Génie Biologique - S1 - Mathématiques

Résumé de cours

Table des matières

1 Dérivation et approximation affine (6h)

Rappels

- On dérive une fonction, pas un chiffre
- Définition : quand cette limite existe,

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{x+h-x}.$$

1.1 Dérivées de fonctions composées

On connaît les dérivées des fonctions usuelles et on sait dériver une fonction construite à partir d'autres fonctions

1.1.1 Dérivées usuelles

Pour toute fonction dérivable u et tout entier relatif n

- $(\cos \circ u)' = -u'(\sin \circ u)$
- $(\sin \circ u)' = u'(\cos \circ u)$
- $(e^u)' = u'e^u$
- $(\ln u)' = \frac{u'}{u}$
- $(u^n)' = u'nu^{n-1}$
- $(\sqrt{u})' = \frac{u'}{2\sqrt{u}}$

1.1.2 Opérations sur les dérivées

Soient α un nombre réel et u, v et f des fonctions

- $(\alpha u)' = \alpha u'$
- $(u+v)' = u' + v'$
- $(uv)' = u'v + uv'$
- $\left(\frac{u}{v}\right)' = \frac{u'v - uv'}{v^2}$
- $\big(f \circ u)' = u'(f' \circ u)$

Exemple $f = \sin \circ \ln$, c'est à dire $f(x) = \sin\big(\ln(x)\big)$, donne $f'(x) = \frac{1}{x}\cos\big(\ln(x)\big)$.

1.2 Dérivées partielles

Pour des fonctions de plusieurs variables, on peut dériver par rapport à toutes les variables d'un coup (nous ne le ferons pas) ou par rapport à une seule à la fois : dérivation partielle

1.2.1 Définition

Soit $f : D \to \mathbb{R}$ définie par $f : (x_1, x_2 \dots x_n) \mapsto f(x_1, x_2 \dots x_n)$ une fonction. On appelle dérivée partielle par rapport à x_i la dérivée obtenue en considérant toutes les autres variables comme des constantes. On note cette fonction

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} \text{ ou } \partial_{x_i} f$$

Exemple $f(x, y, z) = \sin(3x + xy)$, $\partial_x f(x, y, z) = (3 + y)\cos(3x + xy)$ et $\partial_y f(x, y, z) = (x)\cos(3x + xy)$.

1.2.2 Ordre de dérivation (Théorème de Schwarz)

Si $\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)$ et $\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)$ existent et sont continues, alors elles sont égales et on peut noter le tout

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \text{ ou } \partial^2_{xy} f.$$

1.3 Approximation affine

Par définition, si la dérivée existe, pour des h petits,

$$f'(x) \approx \frac{f(x + h) - f(x)}{h}.$$

1.3.1 Approximation

Si on connaît la valeur $f(x_0)$ on peut donner une approximation des valeurs $f(x)$, du moment que x est *assez proche* de x_0 : si la dérivée existe, pour des h petits,

$$f(x + h) \approx f(x) + hf'(x).$$

Si on a plusieurs variables, on additionne les corrections obtenues pour chaque variable :

$$f(x_1 + h_1, x_2 + h_2, \dots) \approx f(x_1, x_2, \dots) + h_1 \partial_{x_1} f(x_1, x_2, \dots) + h_2 \partial_{x_2} f(x_1, x_2, \dots) + \dots.$$

Exemple $\sqrt{1.01} \approx \sqrt{1} + 0.01 \times \frac{1}{2\sqrt{1}} = 1.005$ (valeur exacte : 1.0048).

1.3.2 Tangente à f en x

C'est la droite de l'approximation affine : $T(x + h) = f(x) + hf'(x)$. Si on considère que le point de tangence x est fixé et que c'est h qui bouge, on peut changer les variables pour récrire la tangente

$$T(y) = f(x) + (y - x)f'(x).$$

1.3.3 Erreur d'estimation

Si on connaît l'erreur faire sur une mesure, on peut avoir une idée de l'erreur qu'il y aura sur le résultat de la fonction :

$$\begin{aligned}\Delta_f &= |f(x_{mesure}) - f(x_{exact})| \\ &\approx |(x_{mesure} - x_{exact}) f'(x_{mesure})| \\ &\leqslant |(x_{mesure} - x_{exact})| \, |f'(x_{mesure})| \, .\end{aligned}$$

C'est à dire :

$$\Delta_f \leqslant \Delta_x \, |f'(x_{mesure})| \, .$$

On utilise aussi parfois l'erreur relative $\frac{\Delta_f}{|f(x_{mesure})|}$ (exprimée en %).

Enfin, si on a plusieurs variables incertaines, on additionne les majorations d'erreurs obtenues pour chaque variable :

$$\Delta_f \leqslant \sum_{i=1,2\ldots} \Delta_{x_i} \, |\partial_{x_i} f(x_{mesure})| \, .$$

Dérivation - Exercices

Exercice 1 Pour les fonctions suivantes, calculer les cinq dérivées partielles $\frac{\partial f}{\partial x}(x,y)$, $\frac{\partial f}{\partial y}(x,y)$, $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x,y)$, $\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x,y)$ et $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x,y)$ puis les deux valeurs $\frac{\partial f}{\partial x}(\pi, 2\pi)$ et $\frac{\partial f}{\partial y}(\pi, 2\pi)$.

1. $f(x,y) = 16 - x^2 - e^{3x-y}$
2. $f(x,y) = xy + \ln(3x^2 - \cos(y))$
3. $f(x,y) = \sqrt{\sin(x) + 5y}$

Exercice 2 L'equation d'état des gaz parfaits est donnée par :

$$PV \;=\; nRT.$$

1. On a donc $P = \frac{nRT}{V}$. C'est à dire qu'on peut voir P comme une fonction des variables n, R, T et V. Calculer alors $\partial_V P$, $\partial_T P$, $\partial_T\big(\partial_V P\big)$ et $\partial_V\big(\partial_T P\big)$ et vérifier l'égalité $\frac{\partial^2 P}{\partial V \partial T} = \frac{\partial^2 P}{\partial T \partial V}$.
2. Démontrer la relation suivante :
$$\frac{\partial T}{\partial P} \times \frac{\partial P}{\partial V} \times \frac{\partial V}{\partial T} = -1$$
(sous entendu pour tout P, V, n, R, T).

Exercice 3

1. Calculer un équivalent de la fonction sin dans le cas particulier où $x = 0$.
2. Calculer un équivalent de la fonction exp dans le cas particulier où $x = 0$.
3. Sans calculette, donner une approximation de la valeur $f(6.9, 2.06)$ ou la fonction f est définie par $f(x,y) = \ln(x - 3y)$.

Exercice 4 La concentration C d'un produit donné au cours du temps est modélisé par la fonction

$$C(t) := C_0 e^{kt}.$$

On donne $C_0 = 20 \pm 0.1\text{gL}^{-1}$, $k = 0.2 \pm 0.01\text{min}^{-1}$ et $t = 5.2 \pm 0.1\text{min}$. Calculer les dérivées partielles par rapport à C_0, k et t et en déduire une majoration de l'erreur absolue ΔC sur la mesure de C.

Réponse 1

1. — $\partial_x f(x,y) = -2x - 3e^{3x-y}$
   — $\partial_y f(x,y) = e^{3x-y}$
   — $\partial_{x^2} f(x,y) = -2 - 9e^{3x-y}$
   — $\partial_{y^2} f(x,y) = -e^{3x-y}$
   — $\partial_{xy} f(x,y) = 3e^{3x-y}$
   — $\partial_x f(\pi, 2\pi) = -2\pi - 3e^{\pi}$
   — $\partial_y f(\pi, 2\pi) = e^{\pi}$
2. — $\partial_x f(x,y) = y + \frac{6x}{3x^2 - \cos(y)}$
   — $\partial_y f(x,y) = x + \frac{\sin(y)}{3x^2 - \cos(y)}$

- $\partial_{x^2} f(x,y) = -\frac{18x^2+6\cos(y)}{\left(3x^2-\cos(y)\right)^2}$
- $\partial_{y^2} f(x,y) = \frac{\cos(y)\times\left(3x^2-\cos(y)\right)-\left(\sin(y)\right)^2}{\left(3x^2-\cos(y)\right)^2}$
- $\partial_{xy} f(x,y) = 1 - \frac{6x\sin(y)}{\left(3x^2-\cos(y)\right)^2}$
- $\partial_x f(\pi, 2\pi) = 2\pi + \frac{6\pi}{3\pi^2-1}$
- $\partial_y f(\pi, 2\pi) = \pi$

3. — $\partial_x f(x,y) = \frac{\cos(x)}{2\sqrt{\sin(x)+5y}}$
   - $\partial_y f(x,y) = \frac{5}{2\sqrt{\sin(x)+5y}}$
   - $\partial_{x^2} f(x,y) = -\frac{1+(\sin(x))^2+10y\sin(x)}{4(\sin(x)+5y)^{3/2}}$
   - $\partial_{y^2} f(x,y) = -\frac{25}{4(\sin(x)+5y)^{3/2}}$
   - $\partial_{xy} f(x,y) = -\frac{5\cos(x)}{4(\sin(x)+5y)^{3/2}}$
   - $\partial_x f(\pi, 2\pi) = -\frac{1}{2\sqrt{10\pi}}$
   - $\partial_y f(\pi, 2\pi) = \frac{5}{2\sqrt{10\pi}}$

Réponse 2

1. — $\partial_V P = -\frac{nRT}{V^2}$
   - $\partial_T P = \frac{nR}{V}$
   - $\partial_T\left(\partial_V P\right) = \partial_V\left(\partial_T P\right) = -\frac{nR}{V^2}$
2. — $\partial_P T = \frac{V}{nR}$
   - $\partial_V P = -\frac{nRT}{V^2}$
   - $\partial_T V = \frac{nR}{P}$

Réponse 3

1. Avec h assez petit, $\sin(h) \approx h$.
2. Avec h assez petit, $\exp(h) \approx 1 + h$.
3. $f(6.9, 2.06) \approx -0.28$.

Réponse 4

- $\frac{\partial C}{\partial C_0} = e^{kt}$, $\frac{\partial C}{\partial k} = tC_0e^{kt}$, $\frac{\partial C}{\partial t} = kC_0e^{kt}$.
- Il en vient $\Delta C \leqslant \Delta_{C_0}|e^{kt}| + \Delta_k|tC_0e^{kt}| + \Delta_t|kC_0e^{kt}| \approx 4.36\text{gL}^{-1}$. Ainsi, $C = 56.6 \pm 4.4\text{gL}^{-1}$.

2 Equations différentielles linéaires du premier ordre (6h)

Les équations différentielles sont des équations dont l'inconnue est une fonctions, et qui portent sur les dérivées de cette inconnue.

Linéaires signifie qu'il n'y aura que du y, du y', y'' ...mais pas de y^2, ni de $\sin(y')$ ...

De premier ordre signifie qu'il n'y aura que du y et du y', mais pas de dérivées secondes ou autres

- Vérifier qu'une proposition est vraiment une solution est facile
- Trouver une solution explicite, à partir des fonctions usuelles, est généralement impossible ; mais pour certains cas particuliers, il existe des méthodes systématiques

On s'intéressera uniquement aux équations du type

$$y'(x) + a(x)y(x) = b(x)$$

où a est une fonction donnée, b une fonction appelée second membre et y est la fonction inconnue.

2.1 Solution sans second membre

On considère donc une équation du type

$$y_0' + ay_0 = 0.$$

Les solutions sont les $y_0(x) = ke^{-A(x)}$ où A est une primitive de a et où k est une constante.

2.2 Solution particulière

On considère maintenant l'équation complète, mais on ne cherche qu'un cas particulier qui soit valide pour

$$y_p' + ay_p = b.$$

2.2.1 Si b est "assez simple"

On propose une solution particulière ayant la même forme que le second membre b :

- Si $b = P_n(x)$ est une fonction polynôme de degré n, on propose : $y_p(x) = k_n x^n + k_{n-1}x^{n-1} + \cdots + k_1 x + k_0$
- Si $b = P_n(x)e^{\gamma x}$, on propose $y_p(x) = \big(k_n x^n + k_{n-1}x^{n-1} + \cdots + k_1 x + k_0\big)e^{\gamma x}$
- Si $b = \alpha \sin(\omega x) + \beta \cos(\omega x)$, on propose $y_p(x) = k_1 \cos(\omega x) + k_0 \sin(\omega x)$
- Si $b = \big(\alpha \sin(\omega x) + \beta \cos(\omega x)\big)e^{\gamma x}$, on propose $y_p(x) = \big(k_1 \cos(\omega x) + k_0 \sin(\omega x)\big)e^{\gamma x}$

On dérive ensuite la proposition, et on remplace y et y' par la proposition et sa dérivée dans l'équation complète. Les coefficients $k_0, k_1, \ldots$ sont alors trouvés par identification suivant les puissances des x dans le cas du polynôme, et suivant le couple sin / cos dans le cas d'un second membre avec du sin et/ou du cos.

— Si cette identification ne peut pas marcher, on utilise la proposition du départ multipliée par x.
— Si cela échoue encore, on essaie avec la proposition du départ multipliée par x^2.
— Tester une proposition est facile, et dans le pire des cas, on fait trois essais.

2.2.2 Si b est une somme d'éléments "assez simples"

On fait une proposition, en appliquant l'identification ci-dessus, pour chaque terme de la somme. La solution particulière sera ensuite la somme de ces propositions.

2.3 Solution générale

L'ensemble des solutions (il n'y a pas que le cas particulier proposé ci-dessus) à l'équation

$$y' + ay = b$$

est de la forme $\{y = y_0 + y_p\}$

2.4 Condition intiale

Une condition, généralement appelée initiale, de la forme $y(x_0) = \eta$, x_0 et η étant donnés, permet de fixer la constante et on se retrouve alors avec une solution unique pour le système

$$\begin{cases} y' + ay & = b \\ y(x_0) & = \eta \end{cases}$$

Equations différentielles - Exercices

Exercice 1 Résoudre par identification l'équation différentielle $y' + y = f(x)$ avec

1. $f(x) = x^2$
2. $f(x) = e^x$
3. $f(x) = \sin(x)$
4. $f(x) = e^{-x}$

Exercice 2 Résoudre l'équation $5y' - 3y + 3x^3 - 4 = 0$ avec la condition initiale $y(0) = 26$.

Exercice 3 Résoudre l'équation $y' + xy = x$ avec la condition initiale $y(0) = 0$.

Exercice 4 Un médicament, administré par voie intraveineuse, est éliminé par filtration rénale. On suppose que la durée de l'injection est négligeable. Donc à $t = 0$, toute la quantité de médicament injectée, notée Q_0, est passée dans le sang. En notant $E(t)$ l'élimination du médicament dans les reins et $Q(t)$ la quantité restante, on a alors $Q(t) = Q_0 - E(t)$. Admettons que la vitesse d'élimination du médicament dans les reins est proportionnelle à la quantité présente dans le sang : $E'(t) = k_e Q(t)$. Calculer la quantité de médicament dans le sang en fonction du temps.

Exercice 5 Une quantité Q_0 d'un médicament est administrée par voie orale dans le système digestif, d'où il est absorbé par le sang puis enfin éliminée par filtration rénale.

On suppose que l'administration du médicament se fait en une fois dans un temps négligeable et on note $D(t)$ la quantité de médicament dans le système digestif. L'absorption du médicament (A) par le sang se fait à une vitesse proportionnelle à la quantité restante (de médicament dans le système digestif) : $D(t) = Q_0 - A(t)$ et $A'(t) = k_a D(t)$. Soit alors $S(t)$ la quantité de médicament dans le sang, donnée par l'apport venant du système digestif (A) et par l'élimination dans les reins (E) : $S = A - E$; La vitesse de l'élimination étant, quand à elle, proportionnelle à la quantité présente dans le sang.

Calculer la quantité de médicament présente dans le sang en fonction du temps (on notera k_a et k_e les constantes d'absorption et d'élimination et on admet que $k_a > k_e$).

Réponse 1

1. $y(x) = (ke^{-x}) + (x^2 - 2x + 2)$
2. $y(x) = (ke^{-x}) + (\frac{e^x}{2})$
3. $y(x) = (ke^{-x}) + (\frac{\sin(x) - \cos(x)}{2})$
4. $y(x) = (ke^{-x}) + (xe^{-x})$

Réponse 2 $y(x) = -\frac{4}{9}e^{\frac{3x}{5}} + x^3 + 5x^2 + \frac{50}{3}x + \frac{238}{9}$

Réponse 3 $y(x) = -e^{\frac{-x^2}{2}} + 1$

Réponse 4 $Q(t) = Q_0 e^{-k_e t}$

Réponse 5

1. $D' = -k_a D \implies D(t) = Q_0 e^{-k_a t}$
2. $S' = +k_a D - k_e S \implies S(t) = \frac{k_a Q_0}{k_a - k_e} \left(e^{-k_e t} - e^{-k_a t}\right)$

3 Corrélation linéaire et régression linéaire (4h)

— On considère deux jeux de données : les x_i, et les y_i $(i = 1, 2 \dots)$
— Y-a-t-il une relation assez simple mais assez satisfaisante entre deux jeux de données ? Si oui, laquelle ?
— Il existe de nombreuses réponses, en fonction de ce qu'on considère comme simple, et surtout en fonction de ce qu'on considère satisfaisant.

3.1 Coefficient de corrélation linéaire

Indicateur normalisé de la pertinence du modèle affine (souvent improprement appelé linéaire)

$$y = ax + b$$

— Covariance : $cov := \mu(XY) - \mu(X)\mu(Y)$
— Coefficient de corrélation linéaire : $\rho := \dfrac{cov}{\sigma(X)\sigma(Y)}$
— $-1 \leqslant \rho \leqslant +1$: plus $|\rho|$ est proche de 1, plus le modèle *linéaire* est pertinent

Rappel $\sigma^2(X) = \mu(X^2) - \big(\mu(X)\big)^2$.

Remarque Pour les variances et la covariance il faut calculer les moyennes avec 4 chiffres après la virgule.

3.2 Droite des moindres carrés – Droite de tendance

Que le modèle linéaire soit pertinent ou non, il existe une unique droite $y = ax+b$ qui minimise $\sum(ax_i+b-y_i)^2$, la somme des carrés des écarts entre les prédictions (y_i) et les mesures (x_i).
— $a = \dfrac{cov}{\sigma^2(X)} = \rho\dfrac{\sigma(Y)}{\sigma(X)}$
— $b = \mu(Y) - a\mu(X)$

Remarque La droite $y = ax + b$ passe par le point $\big(\mu(X); \mu(Y)\big)$

3.3 Modèles de régression non linéaire

Si le modèle linéaire n'est pas pertinent ($|\rho|$ proche de 0) on peut quand même utiliser les outils précédents dans certains cas
— Si $\tilde{b} > 0$, le modèle $Y = \tilde{b}e^{aX}$ est équivalent à $\ln(Y) = aX + b$ (et $\tilde{b} = e^b$) : on analyse la pertinence de ce modèle en faisant les calculs avec $\ln(Y)$ et X
— Si $\tilde{b} > 0$, le modèle $Y = \tilde{b}X^a$ est équivalent à $\ln(Y) = a\ln(X) + b$ (et $\tilde{b} = e^b$) : on analyse la pertinence de ce modèle en faisant les calculs avec $\ln(Y)$ et $\ln(X)$

Remarque Moins on a de mesures, plus les erreurs de mesures deviennent visibles et peuvent amener à des conclusions erronées.

Corrélation linéaire et régression - Exercices

Exercice 1 Tel père, tel fils Dans l'optique d'étudier la liaison entre le poids d'une maman pingouin et de son unique enfant (il semble que les pingouins ne pondent qu'un seul œuf dans toute leur vie), on a relevé le poids de 12 mamans pingouins et de leur enfant respectif, une fois qu'il a atteint la taille adulte. Les résultats (en dag : décagrammes) sont dans le tableau suivant :

Mère	65	63	67	64	68	62	70	66	68	67	69	71
Progéniture	68	66	68	65	69	66	68	65	71	67	68	71

1. Que vaut le coefficient de corrélation linéaire entre ces deux listes ?
2. Le modèle linéaire est-il pertinent ?
3. Calculez les coefficients de la droite de régression des moindres carrés.
4. Pour une maman pesant 610g, quel poids peut-on prévoir pour son fils ?

Exercice 2 Radioacivité Un élément de la classification périodique est bombardé dans un accélérateur de particules. Il donne naissance à de nouveaux éléments dont l'un est radioactif. On étudie sa décroissance en effectuant des comptages à différents moments pendant une durée de 31 heures. Les résultats obtenus sont :

t	1	7	13	19	25	31
N	1240	1190	1160	1135	1094	1065

Sachant que la décroissance radioactive obéit à une relation du type

$$N = N_0 e^{-\lambda t},$$

avec $\lambda = \frac{\ln 2}{T}$, où T est la demi-vie du corps, le but est ici de donner la radioactivité du corps au temps initial.

1. Vérifier la validité du modèle proposé avec le coefficient de corrélation
2. Calculer les paramètres N_0 et λ par régression des données
3. Enfin extrapoler la valeur en $t = 0$ grâce à ce modèle

Exercice 3 Poulpe : femelle du coqpe On a injecté à 12 poulpes, pris au hasard, des doses (en mg/L) d'une drogue et observé la durée avant apparition des perturbations cognitives (en heures).

Dose	1	1	1	2	2	2	3	3	3	4	4	4
Résistance	7.20	20.86	7.13	0.59	1.10	1.84	0.51	0.35	0.69	0.34	0.31	0.29

1. Calculez le coefficient de corrélation linéaire entre dose et survie. Le modèle linéaire semble-t-il pertinent ?
2. En traçant le nuage de points, on est tenté de croire qu'un modèle à variation modérée, de la forme $y = \tilde{b}x^a$, pourrait convenir.
   Calculez le coefficient de corrélation linéaire entre dose et survie pour le modèle proposé. Semble-t-il pertinent ?
3. Calculez les paramètres a et $\tilde{b}$ de ce modèle à variation modérée.
4. D'après ce modèle, combien de doses faudrait-il précisément pour que les perturbations commencent exactement 1 jour après l'injection de la drogue ? (2 chiffres après la virgule)

Réponse 1 Tel père, tel fils X = poids de la mère, Y = poids de la progéniture.

1. $\mu(X) = 66.6667$, $\mu(Y) = 67.6667$, $\mu(X^2) = 4451.5$, $\mu(Y^2) = 4582.5$, $\mu(XY) = 4514.8333$.
   $cov \approx 3.722$ (on trouvera 3.7177 avec seulement 4 chiffres après la virgule pour les calculs intermédiaires), $\rho \approx 0.726$.
2. Le modèle linéaire est donc acceptable (mais pas génial).
3. $a \approx 0.528$, $b \approx 32.5$
4. 64.68 dag

Réponse 2 Radioactivité

— $\mu(X) = 16$, $\mu(\tilde{Y}) = 7.0439$, $\mu(X^2) = 361$, $\mu(\tilde{Y}^2) = 49.6192$, $\mu(X\tilde{Y}) = 112.1852$.
  $\sigma(X) = 10.247$, $\sigma(\tilde{Y}) = 0.0507$, $cov \approx -0.5175$, $\rho \approx -0.9965$. Le modèle exponentiel semble donc très fidèle aux mesures.
— $\lambda = 4.927 \cdot 10^{-3}, N_0 \approx 1240$

Réponse 3 Poulpe : femelle du coqpe X = doses, Y = survie.

1. $\mu(X) = 2.5$, $\mu(Y) = 3.4355$, $\mu(X^2) = 7.5$, $\mu(Y^2) = 45.3362$, $\mu(XY) = 4.2245$.
   $cov \approx -4.364$, $\rho \approx -0.67$. Le modèle linéaire ne semble donc pas acceptable.
2. $\mu(\tilde{X}) = 0.7945$, $\mu(\tilde{Y}) = 0.1310$, $\mu(\tilde{X}^2) = 0.9023$, $\mu(\tilde{Y}^2) = 1.9504$, $\mu(\tilde{X}\tilde{Y}) = -0.5844$.
   $cov \approx -0.6885$, $\rho \approx -0.9511$. Le modèle à variation modérée semble donc très bon.
3. $a = -2.5400, \tilde{b} = 8.5764$
4. 0.67 doses

4 Initiation au calcul numérique (3h)

- Calcul approché de solutions
- Les méthodes présentées ici sont utilisées dans la pratique
- Il existe de nombreuses autres méthodes, chacune ayant des avantages et des inconvénients propres

4.1 Calcul de la dérivée

On cherche la valeur $f'(x)$.

Méthode des différences finies :
- $f(x+h) \approx f(x) + hf'(x)$ pour h petit
- $f(x-h) \approx f(x) - hf'(x)$ pour h petit
- Pour h petit,
$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

Pour des raisons techniques, sur lesquelles nous jetterons un voile pudique, cette approximation ne marche plus avec h trop petit : le meilleure choix est $h = \sqrt{\varepsilon}$, ε étant le plus petit chiffre que la machine puisse représenter. Si on ne le connaît pas, 10^{-6} ou 10^{-8} devraient donner de bons résultats.

4.2 Résolution d'équation

On cherche la valeur $x^\star$, solution de
$$f(x^\star) = 0.$$

Méthode de Newton :
- $f(x+h) \approx f(x) + hf'(x) \implies f(y) \approx f(x_0) + (y - x_0)f'(x_0)$
- $f(x_0) + (y - x_0)f'(x_0) = 0 \implies y = x_0 - \dfrac{f(x_0)}{f'(x_0)}$
- Si f est "conciliante" et x_0 "assez proche" de la bonne réponse, les détails sordides de ces guillemets étants passés sous silence, la suite de valeurs
$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$
tend vers $x^\star$.

4.3 Calcul d'intégrale

On cherche la valeur $I = \displaystyle\int_{x_0}^{x_N} f(x)dx$.

Méthode des trapèzes :

- On place des points $x_1, x_2 \dots$ sur L'intervalle $[x_0; x_N]$ définis par $x_n = x_0 + nh$, où $h = (x_N - x_0)/N$.
- Pour N grand,

$$I \approx h\Big(\frac{f(x_0)}{2} + \sum_{n=1}^{N-1} f(x_n)s + \frac{f(x_N)}{2}\Big)$$

4.4 Résolution d'équation différentielle

On cherche les valeur $y(t)$, où y est la solution de

$$\begin{cases} y' = f(t, y(t)) \\ y(0) = y_0 \end{cases}$$

Methode de Runge-Kutta d'ordre 1 :

- $y(h) - y(0) = \int_0^h y' = \int_0^h f(t, y(t)) \approx hf(0, y(0))$ pour h petit
- $y(h) \approx y(0) + hf(0, y(0))$
- En progressant péniblement par petits pas de longueur h, on trouve par récurrence

$$y\big((n+1)h\big) \approx y_{n+1} := y_n + hf(nh, y_n)$$

Cette méthode à le mérite d'être très simple, mais n'est pas très précise. Dans la pratique on utilise son principe, mais avec une meilleure approximation de l'intégrale de f.

Initiation au calcul numérique - Exercices

Exercice 1 Résolution d'équation On cherche une solution à l'équation $x^3 - 2x = 5$. On pose alors

$$f(x) = x^3 - 2x - 5$$

1. Calculez $f'(x)$.
2. En partant de $x_0 = 2$, calculez les trois termes suivants (x_1, x_2, x_3) de la suite donnée par la méthode de Newton.
3. Relevez les valeurs de f en ces 4 points (vous venez de les calculer) et constatez qu'on s'approche de mieux en mieux de 0.

Exercice 2 Calcul de dérivée On considère la fonction

$$f(x) = e^{-\sin(x^2-x)}$$

1. Calculez la formule exacte de la dérivée $f'(x)$
2. Avec la formule exacte, calculez la valeur $f'(2)$
3. Calculez l'approximation par différences finies pour $h = 10^{-1}, h = 10^{-2}$ et $h = 10^{-3}$

Exercice 3 Calcul d'intégrale On cherche la valeur de l'intégrale de $f(x) = -(2x-1)\cos(x^2-x)e^{-\sin(x^2-x)}$ entre 0 et 2.

1. Donnez une primitive de f et déduisez-en la valeur de l'intégrale considérée
2. Calculez les valeurs x_0, x_1, x_2 pour que l'intervalle $[0; 2]$ soit découpé en deux sous-intervalles de même longueur
3. Calculez une approximation de l'intégrale par la méthode des trapèzes avec ces trois points.

Exercice 4 Calcul de solution d'équation différentielle On considère l'équation différentielle non-linéaire

$$\begin{cases} y' = -2 - y + y^2 \\ y(0) = 0.5 \end{cases}$$

1. Avec la méthode de Runge-Kutta d'ordre 1, calculez les valeurs $y(0.01)$ et $y(0.02)$.
2. Il existe des méthodes pour calculer la solution exacte : $y(x) = 2 - \frac{3}{1+e^{-3x}}$. Calculez alors les valeurs exactes de $y(0.01)$ et $y(0.02)$.

Réponse 1 Résolution d'équation

1. $f'(x) = 3x^2 - 2$
2. $x_1 = 2.1$
   $x_2 = 2.094568$
   $x_3 = 2.094551$

3. $f(x_0) = -1$
   $f(x_1) = 0.0610$
   $f(x_2) = 0.0002$
   $f(x_3) = 1.7398 \cdot 10^{-9}$ si on calcule les x_i avec plus de précision que les 6 chiffres après la virgule données ici.
   Ce n'est pas si simple, mais en gros si on utilise des x_i avec 6 chiffres après la virgule, on aura un résultat correct à 6 chiffres après la virgule.

Réponse 2 Calcul de dérivée

1. $f'(x) = -(2x-1)\cos(x^2-x)e^{-\sin(x^2-x)}$
2. Le calcul avec la formule exacte donne $f'(2) = 0.5029$
3. Avec les différences finies, on trouve $f'(2) \approx 0.5307$
   $f'(2) \approx 0.5032$
   $f'(2) \approx 0.5029$
   Remarquez qu'ici ce n'est pas une suite : on n'a pas besoin des termes précédents pour calculer le suivant. En situation réelle on fera directement le calcul avec $h = 10^{-7}$.

Réponse 3 Calcul d'intégrale

1. $F(x) = e^{-\sin(x^2-x)}$: $\int_0^2 f(x) = F(2) - F(0) = 0.4028 - 1 = -0.5972$
2. Ici $h = 1$: $x_0 = 0, x_1 = 1, x_2 = 2$
3. $f(0) = 1, f(1) = -1, f(2) = 0.5029$: $\int_0^2 f(x) \approx \frac{f(0)}{2} + f(1) + \frac{f(2)}{2} = -0.2485$
   La médiocrité du résultat est une conséquence immédiate du faible nombre de points utilisés.

Réponse 4 Calcul de solution d'équation différentielle

1. $y(0) = 0.5$, $y(0.01) \approx 0.4775$, $y(0.02) \approx 0.4550$
2. $y(0) = 0.5$, $y(0.01) = 0.4775$, $y(0.02) = 0.4550$

La qualité est remarquable, mais va se détériorer rapidement et fortement si on continue à s'écarter de 0.