autre disposition pratique du calcul du polynôme de Lagrange	94
6. Cas où les abscisses sont en progression arithmétique	95
7. Les polynômes d'interpolation de Newton (1643–1727)	96
8. Le polynôme d'interpolation de Stirling (1692–1770)	98
9. Le polynôme d'interpolation de Bessel (1784–1846).....	100
10. Erreurs commises en utilisant les polynômes d'interpolation	100
11. Programmes déterminant les polynômes d'interpolation.....	101
12. Interpolation par les fonctions-spline	101
13. Les fonctions-spline du troisième degré	102
14. Résolution d'un système linéaire dépendant d'une matrice tridiagonale.....	104
15. Une application simple des polynômes d'interpolation	105
16. L'algorithme d'interpolation d'Aitken (1932).....	106
17. Approximation par une combinaison linéaire de fonctions.....	109
18. Éléments de bibliographie	111
7. LES POLYNÔMES DE LEGENDRE.	
MÉTHODE D'INTÉGRATION DE GAUSS-LEGENDRE	113
1. Les polynômes de Legendre	113
2. Méthode d'intégration de Gauss-Legendre	122

8. LES POLYNÔMES DE TCHEBYCHEFF.	
APPLICATION À LA MÉTHODE DE GAUSS-TCHEBYCHEFF	133
<hr/>	
1. Les polynômes de Tchebycheff (1821–1894)	133
2. Une propriété essentielle des polynômes de Tchebycheff à coefficient principal réduit ..	134
3. Les racines des polynômes de Tchebycheff $T_{n+1}(x)$	135
4. Calcul des poids H_k correspondant aux racines x_k du polynôme $T_{n+1}(x)$	135
5. Méthode d'intégration de Gauss-Tchebycheff	136
6. Calcul de l'intégrale $I = \int_{-a}^{+a} \frac{f(x)}{\sqrt{(x-a)(b-x)}} dx$	136
7. Calcul de l'erreur commise lors de l'approximation	137
8. Fonctions génératrices des polynômes de Tchebycheff.....	139
9. Un exemple d'intégration.....	139
9. LES POLYNÔMES DE LAGUERRE.	
MÉTHODE D'INTÉGRATION DE GAUSS-LAGUERRE	141
<hr/>	
1. Relation de récurrence entre trois polynômes consécutifs	141
2. Relation de récurrence faisant intervenir la dérivée	142
3. Les premiers polynômes de Laguerre	142
4. Calcul des coefficients des n premiers polynômes de Laguerre	143
5. Orthogonalité des polynômes de Laguerre	143
6. Calcul des racines des premiers polynômes de Laguerre	144
7. Calcul des poids H_k correspondant aux racines x_k	145
8. Calcul numérique des poids H_k associés aux racines	145
9. Calcul des intégrales du type $I = \int_0^{\infty} \exp(-x)f(x) dx$	145
10. Calcul de l'erreur commise lors de l'approximation	147
11. Fonction génératrice des polynômes de Laguerre	149
12. Calcul numérique de la transformée de Laplace	149
13. Appendice : Les polynômes de Laguerre généralisés	150
10. LES POLYNÔMES D'HERMITE.	
LA MÉTHODE D'INTÉGRATION DE GAUSS-HERMITE	153
<hr/>	
1. Relation de récurrence entre trois polynômes consécutifs	153
2. Relation de récurrence entre polynômes et dérivées	154
3. Les premiers polynômes d'Hermite	154
4. Calcul des coefficients des premiers polynômes d'Hermite	154
5. Orthogonalité des polynômes d'Hermite	154
6. Calcul des racines des premiers polynômes d'Hermite	155
7. Calcul des poids H_k correspondant aux racines x_k	156
8. Technique de calcul des intégrales du type $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-x^2/2) f(x) dx$	156
9. Autres notations très utiles	157
10. Calcul de l'erreur commise lors de l'approximation	160
11. Fonction génératrice des polynômes d'Hermite	162
12. Éléments de bibliographie	163

11. CALCUL DE QUELQUES INTÉGRALES RELEVANT DES ÉTUDES PRÉCÉDENTES AU MOYEN D'UN CHANGEMENT DE VARIABLE	165
<hr/>	
1. Intégrale de la forme : $I = \int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x}} dx$	165
2. Intégrale de la forme $I = \int_0^1 f(x)\sqrt{1-x} dx$	169
3. Intégrales de la forme $I = \int_{-1}^{+1} \sqrt{1-x^2} dx$	172
4. Intégrales de la forme $I = \int_0^{+1} f(x)\sqrt{\frac{x}{1-x}} dx$	173
5. Éléments de bibliographie	175
12. LES POLYNÔMES DE BERNOULLI, FORMULE D'EULER-MACLAURIN. MÉTHODE DE ROMBERG ET AUTRES TECHNIQUES D'INTÉGRATION	177
<hr/>	
1. Formule d'Euler-MacLaurin	177
2. Autres méthodes d'intégration	186
3. La méthode de Simpson (1811–1870)	188
4. Éléments de bibliographie	193
13. INTÉGRATION DES ÉQUATIONS DIFFÉRENTIELLES DANS LE CHAMP RÉEL	195
<hr/>	
1. Les équations différentielles du premier ordre	196
2. Les théorèmes d'Arzelà (1847–1912) et de Cauchy-Lipschitz (1832–1903)	196
3. La méthode de Picard (1858–1941)	197
4. Méthode de la série de Taylor	198
5. Méthodes de Runge (1856–1927) et Kutta (1867–1944)	199
6. Les méthodes d'Adams (1819–1892)	200
7. La méthode des différentiations rétrogrades	207
8. Les équations différentielles du deuxième ordre	210
9. Équations différentielles d'ordre supérieur à deux	214
10. Éléments de bibliographie	214
14. INTÉGRATION DES ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES	215
<hr/>	
1. Considérations sur les équations aux dérivées partielles d'ordre au plus égal à deux ...	216
2. Les opérateurs de différence	217
3. L'opérateur laplacien	219
4. Résolution des équations de type elliptique	220
5. Résolution des équations de type parabolique (méthode explicite)	224
6. Résolution des équations de type hyperbolique (méthode explicite)	225
7. Éléments de bibliographie	227

15. LES SÉRIES DE FOURIER	229
1. Petit aperçu historique	229
2. Orthogonalité des fonctions sinus et cosinus sur une période.....	231
3. Série de Fourier associée à une fonction périodique	232
4. Conditions d'égalité de $f(x)$ et de la série de Fourier associée	233
5. Quelques propriétés remarquables	234
6. Approximation des fonctions par une série de Fourier tronquée.....	235
7. Cas où la fonction est discontinue à l'origine	238
8. Le phénomène de Gibbs (1839–1903) et l'épsilon-algorithme.....	238
9. Représentation des séries de Fourier avec un terme de phase	241
10. Écriture du développement sous forme complexe.....	241
11. Approximation des fonctions au sens de Tchebycheff	242
12. Application des séries de Fourier au filtrage numérique.....	244
13. À propos du développement des fonctions non périodiques.....	246
14. Calcul des séries de Fourier à coefficients approchés dans L^2	246
15. Éléments de bibliographie	247
16. LES TRANSFORMÉES DE FOURIER	249
1. Extension des séries de Fourier au cas où la période est infinie	249
2. Conditions d'existence des transformées de Fourier dans les espaces L^1 et L^2	252
3. La transformée de Fourier dans l'espace L^1	253
4. Les transformées de Fourier dans l'espace L^2	255
5. Produit de convolution dans les espaces L^1 ou L^2	256
6. Sur le calcul numérique des transformées de Fourier	260
7. Cas des fonctions échantillonnées	260
8. Calcul par un algorithme ordinaire	261
9. L'algorithme de Cooley-Tukey (1915–)	262
10. Programmes de calcul des transformées de Fourier	266
11. Un problème fondamental : quelle doit être la période d'échantillonnage de la fonction $f(x)$?	267
12. La distribution de Dirac (1902–1984)	269
13. Transformées de Fourier multidimensionnelles.....	271
14. Éléments de bibliographie	272
17. INITIATION AUX PROBLÈMES MAL POSÉS : ÉQUATIONS INTÉGRALES, SYSTÈMES LINÉAIRES MAL CONDITIONNÉS ET ÉQUATIONS DE CONVOLUTION	273
1. Un exemple de problème mal posé : le calcul des séries de Fourier à coefficients approchés dans L^2	273
2. L'équation intégrale de Fredholm (1866–1927) de première espèce	274
3. Notion de problèmes bien et mal posés	276
4. Méthode de régularisation.....	276
5. Application à la résolution approchée des équations intégrales de Fredholm de première espèce	280
6. Résolution d'un système linéaire mal conditionné.....	282
7. Résolution des équations de convolution	283
8. Bibliographie	285

18. INTRODUCTION AUX MÉTHODES DE MONTE-CARLO	287
1. Le problème de Buffon	287
2. Générateurs de nombres pseudo aléatoires à distribution uniforme	288
3. Calcul de π	290
4. Calcul d'une intégrale définie	290
5. Intégration de l'équation de Laplace en un point	292
6. Inversion d'une matrice carrée d'ordre n	293
7. Méthode du recuit simulé : recherche du minimum absolu d'une fonction	294
8. Simulation d'autres lois de distribution	295
9. Éléments de bibliographie	297
19. ÉLÉMENTS DE CALCUL DES PROBABILITÉS	299
1. Introduction et notions fondamentales	299
2. Évaluation de la probabilité	300
3. Notion de variable aléatoire	301
4. Somme et produit d'événements. Théorèmes fondamentaux	301
5. Lois de répartition des variables aléatoires	305
6. L'inégalité de Bienaymé (1796–1878) - Tchebycheff	308
7. Le théorème de Bernoulli	309
8. Éléments de bibliographie	309
20. LA LOI BINOMIALE, LA LOI DE POISSON ET LA LOI DE GAUSS-LAPLACE	311
1. La loi binomiale, schéma de Bernoulli	311
2. Loi de Poisson	313
3. Loi de Gauss-Laplace	316
4. Changement de variable aléatoire dans les lois de répartition	322
5. Éléments de bibliographie	324
21. LA FONCTION CARACTÉRISTIQUE	325
1. Définition et propriétés	325
2. La distribution du χ^2	328
3. Éléments de bibliographie	329
22. LA LOI DU χ^2 ET LA LOI DE STUDENT	331
1. La loi du χ_n^2	331
2. Distribution d'une somme de deux variables aléatoires indépendantes obéissant chacune à une distribution du χ_n^2	333
3. La loi du χ_m^2 à m degrés de liberté tend asymptotiquement vers la loi de Gauss quand m tend vers l'infini	333
4. Distribution d'une variable aléatoire fonction de deux variables aléatoires indépendantes	334
5. La distribution de Student (W. Gosset) (1876–1937)	336
6. La distribution d'une somme de deux variables aléatoires indépendantes obéissant à une distribution de Student est-elle encore une distribution de Student?	339
7. La loi de Student à m degrés de liberté tend asymptotiquement vers la loi de Gauss quand m tend vers l'infini	339
8. Éléments de bibliographie	340

23. SYSTÈMES À PLUSIEURS VARIABLES ALÉATOIRES	341
1. Généralités	341
2. Système de variables aléatoires, fonction de répartition	341
3. Variables aléatoires liées et indépendantes	343
4. Caractéristiques numériques, covariance, coefficient de corrélation	343
5. Généralisation au cas de plusieurs variables	345
6. Quelques théorèmes importants.....	346
7. Propriétés du coefficient de corrélation (démonstrations).....	348
8. Éléments de bibliographie	349
24. CRITÈRES DE CONFORMITÉ	351
1. Généralités	351
2. Représentation des données numériques. Histogramme	352
3. Conformité entre une répartition théorique et une répartition expérimentale (ou répartition statistique)	353
4. Le χ_n^2 de Pearson (1857–1936)	353
5. Critère de Kolmogorov (1903–1987)	356
6. Estimation des paramètres d'une loi inconnue. Estimateurs.....	356
7. Éléments de bibliographie	359
25. ÉTUDE DES DÉPENDANCES DANS LE CAS LINÉAIRE	361
1. Les types de schémas de dépendance linéaire	361
2. Fondements de l'analyse de corrélation-régression.....	364
3. Conclusions.....	369
4. Éléments de bibliographie	370
26. ANALYSE DE CORRÉLATION ET DE RÉGRESSION	371
1. La corrélation	371
2. Régression linéaire	375
3. Éléments de bibliographie	379
ANNEXES	381
A. LES SUITES DE STURM. APPLICATION À LA DÉTERMINATION DU NOMBRE DE RACINES RÉELLES D'UN POLYNÔME	383
1. Notion de variations d'une suite numérique.....	383
2. Suite de Sturm générée à partir d'un polynôme	383
3. Quelques propriétés des suites de Sturm	384
4. Le théorème de Sturm (1829)	385
5. Disposition des calculs, schéma de Routh (1831–1907)	386
6. Quelques exemples de suites de Sturm	386
7. Mise en œuvre du théorème de Sturm.....	386
8. Éléments de bibliographie	387

B. POLYNÔMES ORTHOGONAUX RELATIVEMENT À UNE FONCTION POIDS. GÉNÉRALISATION DE LA MÉTHODE DE GAUSS	389
<hr/>	
1. Généralisation de la notion de polynômes orthogonaux.....	389
2. Décomposition d'une fonction $f(x)$ sur la base des polynômes $W_k(x)$ orthogonaux sur l'intervalle (a, b)	390
3. Racines des polynômes orthogonaux	392
4. Relation de récurrence entre trois polynômes orthogonaux consécutifs	393
5. Généralisation de la méthode de Gauss	393
6. Expression de l'erreur en remplaçant I par J	394
7. Éléments de bibliographie	395
C. LES FRACTIONS CONTINUES	397
<hr/>	
1. Un exemple de fraction continue.....	397
2. Les fractions continues finies	398
3. Les fractions continues infinies	400
4. Développement en fraction continue à partir d'un développement en série entière	401
5. Développement en fractions continues de séries usuelles	402
6. Développement en fraction continue à partir d'un produit infini.....	403
7. Éléments de bibliographie	404
D. LES APPROXIMANTS DE PADÉ ET DE MAEHLY	405
<hr/>	
1. Le théorème fondamental de Padé.....	405
2. Sur le calcul effectif des coefficients	407
3. Estimation de l'erreur commise	407
4. Développements de quelques fonctions en approximants de Padé.....	408
5. Généralisation des approximants de Padé, méthode de Maehly	414
6. Erreur liée à l'usage des approximants de Maehly.....	418
7. Difficultés liées à la recherche d'une généralisation	419
8. Éléments de bibliographie	419
E. CALCUL DES FONCTIONS DE BIBLIOTHÈQUE ÉLÉMENTAIRES	421
<hr/>	
1. Calcul de $\exp(x)$ pour x appartenant à $(-\infty, +\infty)$	421
2. Calcul de $\sin(x)$ et $\cos(x)$ pour x appartenant à $(-\infty, +\infty)$	423
3. Calcul de $\log_e(x)$ pour x appartenant à $(0, +\infty)$	425
4. Calcul de tangente et cotangente pour x appartenant à $(-\infty, +\infty)$	425
5. Calcul de $\operatorname{arctanh}(x)$ pour x appartenant à $(0, 1)$	426
6. Calcul de $\arctan(x)$ pour x appartenant à $(0, +\infty)$	426
7. Calcul de $\arcsin(x)$ et $\arccos(x)$ pour x appartenant à $(0, 1)$	426
8. Calcul de la racine carrée pour x appartenant à $(0, \infty)$	427
9. Éléments de bibliographie	427

F. CALCUL NUMÉRIQUE DES FONCTIONS DE BESSEL	429
1. L'équation différentielle des fonctions de Bessel (1784–1846).....	429
2. Relations de récurrence.....	430
3. Représentation de $J_\nu(x)$ par une intégrale définie.....	431
4. Technique de calcul.....	431
5. Calcul de l'erreur sur $J_0(x)$	432
6. Éléments de bibliographie.....	432
G. ÉLÉMENTS SUCCINCTS SUR LE TRAITEMENT DU SIGNAL	433
1. Puissance et énergie d'un signal.....	433
2. La corrélation et ses propriétés.....	435
3. Applications de la corrélation.....	437
4. La convolution.....	439
5. Notions sur le filtrage.....	440
6. Notion de bruit.....	441
7. Éléments de bibliographie.....	442
H. PROBLÈMES ET EXERCICES	443
1. Généralités sur le calcul numérique.....	443
2. Algorithmes accélérateurs de la convergence des suites.....	446
3. Les développements asymptotiques.....	447
4. Résolution des équations numériques.....	447
5. Éléments de calcul matriciel.....	453
6. L'interpolation.....	461
7. Intégration des équations différentielles dans le champ réel.....	462
8. Intégration des équations aux dérivées partielles.....	465
9. Les transformées de Fourier.....	467
10. Introduction aux méthodes de Monte-Carlo.....	470
11. Éléments de calcul des probabilités.....	471
12. Lois (Binomiale, Poisson, Gauss-Laplace).....	472
13. La fonction caractéristique.....	480
14. La loi du χ^2 et la loi de Student.....	481
15. Systèmes à plusieurs variables aléatoires.....	485
16. Critères de conformité.....	485
17. Étude des dépendances dans le cas linéaire.....	487
18. Analyse de corrélation.....	491
19. Les fractions continues.....	494
20. Éléments de traitement du signal.....	495

I. CORRIGÉS DES PROBLÈMES ET EXERCICES	497
<hr/>	
1. Généralités sur le calcul numérique.....	497
2. Algorithmes accélérateurs	504
3. Les développements asymptotiques.....	504
4. Résolution des équations numériques.....	505
5. Éléments de calcul matriciel	513
6. Interpolation	523
7. Intégration des équations différentielles dans le champ réel	523
8. Intégration des équations aux dérivées partielles	530
9. Les transformées de Fourier	530
10. Introduction aux méthodes de Monte-Carlo	532
11. Éléments de calcul des probabilités.....	532
12. Lois	534
13. La fonction caractéristique	543
14. La loi du χ^2 et la loi de Student	545
15. Systèmes à plusieurs variables aléatoires	550
16. Critères de conformité	551
17. Étude des dépendances dans le cas linéaire	553
18. Analyse de régression-corrélation	560
19. Les fractions continues	563
20. Éléments de traitement du signal.....	564
INDEX	567
<hr/>	

1 | Généralités sur le calcul numérique

Le calcul numérique est une branche des mathématiques appliquées qui étudie les méthodes pratiques destinées à fournir des solutions numériques aux problèmes formalisés dans le langage des mathématiques pures. La plupart du temps, ce sont les ingénieurs et les chercheurs qui se trouvent concernés par l'usage de ces méthodes pratiques, car ce sont en définitive les nombres qui vont retenir leur attention. Face à un jeu d'équations plus ou moins complexes, ils devront obtenir un ensemble de valeurs numériques qui pourra servir par exemple soit à la réalisation d'un édifice ou d'un prototype, soit à la confrontation des résultats expérimentaux et théoriques etc.

1. La notion d'algorithme en calcul numérique

Un algorithme est un procédé de calcul qui ne met en œuvre que des opérations arithmétiques et logiques. L'étymologie de ce mot est arabe et c'est une altération du nom du mathématicien Al-Khwârizmi (†812?), probablement sous l'influence du mot grec (repris par les latins) \acute{o} αριθμός, le nombre.

Quoi qu'il en soit, c'est une dénomination commode qui sert à désigner l'ensemble des opérations qui interviennent au cours d'une démonstration conduisant à l'énoncé d'un théorème. Cependant sa portée ne dépasse pas celle de la « prose que chacun fait sans le savoir », et en aucun cas cette définition ne permet de donner une manière de construction des algorithmes. Il s'agit donc d'un concept commode mais peu fécond qui sert à désigner un certain type d'organisation de propositions à caractère mathématique. Sans que rien ne soit changé, il est tout à fait possible de remplacer ce mot par procédé de calcul, technique de calcul, procédure...

Pour illustrer ce concept, on peut évoquer, par exemple, la technique de résolution des équations du deuxième degré à coefficients réels à condition toutefois d'admettre que l'on dispose outre les quatre opérations fondamentales (addition, soustraction, multiplication et division) de l'opération racine carrée. L'examen des mathématiques montre que le nombre d'opérations proposées dans un algorithme peut être infini (mais dénombrable), c'est le cas des développements en série de fonctions : série entière, série de Fourier, etc.

Le concept d'algorithme en calcul numérique est quelque peu plus restrictif : le nombre d'opérations élémentaires arithmétiques et logiques est obligatoirement fini. En outre, cela implique que l'on ne peut manipuler que des nombres admettant une représentation finie ce qui conduit à effectuer des troncatures et des arrondis au cours des opérations successives. Cette remarque en apparence triviale doit pourtant être présente à l'esprit lorsque l'on fait usage d'une machine arithmétique (mais aussi du calcul manuel...) : la première division venue, la première

racine carrée venue ont toutes les chances d'introduire un nombre dont la représentation impose une infinité de chiffres significatifs, il faudra les tronquer...

La connaissance de la manière dont les nombres sont représentés dans la machine utilisée est fondamentale en ce sens qu'elle permet l'estimation de la précision attachée aux résultats d'un calcul. Dès lors, on comprend très bien que la recherche d'une grande précision imposera une grande taille de mots-machine et par conséquent un grand temps de calcul. En revanche, une faible précision n'imposera qu'une petite taille du mot-machine ainsi qu'un faible temps de calcul. Le choix retenu est en général un compromis entre ces deux situations extrêmes.

Cette dernière étape intervient lors de l'évaluation de l'incertitude qui entache les résultats d'un calcul, mais ce n'est pas la seule source. Le problème général de l'évaluation des incertitudes et erreurs est délicat qui plus est lorsque l'on fait usage d'une machine ; nous l'aborderons un peu plus en détail dans quelques paragraphes.

2. Le calcul numérique ne concerne que les nombres entiers

Ce n'est pas une boutade, et il faut bien admettre que l'on ne peut manipuler (au sens étymologique) que des représentations finies. La représentation dite en virgule flottante éclaire ce point de vue car en fait elle traite de nombres ayant une certaine quantité fixe de chiffres significatifs (agrémenté d'un facteur de cadrage appelé exposant) et dans la réalité, à chaque opération élémentaire sur les nombres il y a une opération de cadrage suivie d'une opération arithmétique sur les nombres entiers, elle-même suivie éventuellement d'une opération de troncature ou d'arrondi.

Cette conception n'est pas tellement restrictive en soi, car les seules opérations arithmétiques pratiques que l'Homme est susceptible de réaliser ne peuvent que concerner les nombres admettant une représentation finie de symboles (chiffres significatifs) donc en fait des entiers. Pour ce qui concerne les machines arithmétiques, les deux représentations, entière et flottante, ne doivent pas masquer la réalité et il faut voir là uniquement deux représentations commodes. En fin de chapitre, on trouvera un paragraphe traitant de quelques représentations assez générales.

3. Le calcul numérique traite du problème pratique de l'approximation de fonctions explicites ou implicites

Un problème d'analyse se trouvant modélisé dans le langage des mathématiques pures, la première préoccupation consiste à rechercher la solution sous forme littérale à l'aide des fonctions connues qui sont les polynômes et les fonctions transcendantes élémentaires. On peut se poser la question de savoir si cette façon de concevoir est toujours possible.

Tous les problèmes ne sont pas algorithmiquement solubles, et force est de répondre non à la question posée. Pour s'en convaincre, il suffit de considérer un exemple, sous l'angle de l'histoire, qui illustre cette difficulté : la recherche des racines d'un polynôme de degré quelconque à coefficients réels.

Si l'équation du deuxième degré est connue depuis l'Antiquité, on peut dire qu'il revient à Al-Khwârizmi (fin VIII^e, début IX^e) et à Luca Pacioli (1445?-1514?) le fait d'avoir raffiné les solutions.

L'école italienne de Bologne s'attaque à l'équation du troisième degré ; on retiendra à son propos les noms de Tartaglia (1500?-1557), de Cardan (1501-1576) qui parvinrent à la solution au travers de défis et de provocations qui semblaient être coutumiers à cette époque. Signalons toutefois que les bases de l'étude sont dues à Del Ferro (1465?-1526).

Ensuite l'équation du quatrième degré fut abordée et résolue par Ferrari (1522–1565) qui fut un élève de Cardan. Plus tard, les mathématiciens s'intéressèrent tout naturellement à l'équation du cinquième degré et les recherches furent très riches d'enseignements dans la mesure où, selon toute vraisemblance pour la première fois dans l'histoire des sciences, le travail conduisit à l'énoncé d'un résultat négatif.

1. En 1608, Rothe (?–1617) émit une proposition selon laquelle toute équation algébrique de degré n possédait n racines réelles ou complexes, et Gauss (1777–1855) en effectua la démonstration rigoureuse en 1799.
2. Cette même année Ruffini (1765–1822) affirma l'impossibilité formelle d'obtenir la résolution des équations algébriques de degré supérieur à quatre. Il fallut attendre la publication des travaux d'Abel (1802–1829) pour obtenir la démonstration définitive de la proposition de Ruffini (1826).

Ce résumé de l'histoire des équations algébriques nous mène à deux types de remarques :

Remarque 1 : Le fait de poser un problème dont la solution existe n'est pas suffisant pour permettre d'exhiber effectivement ladite solution selon des moyens donnés. On peut se rappeler à ce propos le problème de la trisection de l'angle qui n'est pas algorithmiquement soluble si les moyens de construction autorisés sont la règle et le compas.

Aujourd'hui, on sait que les problèmes que l'on peut se poser sont de trois types à savoir :

- a. les problèmes algorithmiquement solubles, l'équation du deuxième degré par exemple ;
- b. les problèmes algorithmiquement non solubles, par exemple la quadrature du cercle à l'aide de la règle et du compas ;
- c. les problèmes indécidables pour lesquels on ne peut rien démontrer. Du reste, dans une axiomatique donnée, on sait qu'il existe des propositions vraies que l'on ne peut pas démontrer, à condition de considérer toutefois que les axiomes de l'arithmétique ne sont pas contradictoires (*cf.* Gödel (1906–1978)).

Remarque 2 : Ce n'est pas parce qu'un problème est algorithmiquement insoluble que l'on n'est pas en mesure de proposer une solution approchée — généralement avec une précision fixée à l'avance — et c'est justement la raison d'être du calcul numérique que de fournir de telles solutions ; par exemple, on verra comment calculer les racines d'un polynôme de degré quelconque à coefficients réels.

En terminant ce paragraphe, nous remarquerons que les problèmes de calcul numérique sont uniquement des problèmes d'approximation de fonctions au sens le plus large. Souvenons-nous d'une des premières équations différentielles que nous avons rencontrée en Physique, il s'agit de l'équation du pendule pesant assujéti à osciller dans un plan. On écrit traditionnellement l'équation à laquelle obéit son mouvement :

$$\frac{d^2\theta(t)}{dt^2} + \omega^2 \sin\theta(t) = 0,$$

où $\theta(t)$ est l'angle que le pendule fait avec la verticale à un instant donné, ω étant une constante dépendant de la longueur du pendule et de l'accélération. Alors, on apprend que l'on ne peut pas obtenir la solution sous forme littérale $(t, \theta_0, \theta'_0, \omega^2)$ à l'aide des transcendances usuelles (θ_0 et θ'_0 sont les conditions initiales sur l'angle et la vitesse angulaire). Pourtant, le théorème de Cauchy-Lipschitz nous permet d'affirmer l'existence et l'unicité d'une telle solution qui est de surcroît une fonction analytique.

La tradition veut également que l'on ne s'intéresse qu'au cas des petits angles pour lesquels on peut écrire le développement de $\sin\theta(t)$ au premier ordre. Alors, dans ce cas particulier, on sait