

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Du calcul exact à l'évaluation numérique approchée</b> . . . . .	1
1.1	Pourquoi ne pas utiliser des méthodes mathématiques naïves ? . . . . .	3
1.1.1	Trop de calcul . . . . .	3
1.1.2	Trop sensible aux erreurs numériques . . . . .	3
1.1.3	Pas disponible . . . . .	4
1.2	Que faire, alors ? . . . . .	4
1.3	Comment est organisé ce livre ? . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Notations et normes</b> . . . . .	7
2.1	Introduction . . . . .	7
2.2	Scalars, vecteurs et matrices . . . . .	7
2.3	Dérivées . . . . .	8
2.4	Petit o et grand O . . . . .	11
2.5	Normes . . . . .	12
2.5.1	Normes vectorielles . . . . .	12
2.5.2	Normes matricielles . . . . .	13
2.5.3	Vitesses de convergence . . . . .	15
<b>3</b>	<b>Résoudre des systèmes d'équations linéaires</b> . . . . .	17
3.1	Introduction . . . . .	17
3.2	Exemples . . . . .	18
3.3	Conditionnement . . . . .	19
3.4	Approches à éviter . . . . .	22
3.5	Questions sur $\mathbf{A}$ . . . . .	22
3.6	Méthodes directes . . . . .	23
3.6.1	Substitution arrière ou avant . . . . .	23
3.6.2	Élimination gaussienne . . . . .	25
3.6.3	Factorisation LU . . . . .	25
3.6.4	Amélioration itérative . . . . .	29
3.6.5	Factorisation QR . . . . .	29
3.6.6	Décomposition en valeurs singulières . . . . .	33

3.7	Méthodes itératives	35
3.7.1	Méthodes itératives classiques	35
3.7.2	Itération dans les sous-espaces de Krylov	38
3.8	Tirer profit de la structure de $\mathbf{A}$	42
3.8.1	$\mathbf{A}$ est symétrique définie positive	42
3.8.2	$\mathbf{A}$ est une matrice de Toeplitz	43
3.8.3	$\mathbf{A}$ est une matrice de Vandermonde	43
3.8.4	$\mathbf{A}$ est creuse	43
3.9	Enjeux de complexité	44
3.9.1	Compter les flops	44
3.9.2	Faire faire le travail rapidement	45
3.10	Exemples MATLAB	47
3.10.1	$\mathbf{A}$ est dense	47
3.10.2	$\mathbf{A}$ est dense et symétrique définie positive	52
3.10.3	$\mathbf{A}$ est creuse	53
3.10.4	$\mathbf{A}$ est creuse et symétrique définie positive	54
3.11	En résumé	55
<b>4</b>	<b>Résoudre d'autres problèmes d'algèbre linéaire</b>	<b>57</b>
4.1	Inverser des matrices	57
4.2	Calculer des déterminants	58
4.3	Calculer des valeurs propres et des vecteurs propres	59
4.3.1	Approche à éviter	59
4.3.2	Exemples d'applications	60
4.3.3	Méthode de la puissance itérée	62
4.3.4	Méthode de la puissance inverse	63
4.3.5	Méthode de la puissance inverse avec décalage	64
4.3.6	Itération QR	65
4.3.7	Itération QR décalée	66
4.4	Exemples MATLAB	67
4.4.1	Inverser une matrice	67
4.4.2	Calculer un déterminant	69
4.4.3	Calculer des valeurs propres	70
4.4.4	Calculer des valeurs propres et des vecteurs propres	72
4.5	En résumé	73
<b>5</b>	<b>Interpolier et extrapoler</b>	<b>75</b>
5.1	Introduction	75
5.2	Exemples	76
5.3	Cas à une variable	77
5.3.1	Interpolation polynomiale	78
5.3.2	Interpolation par des splines cubiques	82
5.3.3	Interpolation rationnelle	84
5.3.4	Extrapolation de Richardson	85
5.4	Cas à plusieurs variables	87

5.4.1	Interpolation polynomiale	87
5.4.2	Interpolation par splines	88
5.4.3	Krigeage	88
5.5	Exemples MATLAB	91
5.6	En résumé	93
<b>6</b>	<b>Intégrer et différentier des fonctions</b>	<b>97</b>
6.1	Exemples	98
6.2	Intégrer des fonctions d'une variable	99
6.2.1	Méthodes de Newton-Cotes	100
6.2.2	Méthode de Romberg	104
6.2.3	Quadrature gaussienne	104
6.2.4	Intégrer via la résolution d'une EDO	106
6.3	Intégrer des fonctions de plusieurs variables	107
6.3.1	Intégrations à une dimension imbriquées	107
6.3.2	Intégration de Monte-Carlo	107
6.4	Différentier des fonctions d'une variable	110
6.4.1	Dérivées premières	110
6.4.2	Dérivées secondes	113
6.4.3	Extrapolation de Richardson	114
6.5	Différentier des fonctions de plusieurs variables	116
6.6	Différentiation automatique	117
6.6.1	Inconvénients de l'approximation par différences finies	117
6.6.2	Idée de base de la différentiation automatique	118
6.6.3	Évaluation rétrograde	120
6.6.4	Évaluation progressive	124
6.6.5	Extension à l'évaluation de hessiennes	126
6.7	Exemples MATLAB	128
6.7.1	Intégration	128
6.7.2	Différentiation	131
6.8	En résumé	134
<b>7</b>	<b>Résoudre des systèmes d'équations non linéaires</b>	<b>137</b>
7.1	Quelles différences avec le cas linéaire ?	137
7.2	Exemples	137
7.3	Une équation à une inconnue	139
7.3.1	Méthode de bisection	140
7.3.2	Méthode de point fixe	141
7.3.3	Méthode de la sécante	141
7.3.4	Méthode de Newton	142
7.4	Systèmes d'équations à plusieurs inconnues	146
7.4.1	Méthode de point fixe	146
7.4.2	Méthode de Newton	147
7.4.3	Méthode de Broyden	148
7.5	D'où partir ?	151

7.6	Quand s'arrêter ?	152
7.7	Exemples MATLAB	153
7.7.1	Une équation à une inconnue	153
7.7.2	Systèmes d'équations à plusieurs inconnues	158
7.8	En résumé	162
<b>8</b>	<b>Introduction à l'optimisation</b>	165
8.1	Un mot de mise en garde	165
8.2	Exemples	165
8.3	Taxonomie	166
8.4	Que diriez-vous d'un repas gratuit ?	170
8.4.1	Ça n'existe pas	171
8.4.2	Vous pouvez quand même obtenir un repas bon marché	172
8.5	En résumé	172
<b>9</b>	<b>Optimiser sans contrainte</b>	175
9.1	Conditions théoriques d'optimalité	175
9.2	Moindres carrés linéaires	180
9.2.1	Coût quadratique en l'erreur	181
9.2.2	Coût quadratique en les variables de décision	182
9.2.3	Moindres carrés linéaires via une factorisation QR	186
9.2.4	Moindres carrés linéaires via une SVD	188
9.2.5	Que faire si $\mathbf{F}^T \mathbf{F}$ n'est pas inversible ?	191
9.2.6	Régularisation de problèmes mal conditionnés	191
9.3	Méthodes itératives	192
9.3.1	Moindres carrés séparables	192
9.3.2	Recherche unidimensionnelle	193
9.3.3	Combinaison de recherches unidimensionnelles	197
9.3.4	Méthodes fondées sur un développement de Taylor du coût	199
9.3.5	Une méthode qui peut traiter des coûts non différentiables	214
9.4	Compléments	217
9.4.1	Optimisation robuste	217
9.4.2	Optimisation globale	220
9.4.3	Optimisation avec un budget serré	222
9.4.4	Optimisation multi-objectif	224
9.5	Exemples MATLAB	225
9.5.1	Moindres carrés sur un modèle polynomial multivarié	225
9.5.2	Estimation non linéaire	234
9.6	En résumé	239
<b>10</b>	<b>Optimiser sous contraintes</b>	243
10.1	Introduction	243
10.1.1	Analogie topographique	243
10.1.2	Motivations	244
10.1.3	Propriétés souhaitables de l'ensemble admissible	245

10.1.4	Se débarrasser de contraintes	245
10.2	Conditions théoriques d'optimalité	247
10.2.1	Contraintes d'égalité	247
10.2.2	Contraintes d'inégalité	251
10.2.3	Cas général : conditions KKT	254
10.3	Résoudre les équations KKT avec la méthode de Newton	255
10.4	Utiliser des fonctions de pénalisation ou barrières	255
10.4.1	Fonctions de pénalisation	256
10.4.2	Fonctions barrières	257
10.4.3	Lagrangiens augmentés	258
10.5	Programmation quadratique séquentielle	259
10.6	Programmation linéaire	260
10.6.1	Forme standard	263
10.6.2	Principe de la méthode du simplexe de Dantzig	264
10.6.3	La révolution des points intérieurs	270
10.7	Optimisation convexe	271
10.7.1	Ensembles admissibles convexes	271
10.7.2	Fonctions de coût convexes	272
10.7.3	Conditions théoriques d'optimalité	273
10.7.4	Formulation lagrangienne	273
10.7.5	Méthodes à points intérieurs	275
10.7.6	Retour à la programmation linéaire	277
10.8	Optimisation sous contraintes à petit budget	278
10.9	Exemples MATLAB	279
10.9.1	Programmation linéaire	279
10.9.2	Programmation non linéaire	280
10.10	En résumé	284
<b>11</b>	<b>Optimisation combinatoire</b>	<b>287</b>
11.1	Introduction	287
11.2	Recuit simulé	288
11.3	Exemple MATLAB	289
<b>12</b>	<b>Simuler des équations différentielles ordinaires</b>	<b>297</b>
12.1	Introduction	297
12.2	Problèmes aux valeurs initiales	301
12.2.1	Cas linéaire stationnaire	302
12.2.2	Cas général	303
12.2.3	Mise à l'échelle	312
12.2.4	Choisir la taille du pas	312
12.2.5	EDO raides	323
12.2.6	Équations algébro-différentielles	323
12.3	Problèmes aux limites	326
12.3.1	Un minuscule champ de bataille	327
12.3.2	Méthodes de tir	328

12.3.3	Méthode des différences finies	329
12.3.4	Méthodes par projection	331
12.4	Exemples MATLAB	335
12.4.1	Régions de stabilité absolue pour le test de Dahlquist	335
12.4.2	Influence de la raideur	338
12.4.3	Simulation pour l'estimation de paramètres	340
12.4.4	Problème aux limites	343
12.5	En résumé	353
<b>13</b>	<b>Simuler des équations aux dérivées partielles</b>	<b>355</b>
13.1	Introduction	355
13.2	Classification	356
13.2.1	EDP linéaires et non linéaires	356
13.2.2	Ordre d'une EDP	356
13.2.3	Types de conditions aux limites	357
13.2.4	Classification des EDP linéaires du second ordre	357
13.3	Méthode des différences finies	360
13.3.1	Discrétisation de l'EDP	361
13.3.2	Méthodes explicites et implicites	361
13.3.3	Illustration : schéma de Crank-Nicolson	362
13.3.4	Principal inconvénient de la méthode des différences finies	364
13.4	Quelques mots sur la méthode des éléments finis	364
13.4.1	Composants de base de la MEF	364
13.4.2	Approximation de la solution par des éléments finis	367
13.4.3	Tenir compte de l'EDP	367
13.5	Exemple MATLAB	369
13.6	En résumé	372
<b>14</b>	<b>Évaluer la précision des résultats</b>	<b>375</b>
14.1	Introduction	375
14.2	Types d'algorithmes numériques	375
14.2.1	Algorithmes vérifiables	376
14.2.2	Algorithmes finis exacts	376
14.2.3	Algorithmes itératifs exacts	376
14.2.4	Algorithmes approximatifs	377
14.3	Arrondi	379
14.3.1	Nombres réels et à virgule flottante	379
14.3.2	Norme IEEE 754	380
14.3.3	Erreurs dues aux arrondis	381
14.3.4	Modes d'arrondi	382
14.3.5	Bornes sur les erreurs d'arrondi	382
14.4	Effet cumulatif des erreurs dues aux arrondis	383
14.4.1	Représentations binaires normalisées	383
14.4.2	Addition (et soustraction)	383
14.4.3	Multiplication (et division)	384

14.4.4	En résumé .....	384
14.4.5	Perte de précision due à $n$ opérations arithmétiques .....	385
14.4.6	Cas particulier du produit scalaire .....	385
14.5	Classes de méthodes pour évaluer les erreurs numériques .....	386
14.5.1	Analyse mathématique a priori .....	386
14.5.2	Analyse par ordinateur .....	386
14.6	CESTAC/CADNA .....	394
14.6.1	Méthode .....	394
14.6.2	Conditions de validité .....	397
14.7	Exemples MATLAB .....	398
14.7.1	Commuter la direction d'arrondi .....	399
14.7.2	Calculer avec des intervalles .....	400
14.7.3	Utiliser CESTAC/CADNA .....	401
14.8	En résumé .....	402
<b>15</b>	<b>Aller plus loin grâce au WEB .....</b>	<b>403</b>
15.1	Moteurs de recherche .....	403
15.2	Encyclopédies .....	403
15.3	Entrepôts .....	404
15.4	Logiciels .....	406
15.4.1	Langages interprétés de haut niveau .....	406
15.4.2	Bibliothèques pour des langages compilés .....	407
15.4.3	Autres ressources pour le calcul scientifique .....	407
15.5	OpenCourseWare .....	408
	<b>Littérature .....</b>	<b>409</b>
	Littérature .....	409
	<b>Index .....</b>	<b>421</b>