

MÉTHODES NUMÉRIQUES ET OPTIMISATION

Théorie et pratique
pour l'ingénieur

Jean-Pierre Corriou



Table des matières

Avant-Propos	iii
Remerciements	v
Table des matières	vii
Nomenclature	xv
1 Interpolation et approximation	1
1.1 Introduction	1
1.2 Approximation d'une fonction par une autre fonction	1
1.2.1 Fonctions d'approximation	1
1.2.2 Approximation polynomiale	2
1.3 Détermination des polynômes d'interpolation	4
1.3.1 Calcul du polynôme d'interpolation	4
1.3.2 Polynôme d'interpolation de Newton	4
1.3.3 Polynôme d'interpolation de Lagrange	8
1.3.4 Interpolation polynomiale avec des points régulièrement espacés ..	10
1.3.5 Polynômes de Hermite	13
1.3.6 Polynômes de Chebyshev et points irrégulièrement espacés	14
1.3.7 Interpolation par polynôme cubique de Hermite	19
1.3.8 Interpolation par fonctions splines	23
1.3.9 Interpolation par des courbes splines paramétriques	28
1.4 Courbes de Bézier	28
1.5 Discussion et conclusion	31
1.6 Exercices	32
2 Intégration numérique	43
2.1 Introduction	43
2.2 Formules d'intégration de Newton et Cotes fermées	43
2.2.1 Intégration globale sur l'intervalle $[a, b]$	43
2.2.2 Intégration sur des sous-intervalles	46
2.3 Formules d'intégration de Newton et Cotes ouvertes	48
2.4 Conclusions sur les formules d'intégration de Newton et Cotes	49
2.5 Intégration répétée par dichotomie et intégration de Romberg	49

2.6	Intégration numérique avec des points irrégulièrement espacés	52
2.6.1	Rappels sur les polynômes orthogonaux	53
2.6.2	Quadrature de Gauss-Legendre	56
2.6.3	Quadrature de Gauss-Laguerre	60
2.6.4	Quadrature de Gauss-Chebyshev	60
2.6.5	Quadrature de Gauss-Hermite	60
2.7	Discussion et conclusion	60
2.8	Exercices	61
3	Résolution d'équations par des méthodes itératives	65
3.1	Introduction	65
3.2	Méthode de Graeffe	66
3.3	Méthode de Bernoulli	67
3.4	Méthode de Bairstow	70
3.5	Existence d'une racine d'une fonction	74
3.6	Méthodes de dichotomie et regula falsi	74
3.6.1	Méthode de dichotomie	75
3.6.2	Méthode regula falsi	75
3.7	Méthode des substitutions successives	77
3.8	Méthode de Newton et méthodes dérivées	79
3.8.1	Méthode de Newton	79
3.8.2	Méthode de la sécante	83
3.9	Méthode de Wegstein	85
3.10	Méthode de Aitken	87
3.11	Méthode d'homotopie	88
3.11.1	Introduction	88
3.11.2	Méthode de continuation	88
3.12	Discussion et conclusion	93
3.13	Exercices	94
4	Opérations numériques sur les matrices	101
4.1	Introduction	101
4.2	Rappels sur les matrices	101
4.3	Rappels sur les vecteurs	103
4.4	Transformations linéaires et sous-espaces	105
4.4.1	Théorème de Gershgorin	107
4.4.2	Théorème de Cayley-Hamilton et conséquences	108
4.4.3	Méthode de la puissance	109
4.5	Matrices semblables et polynômes de matrices	111
4.6	Matrices symétriques et matrices hermitiennes	112
4.7	Réduction de matrices sous une forme plus simple	116
4.8	Méthode LR de Rutishauser	117
4.9	Méthode de Householder	120
4.10	Méthode QR de Francis	125
4.11	Discussion et conclusion	135
4.12	Exercices	135

5	Résolution des systèmes d'équations algébriques	141
5.1	Introduction	141
5.2	Résolution de systèmes linéaires triangulaires	141
5.3	Résolution de systèmes linéaires : méthode d'élimination de Gauss	142
5.4	Calcul du déterminant d'une matrice	149
5.5	Algorithme de Gauss-Jordan	149
5.6	Factorisation LDL^T	153
5.7	Décomposition de Cholesky	153
5.8	Décomposition en valeurs singulières	155
5.9	Méthode des moindres carrés pour les systèmes linéaires sur-déterminés	157
5.10	Résolution itérative de grands systèmes linéaires (Jacobi, Gauss-Seidel)	159
5.11	Résolution de systèmes linéaires : cas d'une matrice tridiagonale	163
5.12	Résolution de systèmes non linéaires : méthode de Newton-Raphson	164
5.13	Résolution de systèmes non linéaires par optimisation	166
5.14	Discussion et conclusion	168
5.15	Exercices	168
6	Intégration numérique des équations différentielles ordinaires	177
6.1	Introduction	177
6.1.1	Equations différentielles linéaires et non-linéaires	178
6.1.2	Unicité de la solution	179
6.2	Problèmes à valeur initiale	179
6.2.1	Méthodes à un pas	180
6.2.2	Méthodes à pas multiples	195
6.2.3	Formules d'intégration ouvertes	195
6.3	Stabilité des méthodes d'intégration numérique	202
6.4	Cas des systèmes raides	205
6.5	Systèmes algébro-différentiels	206
6.6	Equations différentielles à frontières multiples	208
6.7	Discussion et conclusion	209
6.8	Exercices	209
7	Intégration numérique des équations aux dérivées partielles	223
7.1	Introduction	223
7.2	Quelques exemples de systèmes physiques	223
7.2.1	Transfert de chaleur par conduction	224
7.2.2	Transfert de matière par diffusion	225
7.2.3	Equation des ondes	225
7.2.4	Equation de Laplace	226
7.3	Propriétés des équations aux dérivées partielles	226
7.3.1	Généralités	226
7.3.2	Problème bien posé	227
7.3.3	Classification	228
7.3.4	Caractérisation des solutions	228
7.4	Méthode des caractéristiques	229
7.4.1	Equation aux dérivées partielles linéaire de premier ordre	229
7.4.2	Equation aux dérivées partielles non linéaire de premier ordre	236
7.4.3	Equation aux dérivées partielles quasi-linéaire de second ordre	236
7.5	Méthode des différences finies	239
7.5.1	Introduction	239

7.5.2	Discrétisation	239
7.6	Calcul automatique des dérivées partielles	264
7.6.1	Calcul de $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_0$ et $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_N$	264
7.6.2	Calcul de $\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_0$ et $\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_N$	266
7.6.3	Quelques autres schémas de différentiation	268
7.6.4	Dérivation numérique par les nombres complexes	269
7.7	Méthode des lignes	271
7.7.1	Cas de conditions aux limites de Dirichlet	271
7.7.2	Cas de conditions aux limites de Neumann	272
7.7.3	Application to the simulation of a heat exchanger	274
7.8	Différences finies sur un maillage irrégulier	277
7.9	Résolution d'une équation aux dérivées partielles par les splines	278
7.10	Méthodes spectrales	282
7.10.1	Méthode des résidus pondérés	282
7.10.2	Fonctions radiales de base	284
7.10.3	Collocation polynomiale, ODE à valeur initiale	290
7.10.4	Résidus pondérés, ODE à conditions aux limites	291
7.10.5	Résidus pondérés, équation aux dérivées partielles	297
7.11	Maillage mobile	300
7.11.1	Théorie	301
7.11.2	Test sur une fonction analytique	303
7.11.3	Implémentation sur des problèmes physiques	304
7.11.4	Brève présentation du cadre de travail général	306
7.11.5	Application : chromatographie en phase liquide, équilibre	307
7.11.6	Application : chromatographie en phase liquide, LDF rigoureux	308
7.12	Méthode des volumes finis	310
7.12.1	Introduction	310
7.12.2	Maillage	312
7.12.3	Intégration sur un volume de contrôle quelconque	314
7.12.4	Prise en compte des conditions aux limites à gauche	316
7.12.5	Prise en compte des conditions aux limites à droite	320
7.12.6	Deux milieux solides en contact, conductivités différentes	322
7.12.7	Résolution numérique	323
7.12.8	Problème bidimensionnel	328
7.12.9	Extension au cas des écoulements	328
7.12.10	Conservation appliquée à un volume de contrôle	329
7.12.11	Algorithme SIMPLER	330
7.13	Méthode des éléments finis	331
7.13.1	Etape 1 : Eléments et nœuds	333
7.13.2	Etape 2 : Fonctions d'interpolation polynomiales	334
7.13.3	Etapes 3-4 : matrices de conductance, vecteurs nodaux de flux	337
7.13.4	Convergence, compatibilité, complétude	364
7.13.5	Cas des systèmes dynamiques	365
7.13.6	Transfert de chaleur et transport de fluide dans un tube	371
7.13.7	Ecoulement dans un milieu poreux	378
7.13.8	Diffusion - Réaction chimique	378
7.13.9	Mécanique des fluides	381
7.13.10	Formulation bidimensionnelle (2D)	384

7.13.11	Exemples de simulations 2D et 3D	387
7.14	Méthode des éléments de frontière	391
7.14.1	Préliminaires mathématiques	392
7.14.2	Problèmes de potentiel	393
7.14.3	Méthode de la fonction de Green	395
7.14.4	Méthode analytique-numérique des éléments de frontière	400
7.14.5	Méthode des éléments de frontière en transfert de chaleur 2D	406
7.15	Discussion et conclusion	412
7.16	Exercices	413
8	Méthodes analytiques d'optimisation	427
8.1	Introduction	427
8.2	Quelques rappels mathématiques	427
8.3	Introduction	428
8.4	Fonctions d'une seule variable	429
8.4.1	Intervalle infini	429
8.4.2	Intervalle fini	433
8.4.3	Présence de discontinuités	433
8.5	Fonctions de plusieurs variables	434
8.5.1	Intervalle infini	434
8.5.2	Intervalle fini	434
8.5.3	Présence de discontinuités	434
8.6	Fonction soumise à des contraintes d'égalité	435
8.6.1	Méthode de Jacobi	435
8.6.2	Multiplicateurs de Lagrange	437
8.6.3	Signification des multiplicateurs de Lagrange	439
8.6.4	Conditions de minimum	439
8.6.5	Minimum, gradient projeté, contraintes d'égalité	439
8.7	Fonction soumise à des contraintes d'inégalité	444
8.7.1	Utilisation de variables d'écart	444
8.7.2	Paramètres de Karush-Kuhn-Tucker	445
8.7.3	Minimum, gradient projeté, contraintes d'inégalité	449
8.8	Fonction soumise à des contraintes d'égalité et d'inégalité	454
8.8.1	Position du problème	454
8.8.2	Dualité de Lagrange	456
8.9	Analyse de sensibilité	456
8.10	Discussion et conclusion	458
8.11	Exercices	458
9	Méthodes numériques d'optimisation	473
9.1	Introduction	473
9.2	Fonctions d'une seule variable	473
9.2.1	Méthode de dichotomie	473
9.2.2	Méthode de Newton	474
9.2.3	Méthode de Fibonacci	476
9.3	Fonctions de plusieurs variables	478
9.4	Méthodes de recherche directe	479
9.4.1	Recherche simple monovariante	479
9.4.2	Méthode du simplexe	480
9.4.3	Méthodes d'accélération	481

9.4.4	Simplexe de Nelder-Mead	485
9.4.5	Méthode du complexe de Box	488
9.4.6	Algorithme génétique	491
9.5	Méthodes de gradient	495
9.5.1	Cas d'une fonction quadratique	495
9.5.2	Cas d'une fonction non quadratique	498
9.5.3	Méthode de la plus grande pente	499
9.5.4	Problème de la recherche dans une direction \mathbf{s} donnée	500
9.5.5	Méthode des gradients conjugués	504
9.5.6	Méthode de Newton-Raphson	511
9.5.7	Méthode de quasi-Newton	515
9.5.8	Méthodes pour les sommes de carrés	519
9.5.9	Méthode de Gauss-Newton	520
9.5.10	Méthode de Levenberg-Marquardt	521
9.5.11	Approximation de quasi-Newton	524
9.5.12	Systèmes d'équations non linéaires	525
9.6	Discussion et conclusion	525
9.7	Exercices	526
10	Programmation linéaire	537
10.1	Introduction	537
10.2	Formulation du problème à partir d'exemples	538
10.2.1	Utilisation de variables d'écart	538
10.2.2	Utilisation de variables d'écart et de variables artificielles	539
10.2.3	Conditions d'optimalité	540
10.3	Résolution du problème, tableau du simplexe	541
10.3.1	Interprétation géométrique de l'exemple 10.1	541
10.3.2	Tableau du simplexe avec variables d'écart et artificielles	546
10.4	Solution théorique	549
10.5	Cas de contraintes simultanées d'inégalité et d'égalité	553
10.6	Dualité	556
10.6.1	Exemple de dualité	556
10.6.2	Démonstration du théorème de dualité	557
10.6.3	Lagrangian based demonstration of duality	561
10.7	Méthodes de point intérieur	564
10.7.1	Méthode de projection de Karmarkar	564
10.7.2	Transformation affine	570
10.8	Discussion et conclusion	573
10.9	Exercices	574
11	Optimisation quadratique et non linéaire	583
11.1	Introduction	583
11.2	Optimisation quadratique, Karush-Kuhn-Tucker, simplexe	584
11.2.1	Première présentation	584
11.2.2	Deuxième présentation	584
11.2.3	Solution sous forme d'un problème de simplexe	584
11.3	Optimisation quadratique, méthode de barrière	586
11.4	Optimisation non linéaire par optimisation quadratique successive	590
11.4.1	Introduction	590
11.4.2	Notion de région possible et de cône tangent	591

11.4.3	Optimisation quadratique successive	592
11.4.4	Spécificités et difficultés du problème SQP	596
11.5	Discussion et conclusion	602
11.6	Exercices	602
12	Optimisation dynamique	611
12.1	Introduction	611
12.2	Position du problème	612
12.3	Méthode variationnelle classique dans le cadre mathématique	615
12.3.1	Variation du critère	615
12.3.2	Problème variationnel sans contraintes, à limites fixes	617
12.3.3	Problème variationnel avec contraintes, cas général	617
12.3.4	Equation de Hamilton-Jacobi	620
12.4	Optimisation dynamique en temps continu	622
12.4.1	Méthodes variationnelles	622
12.4.2	Variation du critère	622
12.4.3	Equation et conditions d'Euler	624
12.4.4	Condition de Weierstrass et maximisation de l'hamiltonien	626
12.4.5	Equation et conditions de Hamilton-Jacobi	627
12.4.6	Principe du maximum	630
12.4.7	Arcs singuliers	632
12.4.8	Problèmes numériques	638
12.5	Programmation dynamique (temps discret)	643
12.5.1	Programmation dynamique classique	643
12.5.2	Equation de Hamilton-Jacobi-Bellman	651
12.6	Conclusion	652
12.7	Exercices	653
Index	663