Introduction au calcul numérique
26 janvier 2006

1 Le calcul numérique?

Calcul numérique/calcul formel

La notion de calcul numérique s'oppose à celle de calcul formel. La spécialité de Maple est le calcul formel: il sait faire des calculs abstraits qui mènent à des solutions exactes (dérivées, intégrales, solutions d'équations différentielles...). Par exemple, Maple peut vous donner la dérivée de $\frac{1}{\ln(\tan(x))}$, sans calculer en chaque point $\lim_{h\to 0} \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$. Comme vous, il a appris un certain nombre de règles de base (comme $(g \circ f)'(x) = f'(x).g'(f(x))$, $(\frac{1}{f})'(x) = \frac{-f'(x)}{(f(x))^2}$,...), il a en mémoire toute une librairie de dérivées classiques (comme $\tan'(x) = 1 + \tan^2(x)$...) et il connaît toutes sortes de principes pour simplifier des expressions.
Parfois, il est impossible d'obtenir un résultat exact par le calcul formel. On doit alors utiliser le calcul numérique pour obtenir une solution approchée. Maple n'y échappe pas et il connaît de nombreux algorithmes numériques pour le calcul approché. Par exemple, chaque fois que vous faites `evalf` sur une expression, Maple utilise des algorithmes de calcul de racine carrée, d'exponentielles, etc... pour donner le résultat.

Principe général

Un problème de calcul numérique se présente le plus souvent sous la forme d'une limite à calculer:

$$\text{solution} = \lim_{n\to+\infty} \text{approximation}(n)$$

On approximera la solution en calculant "approximation" pour une grande valeur de n (1000, 1000000, ...).
En calcul numérique, on s'intéresse aussi à la *vitesse de convergence* de l'approximation. Lorsqu'on approche la solution du problème, x, par une suite d'approximations x_n ($\lim_{n\to+\infty} x_n = x$), on veut savoir si la suite converge rapidement (*i.e.* on obtient une "bonne approximation" pour un n "pas trop grand") ou lentement.
On définit pour celà l'*ordre de convergence* d'une suite de la façon suivante:

Définition *(ordre de convergence):*
On dit qu'une suite (x_n) (convergeant vers x) est *convergente d'ordre* p s'il existe une constante $C > 0$ pour laquelle on a:

$$|x - x_{n+1}| \leq C|x - x_n|^p \qquad n \geq 0$$

Si $p = 1$, on parle de *convergence linéaire*, si $p = 2$, on parle de *convergence quadratique...*

2 Résoudre numériquement une équation du type $f(x) = 0$:

On va voir trois méthodes plus ou moins efficaces que l'on va appliquer à la résolution de l'équation

$$\tan(x) = \frac{1}{x}$$

Remarquez que c'est bien une équation du type $f(x) = 0$... On commence par un tracé de courbe(s), pour avoir un premier encadrement des solutions, et on va s'intéresser aux trois premières racines positives.

Attention!: il faut faire la différence entre la précision de calcul de la racine (on cherche $\tilde{x}$ tq $|x - \tilde{x}| \leq$ précision) et tolérance sur l'erreur commise par l'approximation (on cherche $\tilde{x}$ tq $|f(\tilde{x})| \leq$ tolérance).

2.1 La méthode par dichotomie

L'idée de la dichotomie est la suivante:
a) On part d'un intervalle $[a, b]$ où la fonction f s'annule une seule fois. D'un côté de la racine, on a $f(x) > 0$ et de l'autre $f(x) < 0$.
b) On calcule $c := \frac{a+b}{2}$ et on regarde dans quel sous-intervalle ($[a, c]$ ou $[c, b]$) la fonction s'annule.
c) On remplace $[a, b]$ par cet intervalle et on recommence tant qu'on n'a pas suffisamment bien approché la solution.

1) Ecrire une procédure `dichotomie` qui prend en argument les bornes de l'intervalle de départ, une précision ϵ et une fonction f, et renvoie une approximation de la solution à ϵ près.
2) Calculez à 10^{-5} près les trois premières racines de notre équation.
3) Ecrire une procédure qui trace les erreurs $f(x_n)$ et $\log_{10}(|f(x_n)|)$ en fonction de n où x_n est la suite des valeurs de c lorsqu'on itère le principe de dichotomie.

2.2 La méthode du point fixe

Théorème du point fixe

Soit $g : I \to I$ (I un intervalle de R) contractante (pour tous x, y dans I, on a $|g(x) - g(y)| \leq K|x - y|$ avec $0 \leq K < 1$). Alors pour tout x_0 dans I, la suite des itérées de g converge vers l'unique point fixe l de g (c-à-d le seul point tel que $g(l) = l$).

Application au problème $f(x) = 0$

L'idée ici est de transformer le problème $f(x) = 0$ en un problème du type $g(x) = x$ avec g contractante au voisinage de notre point d'intérêt. En pratique, on vérifie que la fonction est contractante en regardant sa dérivée: on doit avoir $|g'(x)| < 1$.

1) Ecrivez une procédure `pointfixe` prenant en argument un point de départ, une précision ϵ et une fonction g, et donnant une approximation du point fixe l de g. Quel est le critère d'arrêt?
2) Tracer les graphes des fonctions x et $\cos(x)$ et calculer la première racine positive de $\cos(x) = x$.
3) Transformez le problème $\tan(x) - \frac{1}{x} = 0$ en un problème de point fixe et répondez aux mêmes questions que pour la dichotomie. La technique est la suivante: poser $g(x) = x - \frac{f(x)}{\lambda}$ où λ est proche de $f'(l)$ (l est le point fixe de g et la racine de l'équation $f(x) = 0$).

2.3 La méthode de Newton

Voici une méthode plus évoluée, utilisée dans de nombreux logiciels. L'algorithme est le suivant:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

avec x_0 astucieusement choisi. L'algorithme s'arrête quand $|x_{n+1} - x_n| \leq \epsilon$.
Géométriquement, on trace la tangente à la courbe en x_n et on prend pour x_{n+1} son point d'intersection avec l'axe des abscisses.
Il existe une variante, la *méthode de la sécante*, où on approxime la dérivée, car celle-ci peut-être très coûteuse à calculer. On a un algorithme à deux pas pour lequel il faut choisir astucieusement les conditions initiales x_0 et x_1:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n)$$

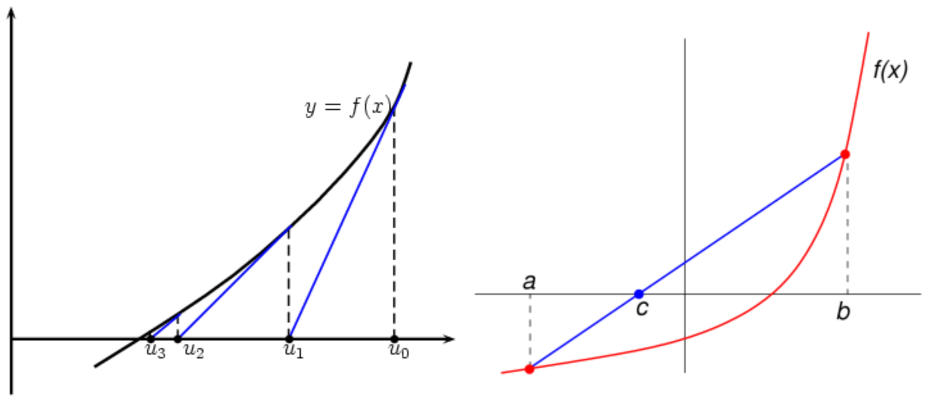

Figure 1: Méthode de Newton et méthode de la sécante. Normalement, on prend des valeurs initiales assez proches, contrairement à ce que suggère la figure.

3 Vitesses de convergence

On va essayer d'évaluer l'efficacité des méthodes. En pratique, on montre que $\frac{|x-x_{n+1}|}{|x-x_n|^p}$ tend vers une constante strictement positive quand $n \to +\infty$.

3.1 Dichotomie

A la $n^{\text{ième}}$ itération, on a une précision de $\frac{b-a}{2^{n+1}}$ sur la racine (car la racine est dans le $n^{\text{ième}}$ intervalle, dont l'amplitude est de $\frac{b-a}{2^n}$). On a donc:

$$\frac{|x-x_{n+1}|}{|x-x_n|} \simeq \frac{b-a}{2^{n+2}} \frac{2^{n+1}}{b-a} = \frac{1}{2}$$

La méthode est linéaire.

3.2 Point fixe

$$|l-x_{n+1}| = |g(l)-g(l+(x_n-l))| = |g(l)-(g(l)+(x_n-l)g'(l)+\frac{g''(l)}{2}(x_n-l)^2+o((x_n-l)^2))|$$

$$= |l-x_n||g'(l)+\frac{g''(l)}{2}(x_n-l)+o(x_n-l)|$$

donc si $g'(l) \neq 0$, on a $\frac{|l-x_{n+1}|}{|l-x_n|} \to |g'(l)|$ et la méthode est linéaire (sinon, si $g''(l) \neq 0$, elle est quadratique...).

3.3 Newton

$|x-x_{n+1}| = |x-x_n+\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}|$. On veut un DL de $\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$ à l'ordre 2:

$$f(x_n) = f(x+(x_n-x)) = f'(x)(x_n-x)+\frac{f''(x)}{2}(x_n-x)^2+o((x_n-x)^2)$$

car $f(x)=0$, donc il suffit d'un DL à l'ordre 1 pour $\frac{1}{f'(x_n)}$.
$f'(x_n) = f'(x)+(x_n-x)f''(x)+o(x_n-x)$ donc:

$$\frac{1}{f'(x_n)} = \frac{1}{f'(x)} - (x_n-x)\frac{f''(x)}{f'(x)^2}+o(x_n-x)$$

et ainsi:

$$\frac{f(x_n)}{f'(x_n)} = (x_n-x) - \frac{f''(x)}{2f'(x)}(x_n-x)^2+o((x_n-x)^2)$$

Finalement

$$\frac{|x-x_{n+1}|}{|x-x_n|^2} \to \left|\frac{f''(x)}{2f'(x)}\right|$$

La méthode est quadratique (voir plus si $f''(x)=0$...) donc beaucoup plus efficace que les précédentes. En gros, le nombre de chiffres significatifs double à chaque itération. Cependant, cette méthode est assez sensible à l'initialisation et requiert de démarrer près de la racine. La méthode de la sécante est également quadratique, la démonstration est laissée en exercice...