Université Gaston Berger
UFR SAT
Séction Mathématiques appliquées

Rapport de projet calcul scientifique

24 Mai 2019

Membres : Seyni KANE
Ramatoulaye DIALLO
Fatou Diop NGOM

Table de matiere

Introduction

L'objectif de l'analyse numerique est le calcul approximatif par des moyens informatiques de solutions à des problemes mathematiques. Pour se faire on se pose deux types de questions. D'une part, des questions analytiques telles que l'existence de solutions au probleme posé, l'unicité de cette solution. D'autre part, des questions d'analyse numerique, la construction des méthodes de calcul de valeurs approchées des solutions. Dans cet exposé nous etudierons quelques unes de ces méthodes.
Ainsi nous expliciterons d'abord les méthodes projectives de resolution de systemes lineaires *à* savoir la méthode du gradient et la méthode du grandient conjugué, ensuite nous passerons *à* l'étude des méthodes d'integration de GAUSS avant de finir avec quelques méthodes de resolutions d'equations differentielles ordinaires(EDO) *à* savoir celle d'EULER,de HEUN et de RUNGE_KUTTA.
En plus de l'exposé mathematique des méthodes, de leurs convergences et des algorithmes de resolution, nous donnerons quelques exemples d'applications.

Méthodes projective

À la base les méthodes projectives sont des méthodes d'optimisation. Ils partent du constat que pour résoudre l'équation matricielle $AX = b$ il suffit de determiner le minimum de la forme quadratique $J(X) = \frac{1}{2}X^{\mathrm{t}}AX - b^{\mathrm{t}}X$.
En effet si $A \in \mathbb{M}(\mathbb{R}^{\mathrm{n}})$ symetrique definie positive et $X \in \mathbb{R}^{\mathrm{n}}$, $b \in \mathbb{R}^{\mathrm{n}}$ son gradient sera donné par $\bigtriangledown J(X) = AX - b$. Donc le minimum de cette fonctionnelle est atteint pour $\bar{X} \in \mathbb{R}^{\mathrm{n}}$ lorsque $\bigtriangledown J(\bar{X}) = 0$.
D'ou $\bar{X}$ verifie l'équation $AX = b$.

Définiton

Soit $d \in \mathbb{R}^n$, $d \neq 0$. d est une direction de descente au piont $\bar{X}$ si et seulement si $\exists \delta > 0 / \forall \lambda \in]0, \delta[$, on a $J(\bar{X} + \lambda d) < J(\bar{X})$

Principe

L'idée est de :

- Trouver une direction d_k telle que $\triangledown J(X_k) d_k < 0$
- Trouver le pas α_k tel que $J(X_k + \alpha_k d_k) < J(X_k)$
- Calculer $X_{k+1} = X_k + \alpha_k d_k$

Methode du gradient

Pour cette methode on choisit la direction donnée par l'opposé du gradient, $d_k = - \bigtriangledown J(X_k)$.
Puis on cherche le pas optimal α_k le long de cette direction. Ce qui est equvalent au probléme

$$\left\{ \begin{array}{c} \text{Trouver}\alpha_k \in \mathbb{R} \\ J(X_k + \alpha_k d_k) < J(X_k) \end{array} \right.$$

C'est à dire minimiser $J(\bar{X} + \alpha\bar{d})$
Posons $g(\alpha) = J(\bar{X} + \alpha\bar{d})$. En devollopent l'expression on obtient $g(\alpha) = \frac{1}{2}\alpha^2\bar{d}^t A\bar{d} + \alpha(d^t A\bar{X} - b^t d)$.
Donc $\frac{dg(\alpha)}{d\alpha} = \alpha\bar{d}^t A\bar{d} + (\bar{d}^t A\bar{X} - \bar{d}^t b) + 0$
Donc $\frac{dg(\alpha)}{d\alpha} = \alpha\bar{d}^t A\bar{d} + \bar{d}^t(A\bar{X} - b)$.
Le α qui minimise $g(\alpha)$ verifie $\frac{dg(\alpha)}{d\alpha} = 0$.
Donc $\alpha = \frac{\bar{d}^t(b - A\bar{X})}{\bar{d}^t A\bar{d}}$. Or pour cette methode on a $d_k = - \bigtriangledown J(X_k) = b - AX_k$.

Méthode du gradient(Suite)

D'ou $\alpha_k = \frac{{d^t}_k d_k}{{d^t}_k A d_k}$. Ainsi on obtient le pas optimal le long de d_k ce qui nous permet de calculer $X_{k+1} = X_k + \alpha_k d_k$.

convergence

la Methode du gradiant à pas optimal est convergente. Sa vitesse de convergence dépend du conditionnnement de la matrice du systeme. En effet plus le cond(A) est proche de 1, plus la convergence est rapide.

Algorithme de la methode du gradient

$$
\left|
\begin{array}{r}
X_0 \text{ et } \epsilon \text{ donné} \\
k = 0 \qquad d_0 = -\bigtriangledown J(X_0) \\
\text{Tant que } \bigtriangledown J(X_k) > \epsilon \text{ faire} \\
k = k + 1; \\
d_k = b - AX_k; \\
\alpha_k = \frac{{d^t}_k d_k}{{d^t}_k A d_k}; \\
X_{k+1} = X_k + \alpha_k d_k;
\end{array}
\right.
$$

Définition

Soient $A \in \mathbb{M}(\mathbb{R}^{n})$ symetrique definie positive et $X \in \mathbb{R}^{n}$, $Y \in \mathbb{R}^{n}$.
On dit que X et Y sont A conjuguées si $X^{t}AY = 0$.

Methode du gradient conjugué

Cette methode est une amélioration de la methode du gradient. Elle consiste à construire de maniere iterative des directions mutuellements conjuguées. En effet les directions d_k sont construites de telle sorte que les grandients $\bigtriangledown J(X_k)$ soient orthogonaux entre eux.
C'est à dire $\bigtriangledown J(X_k)^{t} \bigtriangledown J(X_j) = 0, \forall j < k$.
Donc X_k realise le minimum de J sur lespace vectoriel
$E_k = X_k + Vect(\bigtriangledown J(X_0), ..., \bigtriangledown J(X_{k-1}))$ de demension k.
Quand $k = n$ on aura $E_k = \mathbb{R}^{n}$, ce qui prouve que l'algorithme de la methode converge au plus en n itération.

Algorithme de la methode du gradient conjugué

X_o et ϵ donné

$g_0 = b - AX_0;$

$d_0 = g_0;$

Pour $i = 0$ à n

$\rho = \frac{{g_i}^{\mathrm{t}} d_i}{{d_i}^{\mathrm{t}} A d_i};$ %pas optimal

$X_{i+1} = X_i + \rho d_i;$ %avacement optimal

$g_{i+1} = g_i + \rho A d_i;$ %calcule itératif du gradient

$\gamma = \frac{{g^{\mathrm{t}}}_{i+1} g_{i+1}}{{g^{\mathrm{t}}}_i g_i};$ %paramètre assurant $d^{\mathrm{t}}{}_{i+1} d_i = 0$

$d_{i+1} = g_{i+1} + \gamma d_i$

si $\bigtriangledown J(X_{i+1}) < \epsilon$ stop

fin.

Methode d'intrégration de GAUSS

L'objectif de cette section est de décrire les méthodes d'intégrations numeriques de GAUSS permettant d'évaluer des intégrales de fonctions dont les valeurs sont connues en un nombre fini de points.
Soit l'intégrale $I(f) = \int_a^b \omega(x) f(x) dx$, avec $a < b$ et ω une fonction appelée *fonction poids*.
Ici nous approchons I(f) par la formule de quadrature à (n+1) points.
$I(f) \simeq I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} H_i f(x_i)$, ou H_i ne dépend pas de f. On intérpole f par un polynôme de LAGRANGE P. En remplaçant P par sa valeur on obtient
$I(f) \simeq \int_a^b \omega(x) P(x_i) dx = \sum_{i=0}^{n} (\int_a^b \omega(x) L_i(x) dx) f(x_i)$
avec $L_i(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^{n} \frac{(x - x_k)}{(x_i - x_k)}$

Définition

La formule de quadrature est dite de type interpolation si dans $I(f) \simeq I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} H_i f(x_i)$ on a $H_i = \int_a^b \omega(x) L_i(x) dx$.

Soit $R_n(x) = \prod_{k=0}^{n} (x - x_k) \frac{f^{(n+1)}}{(n+1)!}(c)$ l'erreur de l'interpolation de LAGRANGE de f par P. On d'éfini l'éreure

$$\begin{aligned} R(f) = & I(f) - I_n(f) \\ = & \int_a^b \omega(x) f(x) dx - \sum_{i=0}^{n} H_i f(x_i) \\ = & \int_a^b \omega(x)(f(x) - P(x)) dx \\ = & \int_a^b \omega(x) R_n(x) dx \\ = & \int_a^b \omega(x) \prod_{k=0}^{n} (x - x_k) \frac{f^{(n+1)}}{(n+1)!}(c) dx \,, \qquad c \in [a, b]. \end{aligned}$$

Définition

- Une formule de quadrature de type intérpolation est dite *exacte* sur un espace ϑ si $\forall f \in \vartheta$, $R(f) = 0$.
- Soit $\beta = \{P_0, ..., P_{n+1}\}$ une base de polynômes orthogonales par la fonction de poids $\omega(x)$ sur $[a, b]$.
  Alors on a $\int_a^b P_i P_j \omega(x) dx = 0$ si $i \neq j$.

Principes des méthodes

Ces méthodes consistes à évaluer numeriquement $I(f) = \int_a^b \omega(x)f(x)dx$,$\omega(x)$ étant de signe constant sur $[a,b]$, sous la forme $I(f) \simeq I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} H_i f(x_i)$. Òu les paramétres $(H_i)_{0\leq i\leq n}$ et $(x_i)_{0\leq i\leq n}$ sont determinés de telles sorte qu'elles soient éxactes sur $\mathcal{P}_{\grave{n}}$,avec $\grave{n} > n$. C'est à dir $R(f) = 0$.
Pour se faire on choisit une base $\beta = \{P_0, ..., P_{n+1}\}$ de polynômes orthogonaux et on subdivise $[a,b]$ de sorte que les $(x_i)_{0\leq i\leq n}$ soient les $(n+1)$ racines de P_{n+1}. Pour se faire on developpe $V(x) = \prod_{i=0}^{n+1}(x - x_i)$ sur cette base, ce qui donne $V(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i P_i(x)$, car $d^0 V(x) = n+1$.
Si f est une fonction polynômes de degré $2n+1$ notons
$Q(x) = \frac{f^{(\mathrm{n+1})}}{(n+1)!}(x)$
On a $Q(x) = \sum_{i=0}^{n+1} b_i P_i(x)$, car $d^0 Q(x) = d^0 f^{(\mathrm{n+1})}(x) = n$.
Donc le reste $R_n(x)$ s'éxprime par

$$R_n(x) = \prod_{k=0}^{n}(x - x_k)\frac{f^{(\mathrm{n+1})}}{(n+1)!}(x)$$
$$= \sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n} a_i b_j P_i P_j(x) + a_{n+1}\sum_{i=0}^{n} P_i(x) P_{n+1}(x)$$

Principes des méthodes(Suite)

D'ou $I(f) = \sum_{i=0}^{n}(\int_a^b \omega(x)L_i(x)dx)f(x_i) + \int_a^b \omega(x)R_n(x)dx$
L'orthogonalité des polynômes nous donnent :
$\int_a^b \omega(x)R_n(x)dx = \sum_{i=0}^{n} a_i \int_a^b b_i P_i^2 \omega(x)dx.$
En choisissant les points $(x_i)_{0\leq i\leq n}$ comme les $(n+1)$ racines de P_{n+1}, on impose $a_i = 0$, pour $i = 0, ..., n$ et $a_{n+1} \neq 0$.
C'est à dir $V(x) = \sum_{i=0}^{n+1} a_i P_i(x) = a_{n+1}P_{n+1}(x)$
Donc $\int_a^b \omega(x)R_n(x)dx = 0$, d'ou $R(f) = 0$.
Par conséquent les méthodes de GAUSS appliquées à une fonction conduit à une approximation de la forme
$I(f) = \int_a^b \omega(x)f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} H_i f(x_i)$, avec $H_i = \int_a^b \omega(x)L_i(x)dx.$
La difference entre les méthodes de GAUSS réside sur le choix de la baseβ des polynômes orthogonales P_n.

GAUSS LÉGENDRE

Avec cette méthode on prend la famille des polynômes orthogonaux de LÉGENDRE. Ou

$$\left|\begin{array}{r} (n+1)P_n(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x) \\ P_0(x) = 1 \\ P_1(x) = x \\ \text{Et on prend } \omega(x) = 1 \end{array}\right.$$

Remarque

Les P_n sont solution de l'équation différentielle
$(1-x^2)y" - 2xy' + x(x+1)y = 0.$
Et vérifient la relation $(1-x^2)P'_n(x) = -nxP_n(x) + nP_{n-1}(x)$

GAUSS LAGUERRE

Ici on prend la famille des polynômes orthogonales de LAGUERRE.
Ou

$$\left| \begin{aligned} (n+1)L_n(x) = (2n+1-x)L_n(x) - nL_{n-1}(x) \\ L_0(x) = 1 \\ L_1(x) = 1-x \\ \text{Et on prend } \omega(x) = \exp(-x) \text{ sur }]0, +\infty] \end{aligned} \right.$$

Remarque

Les L_n sont solution de l'équation différentielle $xy" + (1-x)y' + xy = 0$.
Et vérifiant la relation $xL'_n(x) = -xL_n(x) - nL_{n-1}(x)$

GAUSS TCHEBYCHEV

Pour cette méthode on prend la famlle des polynômes orthogonales de TCHEBYCHEV. Ou

$$\left| \begin{array}{r} T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - nT_{n-1}(x) \\ T_0(x) = 1 \\ T_1(x) = x \\ \text{Et on prend } \omega(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \text{ sur } [-1,1] \end{array} \right.$$

Remarque

Les T_n sont solution de l'équation différentielle
$(1-x^2)y" - xy' + x^2y = 0.$
Et vérifient la relation $(1-x^2)T'_n(x) = -nxTn(x) + nT_{n-1}(x)$

GAUSS HERMITE

Ici cette méthode on prend la famlle des polynômes orthogonales d'HERMITE. Ou

$$\left|\begin{array}{r} H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \\ H_0(x) = 1 \\ H_1(x) = x \\ \text{Et on prend } \omega(x) = \exp(-x) \text{ sur } \mathbb{R} \end{array}\right.$$

Remarque

Les H_n sont solution de l'équation différentielle $y" - 2xy' + 2xy = 0$. Et vérifient la relation $H'_n(x) = -2xH_{n-1}(x)$

Équations différentielles ordinaire

Les équations différentilles ordinaires sont trés courantes en modélisation et souvent difficiles ou impossibles à résoudre de façon analytique. D'ou la nécessité de recourir à des méthodes numériques pour leur résolution.

Définition

Soit $y(x)$ définie sur $\mathbb{R}$ et de classe $\mathcal{C}^{\mathrm{p}}$.
On appélle équation différentielle d'ordre p une équation de la forme :
$F(x, y, y', y'', ..., y^{(\mathrm{p})}) = 0$
On appélle forme cannonique d'une EDO une expréssion du type :
$y^{(\mathrm{p})} = f(x, y, y', y'', ..., y^{(\mathrm{p}\text{-}1)})$.
Cependant l'orsqu'on procéde à des changements de variables dans la forme cannonique des EDO on peut se ramener à un systéme d'équation différentielle du premiéer ordre.

Définition(Suite)

En effet

$$\begin{cases} y_1 = y \\ y_2 = y^{'} \\ y_3 = y^{"} \\ . \\ . \\ . \\ y_p = y^{(\text{p-1})} \end{cases}$$

Ce qui donne finallement le sytéme suivant

$$\begin{cases} y^{'}{}_1 = y_2 \\ y^{'}{}_2 = y_3 \\ . \\ . \\ . \\ y^{'}{}_p = y^{(\text{p})} = f(x, y, y^{'}, y^{"}, ..., y^{(\text{p-1})}) \end{cases}$$

Probléme de CAUCHY

Ce probléme consiste à trouver une foction $y(x)$ définie sur $]a, b]$ telle que :

$$\begin{cases} y^{'}(x) = f(x, y(x)) \; ; \forall x \in [a, b] \\ y(a) = y_0 \end{cases}$$

Si la fontion f est continue et verifie la condition de LIPSCHITZ par rapport a $y(x)$, alors le probléme admet une unique solution.
Il se trouve que les EDO sont des problémes de CAUCHY

Principe géneral des méthodes

Pour obtenir une approximation de la solution $y(x)$ sur $[a, b]$, on estime y aux points x_i, pour $i = 0, 1, ...n$, constituants les neouds du maillage de $[a, b]$. L'écart h entre deux abscisses est appelé pas de discrétisation.
Ce pendant les méthodes de résolutions des EDO sont séparées en deux familles à savoir les méthodes à un pas et les méthodes à pas multiples.
Ici nous ne parlerons que des méthodes à un pas à voir celle D'EULER de RUNGE_KUTTA et de HEUN.

Méthodes à un pas

Formulation generale des méthodes :

- à un pas explicite :

$$\begin{cases} y_0 \text{ donné} \\ y_{n+1} = y_n + \phi(x_n, y_n, h) \end{cases}$$

  Ou la fonction le choix de la fontion $\phi(x_n, y_n, h) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(t, y(t))dt$ définie la méthode a utilisée.

- à un pas implicite :

$$\begin{cases} y_0 \text{ donné} \\ y_{n+1} = y_n + \phi(x_n, y_n, y_{n+1}, h) \end{cases}$$

  Ici nous aborderons que le cas explicite.

Méthode d'EULER(explicite)

Elle propose d'approcher $\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(t, y(t))dt$ par la méthode de rectangle à gauche à savoir : $\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(t, y(t))dt \approx hf(x_n, y(x_n))$.
Ce qui nous donne l'algorithme suivant :

$$\begin{cases} y_0 \text{ donné} \\ y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \end{cases}$$

Remarque

Pour la méthode d'EULER implicite on approche l'expression $\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(t, y(t))dt$ en utilisant la méthode du rectangle à droite et pour la méthode d'EULER améliorée on utilise la mméthode du point milieu.

Méthode de RUNGE KUTTA(explicite)

Ce sont des méthodes d'ordre élevé, obtenues à partir de formule d'intégration plus précise.
Une méthode explicite d'ordre 2, peut être obtenue par l'utilisation de la formule des trapézes. L'algorithme noté RK2 est donné par :

$$\left\{\begin{array}{r} y_0 \text{ donné} \\ {y^*}_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f(x_n, y(x_n)) + f(x_{n+1}, {y^*}_{n+1})] \end{array}\right.$$

Une autre méthode explicite d'ordre 4, peut être obtenue par l'utilisation de la formule SIMPSON. L'algorithme noté RK4 est donné par :

$$\left\{\begin{array}{r} y_0 \text{ donné} \\ k_1 = hf(x_n, y_n) \\ k_2 = hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}) \\ k_3 = hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}) \\ k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{array}\right.$$

Remarque

La méthode de HEUN est une amélioration de la méthode d'EULER. Notons également que la méthode de HEUN fait partie de la famille des methodes de RUNGE_KUTTA d'ordre 2.

Conclusion

On à vu quelques méthodes de resolution numerique. D'abord celles de systéme linéaire avec les méthodes projectives dont la vitesse de convergence peut être améliorer avec les techniques de préconditionnement de la matrice du systéme. Ensuite des methodes d'integration de GAUSS utilisant des familles de polynômes orthogonaux et une subdivision un peut special de l'intervalle d'intégration. Pour terminer avec quelques methodes de resoution d'EDO d'ordre et de pricision different.
Il faut aussi noté qu'ici on n'a pas pu fournir d'exemple faute de temps. De plus certains concepts auraient pus être mieux développés avec plus de précision vue létendu de l'importance de l'étude qui nous est proposée.

Sources

les sources PDF sont dans le dossier sources

Bibliographie

- *Analyse numérique et équation différentielle*
  Par Jean Pierre DEMAILLY
- *Initiation â l'analyse numérique*
  Par R.THEODORE
- *Analyse numérique*
  Par Eric CONON