Chapitre 7

Méthodes de résolution d'équations

Le but

Le but de ce chapitre est d'aborder la résolution numériques d'équations ou de systèmes d'équations du genre

$$f(x) = 0 \tag{7.1}$$

Ce problème est très fortement lié à des problèmes connexes très communs en physique. Ainsi :
— Minimiser une fonction $F(x)$ est équivalent à trouver les zéro de sa dérivée : $F'(x) = f(x) = 0$.
— Trouver un point fixe x tel que $g(x) = x$ est équivalent à trouver les zéros de $f(x) = g(x) - x$.
— ...

Les motivations

On sait résoudre ce type de problèmes analytiquement (à la main) lorsque la fonction f est un polynôme d'ordre inférieur ou égal à 4. Cependant, dès que la situation devient plus compliquée, la résolution numérique devient indispensable. En particulier quand :
— la fonction f est fortement non-linéaire
— il n'existe pas de solution analytique explicite (par ex $x = e^x$, $x = \cos x$...)
— le problème implique un système linéaire d'ordre élevé : $\bar{\bar{M}}\vec{X} = \vec{Y}$
— le problème implique un système non-linéaire : $\vec{F}(\vec{X}) = \vec{0}$

Ce chapitre est principalement dédié à la résolution d'équations de faible dimension. Le cas des systèmes de grandes dimensions est laissé à une autre fois....

Le principe

Les méthodes numériques de résolution d'équations sont des méthodes itératives. Elles reposent sur le calcul d'une récurrence qui part d'un point x_0 (a priori différent de la racine que l'on cherche), et qui, de proche en proche, tend vers la racine x_*. Elles permettent donc d'obtenir une valeur approchée de la racine. Elles reposent donc sur 3 choix importants :

- Le point de départ x_0. En général, plus on part proche de la racine cherchée, plus les méthodes sont efficaces. Dans certains cas, une méthode peut ne pas converger du tout si le point de départ est inadapté.
- La méthode de récurrence $x_{n+1} = f(x_n)$. Nous verrons plusieurs méthodes différentes.

- Le critère d'arrêt. La récurrence tend en général asymptotiquement vers la racine. Il faut donc se définir un critère qui arrête la récurrence lorsque l'on est suffisamment proche de la solution. On utilise souvent l'un ou plusieurs des 3 critères suivants :
  — $n > n_{\max}$: un nombre maximal d'itérations à ne pas dépasser quoi qu'il arrive
  — $|x_{n+1} - x_n| < \epsilon_1$: lorsque deux itérations successives donnent des résultats très proches, on peut supposer que l'on a convergé vers une solution. Cependant, dans le cas d'une fonction complexe, on peut parfois, par malchance, avoir deux itérations proches tout en étant loin de la racine. De même un tel critère appliqué à une fonction très raide ne garantira pas que $f = 0$ à un grand niveau de précision.
  — $|f(x_n)| < \epsilon_2$: lorsque x est proche de la racine, $f(x)$ soit être proche de 0. Cependant, un tel critère appliqué à une fonction très plate ne fournira pas forcément une approximation précise de la racine.

Selon ces choix, les méthodes peuvent converger ou non, et lorsqu'elle convergent, elles peuvent le faire plus ou moins vite.

Performances

On estime la performance d'une méthode en comparant le nombre d'itérations nécessaires pour arriver suffisamment proche de la solution et le temps nécessaire pour exécuter une unique itération.

Pour caractériser les différentes méthodes, on définit souvent l'erreur théorique comme l'écart à la racine théorique x_* :

$$\epsilon_n = x_n - x_* \tag{7.2}$$

et on s'intéresse à l'évolution de cette suite ϵ_n lorsque $n \to +\infty$. En particulier :

- Si $\left|\frac{\epsilon_{n+1}}{\epsilon_n}\right| > 1$, l'erreur augmente itération après itération et la méthode ne converge pas.
- Si $\left|\frac{\epsilon_{n+1}}{\epsilon_n}\right| \leq \lambda < 1$, alors l'erreur diminue et la méthode converge vers la solution de manière linéraire. Par exemple, si $|\epsilon_{n+1}/\epsilon_n| \sim 0.1$, alors on rajoute un digit de précision à chaque itération.
- Si $\left|\frac{\epsilon_{n+1}}{\epsilon_n}\right| < \lambda\epsilon_n$, alors l'erreur diminue et la méthode converge vers la solution de manière quadratique. Dans ce cas, on double typiquement le nombre de digits corrects à chaque itération.
- Si $\left|\frac{\epsilon_{n+1}}{\epsilon_n}\right| < \lambda\epsilon_n^2$, alors l'erreur diminue et la méthode converge vers la solutions de manière cubique. Dans ce cas, on triple typiquement le nombre de digits corrects à chaque itération.
- etc...

Lorsqu'elle convergent, les méthodes d'ordre de convergence élevé sont les plus performantes. Mais elles sont en générale plus sensible au choix de la condition initiale.

Difficultés classiques

Quelle que soit la méthode choisie, de nombreux peuvent problèmes gêner la convergence, comme :

— la présence de plusieurs solutions
— la présence de pôles
— la présence de racines de multiplicité élevée
— des asymptotes finies en $\pm\infty$
— ...

7.1 Problèmes à 1D

Il s'agit ici de résoudre une équation du type $f(x) = 0$ où f et x sont des scalaires.

7.1.1 Dichotomie

La méthode de dichotomie requière deux valeurs de départ a_0 et b_0 qui encadrent la racine à trouver (c'est à dire telles que $f(a_0)$ et $f(b_0)$ sont de signes opposés). On fait ensuite une double récurrence sur a_n et b_n en réduisant à chaque itération la taille de l'intervalle par 2. Pour cela, on regarde le signe de la fonction au point milieu et on détermine un nouvel encadrement de la solution en utilisant ce point.

$$\forall n \geq 0 \quad \begin{cases} c = \dfrac{a_n + b_n}{2} \\ \text{Si } f(a_n)f(c) > 0 \quad \text{alors} \quad \begin{cases} a_{n+1} &= c \\ b_{n+1} &= b_n \end{cases} \quad \text{sinon} \quad \begin{cases} a_{n+1} &= a_n \\ b_{n+1} &= c \end{cases} \end{cases} \tag{7.3}$$

L'erreur de cette méthode est majorée par l'intervalle $\epsilon_n \leq |b_n - a_n| = \frac{|b_0 - a_0|}{2^n}$, si bien que $|\epsilon_{n+1}/\epsilon_n| = 1/2$. L'erreur est divisée par deux à chaque itération. Il s'agit d'une convergence linéaire.

Cette méthode est très simple à mettre en oeuvre. De plus elle est extrêmement robuste une fois que l'on a trouvé a_0 et b_0.

Cependant, elle nécessite une première recherche de a_0 et b_0 sans lesquelles elle ne peut être appliquée. De plus, sa convergence est très lente. Enfin, cette méthode est inadaptée pour les zéros de multiplicité élevée.

7.1.2 Méthode de Regula-Falsi

Il s'agit en fait d'une variante de la méthode de dichotomie dans laquelle le point intermédiaire est calculé comme le point où la droite qui joint $f(a)$ et $f(b)$ coupe l'axe zéro :

$$c = \frac{a+b}{2} - \frac{b-a}{f(b) - f(a)} \frac{f(a) + f(b)}{2}$$

Bien que l'idée semble plus efficace que celle de la dichotomie, la convergence est linéaire elle aussi.

7.1.3 Méthode du point fixe

to do...

7.1.4 Méthode Newton-Raphson

Méthode

Supposons qu'après n itération d'un récurrence, on connait une approximation x_n de la racine x_*. On cherche alors l'estimation suivante x_{n+1} de la racine telle que $f(x_{n+1}) << f(x_n)$. Or, en supposant que la méthode converge, on peut écrire que dans la limite $|x_{n+1} - x_n| \to 0$:

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

Une méthode naturelle consiste donc à choisir x_{n+1} tel que $0 = f(x_n) + (x_{n+1} - x_n)f'(x_n)$, c'est à dire :

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

Il s'agit de la méthode de Newton-Raphson.

Interprétation graphique

En la réécrivant sos la forme : $f'(x_n) = (0 - f(x_n))/(x_{n+1} - x_n)$, on voit que géométriquement, cette méthode revient à calculer x_{n+1} comme le point où la tangente à $f(x)$ en x_n coupe l'axe des abscisses (voir Fig. 7.1 à gauche).

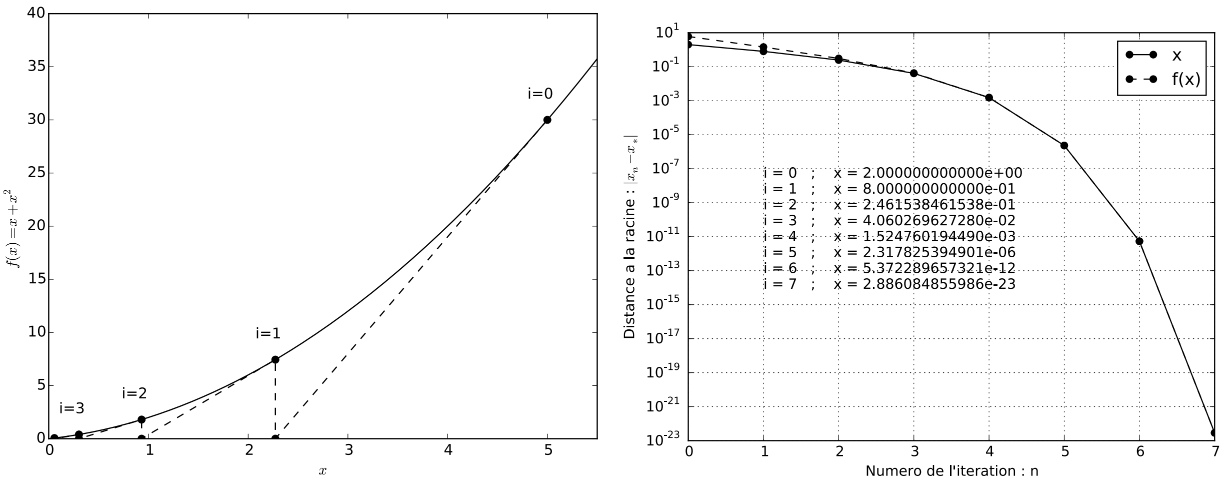

FIGURE 7.1 – Méthode de Newton appliquée à la fonction $f(x) = x + x^2$. A gauche : fonction et valeurs de la série x_n. A droite : propriétés de convergence.

Convergence

En supposant que la série converge, on peut caractériser sa convergence dans la limite $n \to \infty$. Soit $\epsilon_n = x_* - x_n$ l'erreur à l'itération n. Alors $0 = f(x_*) = f(x_n + \epsilon_n) = f(x_n) + \epsilon_n f'(x_n) + \epsilon_n^2 f''(x_n)/2 + O(\epsilon_n^3)$. En substituant $f(x_n)$ par la formule de récurrence, on obtient facilement : $x_n - x_{n+1} + \epsilon_n + \epsilon_n^2 \frac{f''(x_n)}{2f'(x_n)} = 0$, soit : $\frac{\epsilon_{n+1}}{\epsilon_n} = -\epsilon_n f''(x_n)/(2f'(x_n)) + O(\epsilon_n^2)$. Dans la limite de convergence $x_n \to x_*$:

$$\frac{\epsilon_{n+1}}{\epsilon_n} \sim -\epsilon_n \frac{f''(x_*)}{2f'(x_*)}$$

La méthode de Newton possède une convergence quadratique.

C'est ce qu'on peut observer sur la Fig. 7.1 (à droite). Au début la convergence reste modérée, puis lorsque l'on s'approche un peu de la racine, elle devient quadratique et le nombre de chiffres corrects double à chaque itération. Pour la fonction utilisée ($f(x) = x + x^2$) et le point de départ choisi ($x_0 = 5$), il suffit de 7 itérations pour atteindre la précision machine.

Cas des racines de multiplicité élévée

La méthode de Newton permet de trouver des racines de multiplicité élevée. Cependant, elle devient moins rapide dans ce cas. En effet, si la racine est de multiplicité $m > 1$, alors $f'(x_*) = 0$ et la précédente formule n'a plus de sens. Dans ce cas, $f(x) \approx (x - x_*)^m$ à proximité de la racine et on peut reproduire le raisonnement précédent en gardant les m premiers termes du développement limité :

$$\begin{aligned}
\frac{\epsilon_{n+1}}{\epsilon_n} &\approx \frac{(m-1)}{2!} - \frac{(m-1)(m-2)}{3!} + \cdots + \frac{(m-1)(m-2)\ldots 1}{m!} \\
&\approx \sum_{k=2}^{m} \frac{(-1)^k (m-1)!}{(m-k)!k!} \\
&= \frac{1}{m}\left[\sum_{k=0}^{m}(-1)^k \begin{pmatrix} m \\ k \end{pmatrix} - 1 + m\right] \\
&= 1 - \frac{1}{m}
\end{aligned}$$

On voit que dans le cas des multiplicités élevées, la convergence est linéaire, et non plus quadratique.

Méthode de la sécante

Dans certains problèmes physique, on peut ne pas connaître l'expression de la dérivée. Dans ce cas, on peut l'estimer numériquement avec l'approximation $f'(x_n) \approx \frac{f(x_n)-f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}$. La suite devient alors une récurrence à deux niveaux (il faut x_n et x_{n-1} pour calculer x_{n+1}) :

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

On peut voir cette relation comme une variante de la méthode de la fausse position (Regula-Falsi), où les deux points précédents n'ont pas été choisis de part et d'autre de la racine, mais comme les deux derniers éléments de la suite.

7.2 Problèmes à n-D

to do...