Université de Tours "François Rabelais"
Faculté de Sciences et Techniques
DEUG Sciences de la Matière 2ème Niveau 2002–2003
Calcul Numérique

CO R R I G É TD3: Première Approche à la Modélisation: Maîtriser les itérations

1. Convergence quadratique de la méthode de Newton-Raphson: Convergence quadratique veut dire que l'on gagne 2 chiffres par itération: si, à l'itération n on connaît 1 chiffre après la virgule, à l'iteraton $n+1$ on connaît 2 chiffres après la virgule, à l'itération $n+2$, 4 à l'itération $n+3$, ainsi de suite. Ce comportement est *asymptotique* (c.à.d. on ne sait pas à partir de quelle itération il va se manifester). Le but de cette question est de contrôler cette affirmation pour les fonctions du TD2.
   On commence avec l'exemple de la mécanique: on cherche les racines de l'équation
   $$f(x) = E - V(x) = E - \frac{1}{2}x^2 - g_3x^3 = 0$$
   par la méthode de Newton–Raphson. La méthode de Newton–Raphson conduit à l'itération suivante:
   $$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} = F(x_n) = \frac{x_n^2 + 4g_3x_n^3 + 2E}{2x_n + 6g_3x_n^2}$$
   Si l'on prend $g_3 = -1$ et $E = 0.01$ on cherche les deux racines (une positive et une négative), cf. fig. 1. On trouve les résultats suivants en travaillant avec simple précision

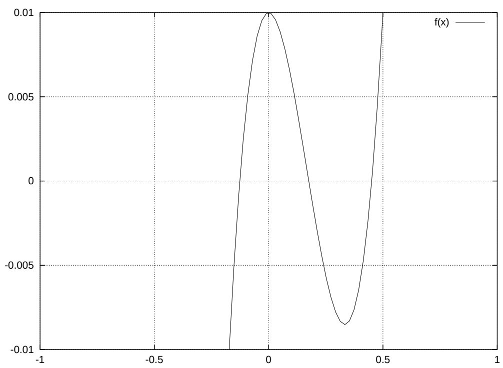

Fig. 1 – *La fonction* $f(x) = E - V(x)$ *pour* $E = 0.01$ *et* $g_3 = -1$.

(8 chiffres après la virgule)

- *Pour* $x_0 = -0.3$:

n	x_n	$F(x_n)$	$f(x_n)$
1	-0.300000012	-0.191228077	-0.0620000064
2	-0.191228077	-0.140462726	-0.0152769508
3	-0.140462726	-0.127258822	-0.00263618724
4	-0.127258822	-0.126358375	-0.000158336334
5	-0.126358375	-0.126354277	$-7.12959775E-07$
6	-0.126354277	-0.126354277	$1.10201592E-09$
7	-0.126354277	-0.126354277	$1.10201592E-09$
8	-0.126354277	-0.126354277	$1.10201592E-09$
9	-0.126354277	-0.126354277	$1.10201592E-09$
10	-0.126354277	-0.126354277	$1.10201592E-09$

On note que, au bout de $n = 3$ itérations on a 2 chiffres après la virgule, au bout de $n = 4$ itérations on a 5 chiffres, pour $n = 5$ on a 8 chiffres-très près d'une convergence quadratique!

- *Pour* $x_0 = 0.5$:

n	x_n	$F(x_n)$	$f(x_n)$
1	0.5	0.460000008	0.00999999978
2	0.460000008	0.451212823	0.00153600122
3	0.451212823	0.45079124	$6.72715469E-05$
4	0.45079124	0.450790286	$1.52681935E-07$
5	0.450790286	0.450790286	$1.19441435E-09$
6	0.450790286	0.450790286	$1.19441435E-09$
7	0.450790286	0.450790286	$1.19441435E-09$
8	0.450790286	0.450790286	$1.19441435E-09$
9	0.450790286	0.450790286	$1.19441435E-09$
10	0.450790286	0.450790286	$1.19441435E-09$

Encore une fois on note la vitesse de convergence impressionnante de la méthode: au bout de 3 itérations on obtient 5 chiffres exacts, au bout de 4, 8 chiffres–encore une fois une période transitoire très courte et une convergence presque quadratique.

2. L'exposant de Lyapounov pour la méthode de Newton-Raphson: Pour une itération quelconque, $z_{j+1} = F(z_j)$, l'exposant de Lyapounov est donné par

$$\lambda = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} \ln |F'(z_j)|$$

Dans le cas de l'itération Newton-Raphson, en particulier,

$$F(z_n) = z_n - \frac{f(z_n)}{f'(z_n)}$$

où l'on cherche les racines de la fonction $f(z)$. On peut calculer $F'(z)$ immédiatement

$$F'(z) = \frac{f(z)}{f'(z)} \frac{f''(z)}{f'(z)}$$

On note que, pour $z = z^*$, tel que $f(z^*) = 0$ (une racine), on a $z^* = F(z^*)$–c'est un point fixe de l'itération de Newton-Raphson. Si une itération $z_{j+1} = F(z_j)$ possède un point fixe *et ce point fixe est stable*, c.à.d. fait partie d'une orbite, on trouve facilement que

$$\lambda = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \left(\sum_{j=0}^{N-1} \ln |F'(z_j)| + (n-N) \ln |F'(z^*)| \right) = \ln |F'(z^*)|$$

On note ainsi que $F'(z^*) = 0$ pour Newton-Raphson, ce qui implique que $\lambda = -\infty$–la convergence est extrêmement rapide!
Le but de cette question est, alors, de contrôler que, effectivement, la racine fait partie d'une oribite stable de l'itération de Newton–Raphson.
La question précédente nous montre que la réponse est affirmative.

3. Newton-Raphson vs. Itération Directe: Ici on veut comparer la méthode de Newton-Raphson et celle de l'itération directe. Pour le cas mécanique l'itération directe prend la forme suivante:

$$E - \frac{1}{2}x^2 - g_3 x^3 = 0 \Rightarrow x_{n+1} = F(x_n) = -\frac{1}{2g_3} + \frac{E}{g_3 x_n^2}$$

En utilisant les mêmes points de départ que pour la méthode Newton–Raphson on trouve

n	x_n	$F(x_n)$	$f(x_n)$
1	0.5	0.460000008	0.00999999978
2	0.460000008	0.452741027	0.00153600122
3	0.452741027	0.451213419	0.000313118362
4	0.451213419	0.450882524	$6.73666509E-05$
5	0.450882524	0.450810403	$1.46600551E-05$
6	0.450810403	0.450794667	$3.19696278E-06$
7	0.450794667	0.45079124	$6.97102962E-07$
8	0.45079124	0.450790495	$1.52681935E-07$
9	0.450790495	0.450790316	$3.43321744E-08$
10	0.450790316	0.450790286	$5.92837557E-09$

On note une convergence nettement plus lente, en comparaison avec Newton–Raphson; aussi que, si l'on commnece avec $x_0 = -0.3$, on converge toujours vers $0.45079\ldots$; les autres racines semblent ne pas être de points fixes *stables* pour cette itération! En effet, si l'on calcule

$$|F'(x)| = \frac{2E}{g_3 x^3}$$

pour la valeur $x = -0.12635\ldots$ on trouve $|F'(-0.12635)| = 9.91526 > 1$. On en déduit que la méthode d'itération directe ne nous permet pas de calculer cette racine! Elle est bien un point fixe de l'itération–mais un point fixe *instable*.

4. **Lotka-Volterra et Newton-Raphson**: Dans ce cas l'analyse est beaucoup plus simple. On cherche les racines de

$$f(x) = x - 2e^{(x-E)/(2a)} = 0$$

que l'on peut visualiser comme l'intersection d'une droite de pente 1 et d'une exponentielle, cf. fig. 2 On note immédiatement que l'itération directe ne peut calculer qu'une

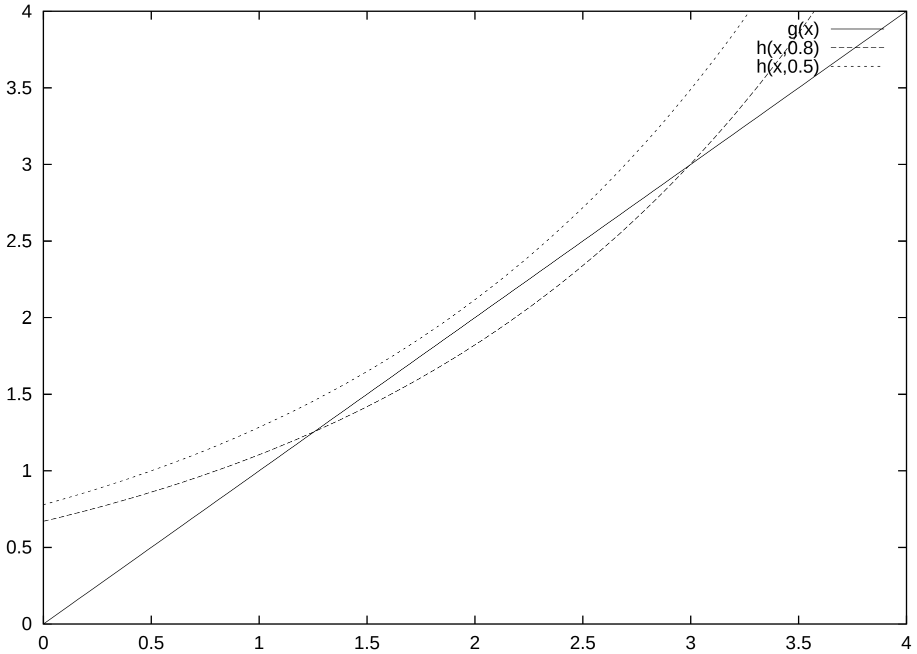

FIG. 2 – *Le graphe de* $g(x) = x$ *et* $h(x,w) = e^{(x-w)/2}$ *pour* $w = 0.5$ *et* $w = 0.8$. *On a pris* $a = 1$.

seule racine, puisque l'autre correspond à un point fixe *instable*. Par contre, la méthode de Newton–Raphson converge sur toutes les deux racines.
On prend $a = 1$ et $E = 0.8$ et l'on trouve, par la méthode de Newton–Raphson:

$$x_{n+1} = F(x_n) = \frac{(2a - x_n)e^{(x_n-E)/2a}}{2a - e^{(x_n-E)/2a}}$$

– *Pour* $x_0 = 1.0$:

n	x_n	$F(x_n)$	$f(x_n)$
1	1.	1.23506379	0.105170965
2	1.23506379	1.25604475	0.00794124603
3	1.25604475	1.2562294	$6.86645508E-05$
4	1.2562294	1.2562294	0.
5	1.2562294	1.2562294	0.
6	1.2562294	1.2562294	0.
7	1.2562294	1.2562294	0.
8	1.2562294	1.2562294	0.
9	1.2562294	1.2562294	0.
10	1.2562294	1.2562294	0.

– *Pour* $x_0 = 4.0$:

n	x_n	$F(x_n)$	$f(x_n)$
1	4.	3.35453987	0.953032494
2	3.35453987	3.06176305	0.232294083
3	3.06176305	2.99507713	0.0366234779
4	2.99507713	2.99165893	0.00170350075
5	2.99165893	2.99165034	$4.29153442E-06$
6	2.99165034	2.99165034	0.
7	2.99165034	2.99165034	0.
8	2.99165034	2.99165034	0.
9	2.99165034	2.99165034	0.
10	2.99165034	2.99165034	0.

Par itération directe on ne peut obtenir que la racine la plus petite:

n	x_n	$F(x_n)$	$f(x_n)$
1	1.	1.10517097	0.105170965
2	1.10517097	1.16484201	0.0596710443
3	1.16484201	1.20011938	0.0352773666
4	1.20011938	1.2214756	0.021356225
5	1.2214756	1.23458862	0.0131130219
6	1.23458862	1.24270976	0.00812113285
7	1.24270976	1.24776614	0.00505638123
8	1.24776614	1.25092471	0.00315856934
9	1.25092471	1.25290191	0.00197720528
10	1.25290191	1.25414109	0.00123918056

On note la convergence nettement plus lente.