

I.1.Introduction

Un procédé est une méthode, technique utilisée pour la réalisation d'une tâche, ou la fabrication d'un matériau ou d'un produit fini.

- **Les chimistes** s'intéressent principalement à la transformation de la matière
- **Les ingénieurs** s'intéressent aux aspects techniques et scientifiques et aux aspects liés : aspect économiques, aspect environnement, aspects sociaux, gestion des risques...

Les impératifs économiques obligent les entreprises de réduire les couts de produire rapidement et de maitriser la production. L'amélioration de la qualité technique des produits nécessite la modélisation et l'optimisation de leurs procédés de fabrication.

La modélisation et la simulation sont devenues des pratiques courantes dans de nombreux domaines scientifiques et techniques et en particulier en Chimie. Elles s'imposent souvent lorsque l'expérience réelle est :

1. trop difficile,
2. trop dangereuse,
3. trop coûteuse,
4. trop longue ou trop rapide,
5. éthiquement inacceptable,
6. ou même impossible à réaliser.

I.2. Définition

I.2.1. Modélisation

Modélisation est une construction d'un modèle en fonction des objectifs d'une étude particulière. La modélisation est la conception d'un modèle, selon son objectif et les moyens utilisés (par exemple : modélisation de la libération contrôlée d'un principe actif). Le mot modélisation est aussi très utilisé dans le monde du graphisme, où l'on modélise des objets en 2D ou en 3D. Il s'agit de construire une représentation la plus proche possible du fonctionnement réel afin d'en analyser le comportement.

L'objectif de la modélisation est d'établir un système d'équation qui permet connaissant les entrées (X) du modèle et de calculer les sorties (Y) du modèle. En génie des procédés, on peut distinguer deux objectifs majeurs à la modélisation :

1. l'acquisition et la capitalisation de connaissances, d'une part ;
2. le contrôle et la supervision du procédé, d'autre part.

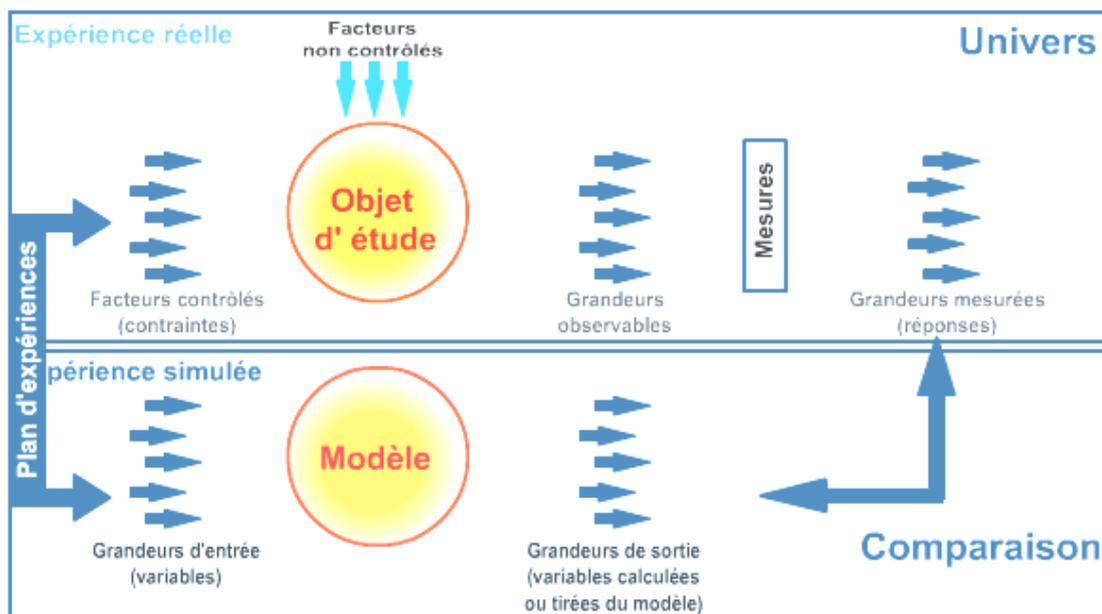


Figure I.1. Principe de modélisation.

1.2.2. Modèle

Modèle est une représentation, forcément simplifiée d'un objet, d'un phénomène construite dans le but d'en faciliter l'étude, d'en mieux comprendre le comportement, d'en prédire les propriétés, d'en prévoir l'évolution etc....Représentation, forcément simplifiée d'un objet, d'un phénomène construite dans le but d'en faciliter l'étude, d'en mieux comprendre le comportement, d'en prédire les propriétés, d'en prévoir l'évolution ... etc.

En génie des procédés, le terme "modèle" se réfère à un ensemble d'équations mathématiques construit sur la base de données expérimentales acquises sur le système réel et permettant de représenter les relations entre les sorties et les entrées du système. Il existe différents types de modèle permettant de répondre aux différents objectifs présentés précédemment. La construction d'un modèle s'appuie sur deux facteurs clé : l'expérience et la connaissance. Ces deux facteurs sont liés, l'analyse des données expérimentales conduisant forcément à un approfondissement de la connaissance. La capacité à développer un type de modèle plutôt qu'un autre va dépendre en grande

partie de la connaissance théorique que le modélisateur a du système et de l'information expérimentale disponible.

De manière très schématique, on peut classer les modèles en quatre grandes classes (figure I.2):

1. les modèles empiriques (ou modèles comportementaux), basés uniquement sur l'information expérimentale ;
2. les modèles de connaissance pure basés uniquement sur la connaissance théorique du système ;
3. les modèles phénoménologiques ;
4. les modèles « hybrides ».

Ces deux derniers types de modèles permettent de pallier les inconvénients des modèles empiriques et des modèles de connaissance pure.

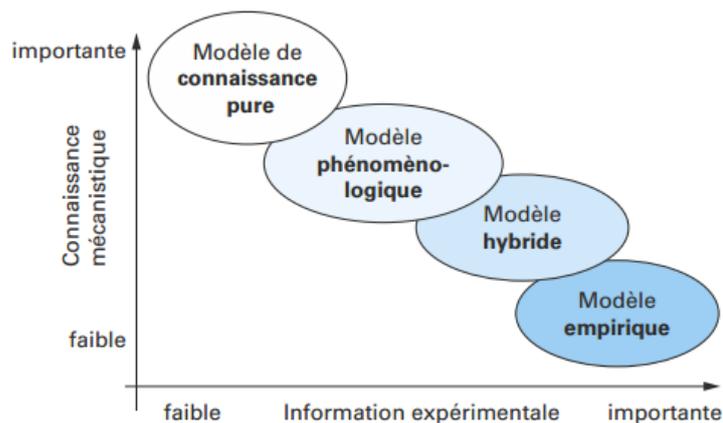


Figure I.2. Différents types de modèle en génie des procédés.

1.2.3. Simulation

La simulation numérique ou informatique désigne l'exécution d'un programme informatique sur un ordinateur en vue de simuler un phénomène physique réel et complexe (par exemple : chute d'un corps sur un support mou). Elle repose sur la représentation d'un phénomène par un modèle composé d'équations, elle permet d'en étudier le fonctionnement (actuel et futur) et les propriétés. Il ne s'agit pas de représenter le réel mais de se comporter comme dans la réalité.

Simulation numérique = Modélisation aux résultats numérique

1.2.4. Modélisation moléculaire est un ensemble de techniques pour modéliser ou imiter le comportement de molécules. Elle consiste à construire des modèles des molécules ou d'ensemble de molécules, dans le but de mieux en comprendre la structure et les propriétés.

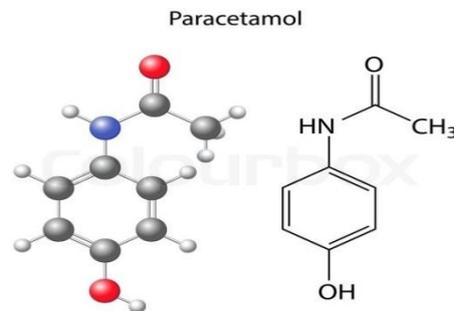


Figure.I.3. Molécule de paracétamol "C₈H₉NO₂" 3D et 2D.

Modélisation moléculaire = Description des molécules et leurs interactions

I.3. Méthodes de résolution des systèmes d'équation algébriques (SEA)

I.3.1. Résolution des équations d'état RK et RKS en utilisant Excel et un autre logiciel pour un gaz pur et un mélange de gaz

Aujourd'hui, les ingénieurs du monde utilisent les équations d'état pour l'estimation des propriétés thermodynamiques et physico-chimiques des fluides (masse volumique, enthalpie, fugacité...etc). Les équations de RK et RKS étaient des équations capables de représenter la coexistence vapeur liquide. La pression (P) est liée à la température (T), à la constante de gaz idéal (R) et au volume molaire (V) via:

A. Équation de REDLICH KWONG (1949)

Redlich-Kwong (1949)

$$p = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+b)T^{0.5}}$$

$$a = 0.4278 \frac{R^2 T_c^{2.5}}{p_c}$$

$$b = 0.0867 \frac{RT_c}{p_c}$$

P : Pression (KPa)

V : volume molaire (L/mol)

R : Constante de gaz parfait (3.814 Joule/mole.K)

T : Température (K)

T_c : Température critique (K)

P_c : Pression critique(KPa)

B. Équation de SOAVE-REDLICH KWONG (1972)

$$\text{Soave-Redlich-Kwong (1972)} \quad p = \frac{RT}{V-b} - \frac{a(T)}{V(V+b)}$$

$$a(T) = 0.4274 \left(\frac{R^2 T_c^2}{P_c} \right) \left\{ 1 + m \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{0.5} \right] \right\}^2$$

$$m = 0.480 + 1.57\omega - 0.176\omega^2$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c}$$

ω : Facteur acentrique

Le facteur acentrique est un nombre conceptuel introduit par Kenneth Pitzer en 1955, couramment utilisé dans la description de la matière en thermodynamique, notamment pour la caractérisation de composés purs. Le facteur acentrique ω d'un corps pur se calcule selon la formule :

$$\omega = -\log_{10}(P_r^{sat}) - 1 \text{ à } T_r = 0.7$$

T : Température ;

$T_r = \frac{T}{T_c}$: Température réduite ;

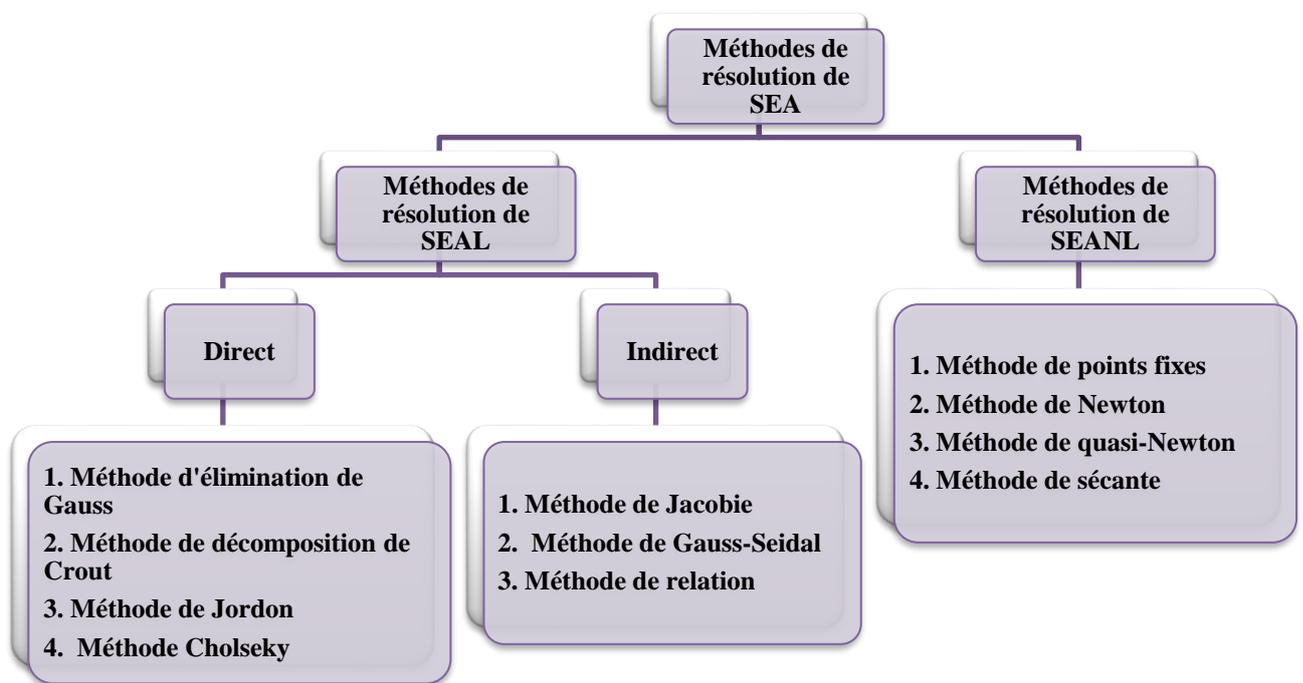
T_c : Température critique du corps pur ;

$P_r^{sat} = \frac{p^{sat}}{P_c}$: Pression de vapeur saturante réduite ;

P_c : Pression critique du corps pur.

$$T_r = 0.7 \Rightarrow P_r^{sat} = 0.1$$

- Les méthodes de résolution des systèmes d'équation algébriques (SEA) peuvent être deux linéaire et non linéaire (SEAL et SEANL). Elles sont mentionnées dans l'organigramme suivant :
- Les SEAL et SEANL proviennent généralement de la modélisation en régime stationnaire.
- La non linéarité provient de la représentation de la cinétique et thermodynamique.
- Les SEAL et SEANL aussi proviennent lors de résolution des équations différentielles par la méthode des différences finie.
- Dans la modélisation des systèmes en génie des procédés très souvent le système obtenu est un système dit "Creux".



I.3.2. Quelques méthodes de résolution des systèmes d'équation algébriques linéaire et non linéaire (SEAL et SEANL)

Un SEAL se présente sous forme de $Ax = b$

$$\begin{aligned}
 a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
 a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &= b_2 \\
 \dots & \\
 \dots & \\
 \dots & \\
 a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n &= b_n
 \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{2n} \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_n \end{pmatrix}$$

Les méthodes de résolution des systèmes d'équation algébriques linéaire (SEAL), peuvent d'être direct et indirect. Le tableau suivant résume les différences entre les deux méthodes

Méthode Direct pour résoudre les SEAL	Méthode Indirect pour résoudre les SEAL
- Dimension de matrice < 100 ;	- Dimension de matrice > 100 ;
- Donnent des résultats exacts (sans erreurs) ;	- Donnent des résultats approximatifs (avec erreurs).
- A est une matrice pleine (ne contient pas de zéro.	

A. Méthode Direct pour résoudre les SEAL

1. Méthode d'élimination de Gauss
2. Méthode de décomposition de Crout
3. Méthode de Jordon
4. Méthode Choleky

Exemple :

$$\begin{cases} 2x_1 + 3x_2 - x_3 = 5 \\ 4x_1 + 4x_2 - 3x_3 = 3 \\ -2x_1 + 3x_2 - x_3 = 1 \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} 3 & 3 & -1 \\ 4 & 4 & -3 \\ -2 & 3 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$A \cdot x = b \rightarrow x = A^{-1} \cdot b$$

On cherche toujours A^{-1}

$$A^{-1} = \frac{Com^T(A)}{\det(A)}$$

Avec $\det(A) \neq 0$

$A^{-1} = \text{inv}(A)$ dans logiciel Matlab

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 4 & 4 & -3 \\ -2 & 3 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$A \cdot x = b$$

$$\det(A) = +2 \begin{vmatrix} 4 & -3 \\ 3 & -1 \end{vmatrix} - 3 \begin{vmatrix} 4 & -3 \\ -2 & -1 \end{vmatrix} - 1 \begin{vmatrix} 4 & 4 \\ -2 & 3 \end{vmatrix}$$

$$\det(A) = +2(-4 + 9) - 3(-4 - 6) - 1(12 + 8) = 20$$

$\det(A) \neq 0 \Rightarrow$ Possibilité de A^{-1}

$$\text{Com}(A) = \begin{pmatrix} + \begin{vmatrix} 4 & -3 \\ 3 & -1 \end{vmatrix} & - \begin{vmatrix} 4 & -3 \\ -2 & -1 \end{vmatrix} & + \begin{vmatrix} 4 & 4 \\ 2 & 3 \end{vmatrix} \\ - \begin{vmatrix} 3 & -1 \\ 3 & -1 \end{vmatrix} & + \begin{vmatrix} 2 & -1 \\ -2 & -1 \end{vmatrix} & - \begin{vmatrix} 2 & 3 \\ -2 & 3 \end{vmatrix} \\ + \begin{vmatrix} 3 & -3 \\ 4 & -3 \end{vmatrix} & - \begin{vmatrix} 2 & -1 \\ 4 & -3 \end{vmatrix} & + \begin{vmatrix} 2 & 3 \\ 4 & 4 \end{vmatrix} \end{pmatrix}$$

$$\text{Com}(A) = \begin{pmatrix} 5 & 10 & 20 \\ 0 & -4 & -12 \\ -5 & 2 & -4 \end{pmatrix}$$

$$\text{Com}^T(A) = \begin{pmatrix} 5 & 0 & -5 \\ 10 & -4 & 2 \\ 20 & -12 & -4 \end{pmatrix}$$

$$A^{-1} = \frac{1}{20} \begin{pmatrix} 5 & 0 & -5 \\ 10 & -4 & 2 \\ 20 & -12 & -4 \end{pmatrix}$$

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 & -\frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{5} & \frac{1}{10} \\ 1 & -\frac{3}{5} & -\frac{1}{5} \end{pmatrix}$$

$$x = A^{-1} \cdot b$$

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 & -\frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{5} & \frac{1}{10} \\ 1 & -\frac{3}{5} & -\frac{1}{5} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

A. Méthode d'élimination de Gauss

La méthode du pivot de Gauss est une méthode pour transformer un système en un autre système équivalent (ayant les mêmes solutions) qui est triangulaire et est donc facile à résoudre. Les opérations autorisées pour transformer ce système sont :

- échange de deux lignes.
- multiplication d'une ligne par un nombre non nul.
- addition d'un multiple d'une ligne à une autre ligne.

En mathématiques, plus précisément en algèbre linéaire, l'élimination de Gauss, aussi appelée méthode du pivot de Gauss.

$$A \cdot x = b \rightarrow \hat{A} \cdot x = \hat{b}$$

Avec : \hat{A} matrice triangulaire supérieure

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 4 & 4 & -3 \\ -2 & 3 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\downarrow L_2 - 2 * L_1$$

$$\downarrow L_3 + L_1$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 0 & -2 & -1 \\ 0 & 6 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ -7 \\ 6 \end{pmatrix}$$

$$\downarrow L_3 + 3 * L_2$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 0 & -2 & -1 \\ 0 & 0 & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ -7 \\ -15 \end{pmatrix}$$

$$x_3 = \frac{-15}{-5} = 3$$

$$-2x_2 - x_3 = -7 \Rightarrow x_2 = \frac{7 + x_3}{2} = \frac{7 - 3}{2} = \frac{4}{2} = 2$$

$$2x_1 + 3x_2 - x_3 = 5 \Rightarrow x_1 = \frac{5 - 3x_2 + x_3}{2} = \frac{5 - 3(2) + 3}{2} = \frac{2}{2} = 1$$

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

B. Méthode d'élimination de Gauss-Jordan

En mathématiques, plus précisément en algèbre linéaire, l'élimination de Gauss-Jordan, aussi appelée méthode du pivot de Gauss.

Matrice A doit être une matrice unité $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

L : Ligne

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 4 & 4 & -3 \\ -2 & 3 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\downarrow \frac{L_1}{2}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{3}{2} & \frac{-1}{2} \\ 4 & 4 & -3 \\ -2 & 3 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{5}{2} \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\downarrow L_2 - 4 * L_1$$

$$\downarrow L_3 + 2 * L_1$$

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{3}{2} & \frac{-1}{2} \\ 0 & -2 & -1 \\ 0 & 6 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{5}{2} \\ -7 \\ 6 \end{pmatrix}$$

$$\downarrow \frac{L_2}{(-2)}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{3}{2} & \frac{-1}{2} \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 6 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{5}{2} \\ \frac{7}{2} \\ 6 \end{pmatrix}$$

$$\downarrow L_3 - 6 * L_2$$

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{3}{2} & \frac{-1}{2} \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{5}{2} \\ 7 \\ -15 \end{pmatrix}$$

$$\downarrow L_1 - \frac{3}{2} * L_2$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{-5}{4} \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{-11}{4} \\ 7 \\ -15 \end{pmatrix}$$

$$\downarrow \frac{L_3}{(-5)}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{-5}{4} \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{-11}{4} \\ 7 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$\downarrow L_1 + \frac{5}{4} * L_3$$

$$\downarrow L_2 - \frac{1}{2} * L_3$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

C. Méthode de décomposition LU de Crout

En algèbre linéaire, la décomposition LU est une méthode de décomposition d'une matrice comme produit d'une matrice triangulaire inférieure L (*lower*,) par une matrice triangulaire supérieure U (*upper*). Cette décomposition est utilisée en analyse numérique pour résoudre des systèmes d'équations linéaires.

$$A \cdot x = b$$

$$L \cdot U \cdot x = b$$

$$L.Z = b$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 4 & 4 & -3 \\ -2 & 3 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\downarrow L_3 + L_1$$

$$\downarrow L_2 - 2 * L_1$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 0 & -2 & -1 \\ 0 & 6 & -2 \end{pmatrix}$$

$$\downarrow L_3 + 3 * L_2$$

$$U = \begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 0 & -2 & -1 \\ 0 & 0 & -5 \end{pmatrix}$$

$$L_2 - 2 * L_1 = 4 - 2(1) = 2: (2)$$

$$L_3 + L_1 = -2 + 1 = -1: (-1)$$

$$L_3 + 3 * L_2 = \quad +3(-2) = -3: (-3)$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 1 \end{pmatrix}$$

$$A.x = b$$

$$L.U.x = b$$

$$L.Z = b$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 1 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 0 & -2 & -1 \\ 0 & 0 & -5 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 1 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ -7 \\ -15 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 0 & -2 & -1 \\ 0 & 0 & -5 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 0 & -2 & -1 \\ 0 & 0 & -5 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ -7 \\ -15 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

D. Méthode de factorisation de Choleskx

La factorisation de Choleskx, nommée d'après André-Louis Choleskx, consiste, pour une matrice symétrique définie positive A, à déterminer une matrice triangulaire inférieure L telle que : $A=LL^T$.

-A est symétrique : $A = A^T$

-A est définie positive : tout les déterminants de la matrice A sont >0

$$A \cdot x = b$$

$$L \cdot L^T \cdot x = b$$

$$L \cdot Z = b$$

$$A = L \cdot L^T$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ -1 & 5 & -4 \\ 2 & -4 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ b & c & 0 \\ d & e & f \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} a & b & d \\ 0 & c & e \\ 0 & 0 & f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^2 & ab & ad \\ ab & b^2 + c^2 & bd + ce \\ ad & bd + ce & d^2 + e^2 + f^2 \end{pmatrix}$$

$$\text{-A est symétrique : } A = A^T ; A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ -1 & 5 & -4 \\ 2 & -4 & 6 \end{pmatrix} = A^T = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ -1 & 5 & -4 \\ 2 & -4 & 6 \end{pmatrix}$$

-A est définie positive : tout les déterminants de la matrice A sont >0

$$\det(A) = +1 \begin{vmatrix} 5 & -4 \\ -4 & 6 \end{vmatrix} - (-1) \begin{vmatrix} -1 & -4 \\ 2 & 6 \end{vmatrix} + 2 \begin{vmatrix} -1 & 5 \\ 2 & -4 \end{vmatrix}$$

$$\det(A) = (30 - 16) + (-6 + 8) + 2(4 - 10)$$

$$\det(A) = 14 + 2 - 12$$

$$\det(A) = 4 > 0$$

$$a^2 = 1 \Rightarrow a = 1$$

$$ab = -1 \Rightarrow b = \frac{-1}{1} \Rightarrow b = -1$$

$$ad = 2 \Rightarrow d = \frac{2}{a} = \frac{2}{1} \Rightarrow d = 2$$

$$b^2 + c^2 = 5 \Rightarrow c = \sqrt{5 - 1} \Rightarrow c = 2$$

$$bd + ce = -4 \Rightarrow e = \frac{-4 - bd}{c} = \frac{-4 - (-1)(2)}{2} = \frac{-4 + 2}{2} \Rightarrow e = -1$$

$$d^2 + e^2 + f^2 = 6 \Rightarrow f^2 = 6 - d^2 - e^2 = 6 - 4 - 1 = 1 \Rightarrow f = 1$$

$$L \cdot L^T \cdot x = b$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \\ 2 & -1 & 1 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \\ 2 & -1 & 1 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$y_1 = 5$$

$$-y_1 + 2y_2 = 3 \Rightarrow y_2 = \frac{3 + y_1}{2} = \frac{3 + 5}{2} \Rightarrow y_2 = 4$$

$$2y_1 - y_2 + y_3 = 1 \Rightarrow y_3 = 1 - 2y_1 + y_2 = 1 - 2(5) + 4 = 1 - 10 + 4 \Rightarrow y_3 = -5$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 4 \\ -5 \end{pmatrix}$$

$$x_3 = -5$$

$$2x_2 - x_3 = 4 \Rightarrow x_2 = \frac{4 + x_3}{2} = \frac{4 - 5}{2} = \frac{1}{2}$$

$$x_1 - x_2 + 2x_3 = 5 \Rightarrow x_1 = 5 + x_2 - 2x_3 \Rightarrow x_1 = 5 + \frac{1}{2} - 2(-5) = 5 + \frac{1}{2} + 10$$

$$= \frac{10 + 1 + 20}{2} \Rightarrow x_1 = \frac{31}{2}$$

B. Méthodes Indirects pour résoudre les SEAL

Ils sont des méthodes itératives de résolution de SEAL :

1. Méthode de Jacobie
2. Méthode de Gauss-Seidal
3. Méthode de relation

1. Méthode de Jacobie

Méthode de Jacobie est une méthode itérative de résolution d'un système matriciel de la forme $Ax = b$. Pour cela, on utilise une suite $x^{(k)}$ qui converge vers un point fixe x .

La méthode de Jacobie est appliquée au système $Ax=b$ et convergente pour tout $x^{(0)}$ si la matrice A est une matrice à diagonale strictement dominante.

$$A * x = b$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{nn} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_1 \\ \dots \\ \dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_1 \end{cases}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1^{(K+1)} = \frac{1}{a_{11}} \left(b_1 - a_{12}x_2^{(K)} - \dots - a_{1n}x_n^{(K)} \right) = \frac{1}{a_{11}} \left(b_1 - \sum_{j=2, j \neq 1}^n a_{1j}x_j^{(K)} \right) \\ x_2^{(K+1)} = \frac{1}{a_{22}} \left(b_2 - a_{21}x_1^{(K)} - \dots - a_{2n}x_n^{(K)} \right) = \frac{1}{a_{22}} \left(b_2 - \sum_{j=1, j \neq 2}^n a_{2j}x_j^{(K)} \right) \\ \dots \\ \dots \\ x_n^{(K+1)} = \frac{1}{a_{nn}} \left(b_n - a_{n1}x_1^{(K)} - \dots - a_{n(n-1)}x_{(n-1)}^{(K)} \right) = \frac{1}{a_{nn}} \left(b_n - \sum_{j=1, j \neq n}^{n-1} a_{nj}x_j^{(K)} \right) \end{array} \right.$$

$$x_i^{(K+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij}x_j^{(K)} \right)$$

On dit que A est à diagonale strictement dominante si :

$$\forall i |a_{ii}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$$

$$\forall i |a_{ii}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ji}|$$

Condition suffisante de convergence

Critère d'arrêt

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \varepsilon$$

ε : Précision donnée "Erreur"

$\|c\|$: Maximum de nombre de ligne de c nombre d'itération nécessaire pour atteindre une précision.

$$K \geq \left(\frac{\ln \frac{1-\|c\|}{\|x^1 - x^0\|} - \varepsilon}{\ln(c)} \right) - 1$$

$\ln(c)$: Rayan spectral de c

Exemple : Combien faut il d'itération d'un exemple précédent pour atteindre une précision de

$$\varepsilon = 10^{-3}$$

$$\left(\frac{\ln \frac{1-\|c\|}{\|x^1 - x^0\|} - \varepsilon}{\ln(c)} \right) - 1 = \left(\frac{\ln \frac{1-\|4\|}{1.75} - 0.001}{1.39} \right) - 1$$

$$\|x^1 - x^0\| =$$

Exemple :

$$\begin{cases} 10x_1 - x_2 + 2x_3 - 3x_4 = 0 \\ x_1 + 10x_2 - x_3 + 2x_4 = 5 \\ 2x_1 + 3x_2 + 20x_3 - x_4 = -10 \\ 3x_1 + 2x_2 + x_3 + 20x_4 = 15 \end{cases}$$

$$x^{(0)} = (0 \ 0 \ 0 \ 0); \quad \varepsilon = 5 \cdot 10^{-2}$$

$$|a_{11}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| \Leftrightarrow 10 \geq 6 (|-1| + |2| + |-3|)$$

$$|a_{22}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| \Leftrightarrow 10 \geq 4 (|1| + |-1| + |2|)$$

$$|a_{33}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| \Leftrightarrow 20 \geq 6 (|2| + |3| + |-1|)$$

$$|a_{44}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| \Leftrightarrow 20 \geq 6 (|3| + |2| + |1|)$$

$\forall i |a_{ii}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| \Rightarrow A$ est à diagonale strictement dominante \Rightarrow La méthode de Jacobie est appliquée au système $Ax=b$ et convergente pour tout $x^{(0)}$.

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right)$$

k +1= 1 et k=0

$$x_1^{(1)} = \frac{1}{10} (0 + x_2^{(0)} - 2x_3^{(0)} + 3x_4^{(0)}) = \frac{1}{10} (0 + (0) - 2(0) + 3(0)) = 0$$

$$x_2^{(1)} = \frac{1}{10} (0 - x_1^{(0)} + x_3^{(0)} - 2x_4^{(0)}) = \frac{1}{10} (5 - (0) + (0) - 2(0)) = 0.5$$

$$x_3^{(1)} = \frac{1}{20} (-10 - 2x_1^{(0)} - 3x_2^{(0)} + x_4^{(0)}) = \frac{1}{20} (-10 - 2(0) - 3(0) + (0)) = -0.5$$

$$x_4^{(1)} = \frac{1}{20} (15 - 3x_1^{(0)} - 2x_2^{(0)} - x_3^{(0)}) = \frac{1}{20} (15 - 3(0) - 2(0) - (0)) = 0.75$$

$$\varepsilon = \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| = |0.75 - 0| + |-0.5 - 0| + |0.5 - 0| + |0 - 0| = 1.75$$

k	0	1	2	3	4
$x_1^{(k)}$	0	0	0.375	0.355	0.343
$x_2^{(k)}$	0	0.5	0.3	0.264	0.272
$x_3^{(k)}$	0	-0.5	0.537	0.546	0.541
$x_4^{(k)}$	0	0.75	0.722	0.6906	0.698
$\varepsilon = \ x^{(k+1)} - x^{(k)}\ $	-	1.75	0.637	0.099	0.033

$$0.033 < \varepsilon (0.05)$$

2. Méthode de Gauss-Seidal

La méthode de Gauss-Seidal est une modification de Jacobie. L'idée principale consiste à utiliser les nouveaux résultats obtenus.

Exemple : $Ax = b$

$$x_1^{(k+1)} = c_{12}^k x_2 + c_{13}^k x_3 + b_1$$

$$x_2^{(k+1)} = c_{21}^{(k+1)} x_1 + c_{23}^k x_3 + b_2$$

$$x_3^{(k+1)} = c_{31}^{(k+1)} x_1 + c_{32}^k x_2 + b_2$$

Le nombre d'itération nécessaire pour atteindre une précision

$$K \geq \frac{\ln \varepsilon}{\ln f(c)}$$

$\ln f(c)$: Rayan spectral de c

Représenter l'exemple de Jacobie par la méthode de Gauss-Seidal.

$$x^{(0)} = (0 \ 0 \ 0 \ 0); \ \varepsilon = 10^{-3}$$

k +1= 1 et k=0

$$x_1^{(1)} = \frac{1}{10} (0 + x_2^{(0)} - 2x_3^{(0)} + 3x_4^{(0)}) = \frac{1}{10} (0 + (0) - 2(0) + 3(0)) = 0$$

$$x_2^{(1)} = \frac{1}{10} (0 - x_1^{(1)} + x_3^{(0)} - 2x_4^{(0)}) = \frac{1}{10} (5 - (0) + (0) - 2(0)) = 0.5$$

$$x_3^{(1)} = \frac{1}{20} (-10 - 2x_1^{(2)} - 3x_2^{(2)} + x_4^{(0)}) = \frac{1}{20} (-10 - 2(0) - 3(0.5) + (0)) = -0.575$$

$$x_4^{(1)} = \frac{1}{20} (15 - 3x_1^{(2)} - 2x_2^{(2)} - x_3^{(2)}) = \frac{1}{20} (15 - 3(0) - 2(0.5) - (-0.575)) = 0.75$$

$$\varepsilon = \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| = |0.7287 - 0| + |-0.575 - 0| + |0.5 - 0| + |0 - 0| = 1.8037$$

k	0	1	2	3	4	5
$x_1^{(k)}$	0	0	0	0.3536	0.3449	0.3447
$x_2^{(k)}$	0	0.5	0.5	0.2584	0.1278	0.2709
$x_3^{(k)}$	0	-0.575	-0.575	0.5407	-0.5403	-0.5409
$x_4^{(k)}$	0	0.7287	0.7280	0.8237	0.6981	0.6986
$\varepsilon = \ x^{(k+1)} - x^{(k)}\ $	-	1.8037	0.6947	0.064	0.045	$3.75 \cdot 10^{-4}$

$$0.000375 < \varepsilon (0.01)$$

Algorithme des méthodes numériques de résolution des systèmes d'équations linéaires et des différences divisées

<https://www.commentcamarche.net/forum/affich-2726074-matlab-pour-methode-de-pivot-de-gauss>

Dans ce document, les algorithmes simples de cinq méthodes pour la résolution des systèmes d'équations linéaires. Soit à résoudre le système $Ax=B$

1. Résolution des systèmes d'équations linéaires

1.1. Méthodes directs

Soit à résoudre le système $Ax = B$, dans ces algorithmes le vecteur B est considéré comme la $(n+1)^{\text{ème}}$ colonne de A.

a) Algorithme de Gauss

```

Débit
Lire la matrice a(n,n+1)
Pour k=1 à n-1
  Faire
  Pour i=k+1 à n+1
    Faire
     $w = a_{ik} / a_{kk} ;$ 
    Pour j=k+1 à n+1
      Faire
       $A_{ij} = a_{ij} - w \cdot a_{kj} ;$ 
    Fait
  Fait
Fait
 $x_n = a_{n,n+1} / a_{nn} ;$ 
Écrire ( $x_n$ ) ;
Pour i=n-1 à 1
  Faire
  
$$x_i = (a_{i,n+1} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} \cdot x_j) / a_{ii};$$

  Écrire ( $x_i$ ) ;
  Fait
Fin

```

Remarque

Dans cet algorithme, le cas où le pivot est nul n'est pris en considération, prévoir une interversion de ligne dans ce cas.