Université Mustapha Stambouli de Mascara

Faculté des Sciences Exactes

Département de Chimie

2ème Année Chimie 2022/2023

Examen de Méthodes Numériques et Programmation

(1h :30 min)

Questions.

1. Quelle est la différence entre :
   - Methode de Simpson.
   - Méthode de Trapèze.
2. Quelles sont les conditions pour appliquer la Méthode de Bissection ?
3. Donnée l'approximation d'Euler on générale ?

Exercice 1.

Soit l'équation : $f(x) = x^4 - 2x - 4 = 0$. Résoudre l'équation par la Méthode de ***Newton*** avec deux d'décimale exacte sur l'intervalle **[1 , 1.7]** ;

On prendre : $x_0 = 1.7$ et $e = 0.002$

Exercice 2.

Résoudre le problème de Cauchy précédant par la Méthode de ***Range-Kutta***.

$$\begin{cases} y' = -t.y^2 + 2 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

avec l'intervalle : [0.1] et **h** = 0.25 ;

nombres d'interactions : n = 2.

Exercice 3.

Résoudre par la méthode de ***Gauss*** le système suivant :

$$A = \begin{cases} 3x_1 - 2x_2 + x_3 = 2 \\ 2x_1 + x_2 + x_3 = 7 \\ 4x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 4 \end{cases}$$

* Université Mustapha Stambouli de Mascara.

* Département de Chimie

$2^{ème}$ Année Chimie 2022/2023.

* Correction d'Examen de :

Méthodes Numériques et Programmation

* Question : (05 p)

1. La difference et :

1.a : Méthode de Simpson.

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left[(y_0 + y_n) + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{n-1}) + 2(y_2 + y_4 + \dots + y_{n-2})\right] + E_n(f)$$ (1)

et : $E_n(f) = \left|\frac{(b-a)^5}{180n^2} f''''(c)\right| \leq M_4 \frac{(b-a)^5}{180n^2}$ (0,5)

1.b : Méthode de Trapèze.

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}\left[(y_0 + y_n) + 2(y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1})\right] + E_n(f).$$ (1)

$E_n(f) = \left|\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(c)\right| \leq M_2 \frac{(b-a)^3}{12n^2}$ (0,5)

2. Les Conditions :

- $f(x)$ et Continue sur l'intervalle $[a;b]$. 0,25
- $f'(x) \neq 0$; 0,25 et $f(a) \times f(b) < 0$ (0,5)

3. L'approximation d'Euler :

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h f(t_i ; y_i) \\ t_i = a + ih \end{cases}$$ (0,5) (0,5)

Exercice n° 3 : 05p

On a : $A = \begin{cases} 3x_1 - 2x_2 + x_3 = 2 \\ 2x_1 + x_2 + x_3 = 7 \\ 4x_1 + 3x_2 + 2x_3 = 4 \end{cases} \Rightarrow A = \left(\begin{array}{ccc|c} 3 & -2 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 1 & 7 \\ 4 & -3 & 2 & 4 \end{array}\right) \begin{array}{l} \to L_1^0 \\ \to L_2^0 \\ \to L_3^0 \end{array}$ 0,25

→ **Etape 1.** 0,25

$a_{11} \neq 0$; $L_1^{(1)} = L_1^{(0)}$; $L_2^{(1)} = L_2^{(0)} - L_1^{(0)} \frac{a_{21}}{a_{11}}$; $L_3^{(1)} = L_3^{(0)} - L_1^{(0)} \frac{a_{31}}{a_{11}}$ 0,25 0,25 0,25

$L_2^{(1)} = (2 \;\; 1 \;\; 1 / 7) - (3 \;\; -2 \;\; 1 / 2) \frac{2}{3}$

$= (2 \;\; 1 \;\; 1 / 7) - (2 \;\; -\frac{4}{3} \;\; \frac{2}{3} / \frac{4}{3})$

$L_2^{(1)} = (0 \;\; \frac{7}{3} \;\; \frac{1}{3} / \frac{17}{3})$ 0,5

$L_3^{(1)} = (4 \;\; -3 \;\; 2 / 4) - (3 \;\; -2 \;\; 1 / 2) \frac{4}{3}$

$= (4 \;\; -3 \;\; 2 / 4) - (4 \;\; -\frac{8}{3} \;\; \frac{4}{3} / \frac{8}{3})$

$L_3^{(1)} = (0 \;\; -\frac{1}{3} \;\; \frac{2}{3} / \frac{4}{3})$ 0,5

$A = \left(\begin{array}{ccc|c} 3 & -2 & 1 & 2 \\ 0 & \frac{7}{3} & \frac{1}{3} & \frac{17}{3} \\ 0 & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{4}{3} \end{array}\right)$

Etape 02 : 0,25 0,25

$a_{32}^{(1)} \neq 0$; $a_{22}^{(1)} \neq 0$; $L_1^{(2)} = L_1^{(1)} = L_1^{(0)}$; $L_2^{(2)} = L_2^{(1)}$; $L_3^{(2)} = L_3^{(1)} - L_2^{(1)} \frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}$ 0,25

$L_3^{(2)} = (0 \;\; -\frac{1}{3} \;\; \frac{2}{3} / \frac{4}{3}) - (0 \;\; \frac{7}{3} \;\; \frac{1}{3} / \frac{17}{3}) \frac{-\frac{1}{3}}{\frac{7}{3}} = -\frac{1}{7}$

$L_3^{(2)} = (0 \;\; -\frac{1}{3} \;\; \frac{2}{3} / \frac{4}{3}) - (0 \;\; -\frac{1}{3} \;\; -\frac{1}{21} / -\frac{17}{21})$

$L_3^{(2)} = (0 \;\; 0 \;\; \frac{15}{21} / \frac{45}{21})$ 0,5

$A = \left(\begin{array}{ccc|c} 3 & -2 & 1 & 2 \\ 0 & \frac{7}{3} & \frac{1}{3} & \frac{17}{3} \\ 0 & 0 & \frac{15}{21} & \frac{45}{21} \end{array}\right) \Rightarrow$ $\boxed{x_1 = 1}$ 0,5 $\boxed{x_2 = 2}$ 0,5 $\boxed{x_3 = 3}$ 0,5

* Méthode de Runge-Kutta (0,5 p)

* Exercice :

$h = 0{,}25$; $\begin{cases} y' = 2 - ty^2 \ ; \ t \in [0,1] \\ y(0) = 1 \end{cases}$

$h = \frac{b-a}{n}$ (0,25)

$$\boxed{y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(K_1 + 2(K_2 + K_3) + K_4)}$$ (0,25)

$i = 0$

$K_1 = f(t_i, y_i) = 2 - 0 \times 1^2 = \boxed{2}$ (0,5)

$K_2 = f(t_i + \frac{h}{2} ; y_i + \frac{h}{2} K_1) = 2 - (t_0 + \frac{h}{2})(y_0 + \frac{h}{2} K_1)^2$

$K_2 = 2 - (0{,}0 + \frac{0{,}25}{2})(1 + \frac{0{,}25}{2} \times 2)^2$

$\boxed{K_2 = 1{,}805}$ (0,5)

$K_3 = f(t_0 + \frac{h}{2} ; y_0 + \frac{h}{2} K_2) = 2(0 + \frac{0{,}25}{2})(1 + \frac{0{,}25}{2} \times 1{,}805)^2$

$\boxed{K_3 = 1{,}8123}$ (0,5)

$K_4 = f(t_0 + h ; y_0 + hK_3) = 2 - (0 + 0{,}25)(1 + 0{,}25 \times 1{,}8123)^2$

$\boxed{K_4 = 1{,}4722}$ (0,5)

$y_1 = 1 + \frac{0{,}25}{6}(2 + 2(1{,}805 + 1{,}8123) + 1{,}4722)$

$\boxed{y_1 = 1{,}4461}$ (0,5)

$\boxed{y_2 = 1{,}7028}$ (0,2)

$\boxed{y_3 = 1{,}7317}$

$\boxed{y_4 = 1{,}6148}$

Exercice no 1 (04/5)

→ $f(x) = x^4 - 2x - 4 = 0$; sur $[1 ; 1,7]$ avec $x_0 = 1,7$, $e = 0,002$.

On a :

$f'(x) = 4x^3 - 2 > 0$ 0,5

$f''(x) = 12x^2 > 0$ 0,5

$x_0 = 1,7$

$\Rightarrow f(x_0) \times f''(x_0) > 0$

$\Rightarrow f(1,7) \times f''(1,7) \overset{?}{>} 0$ $\begin{cases} f(1,7) = 0,952 > 0 & 0,25 \\ f''(1,7) = 34,68 > 0 & 0,25 \end{cases}$

Alors :

$\Rightarrow f(1,7) \times f''(1,7) > 0$ 0,25

On a la suite : $x_{n+1} = x_n - \dfrac{f(x_n)}{f'(x_n)}$ 0,5

→ $x_1 = 1,7 - \dfrac{0,952}{17,65} = \boxed{1,646}$ 0,5

→ $x_2 = 1,646 - \dfrac{f(1,646)}{f'(1,646)} = \boxed{1,643}$ 0,5

→ $x_3 = 1,643 - \dfrac{f(1,643)}{f'(1,643)} = \boxed{1,642}$ 0,5

On a : $e = 0,002$ 0,25

$|x_{n+1} - x_n| \leqslant e \Rightarrow |x_3 - x_2| \leqslant e \Rightarrow$

$|1,642 - 1,643| = 0,001 \leqslant 0,002$.

Donc : la solution de l'équation est : $\boxed{x = 1,642}$