Modélisation/Calculs scientifiques - GME5

Leçon 2

Méthode de Newton et équations en dimension N

G. Vinsard

Gerard.Vinsard@univ-lorraine.fr

8 mai 2017

Objectifs

- Introduire la méthode de Newton pour la résolution d'équations scalaires ;
- Généraliser au cas vectoriel.
- Fournir quelques éléments d'aide à la fabrication d'un critère d'arrêt pragmatique.

Méthode de Newton : principe

- Une fonction $\begin{array}{rcccl} f & : & \mathbb{R} & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ & & x & \longrightarrow & f(x) \end{array}$ est donnée et il s'agit (encore) de trouver x_∞ tel que

$$f(x_\infty) = 0$$

- Le principe de la méthode de Newton est de
  1. assimiler la fonction f à sa droite tangente au voisinage d'un point x_p, soit

$$f(x) = f(x_p + (x - x_p)) \approx f(x_p) + f'(x_p)\,(x - x_p)$$

  2. résoudre l'équation linéaire

$$f(x_p) + f'(x_p)\,(x_{p+1} - x_p) = 0$$

     pour trouver

$$x_{p+1} = x_p - \frac{f(x_p)}{f'(x_p)}$$

  3. et de recommencer jusqu'à convergence de la suite des x_p

L'exemple historique

- $f(x) = x^3 - 2\,x - 5$ (« Methodus Fluxionum et Serierun infinitarum », 1664–1671, I. Newton – tiré de « Histoire d'algorithmes », 1993, J.-L. Chabert).

- $f'(x) = 3\,x^2 - 2$ et donc la suite est

$$x_{p+1} = x_p - \frac{x_p^3 - 2\,x_p - 5}{3\,x_p^2 - 2}$$

Il suffit de calculer les termes successifs pour converger vers la racine[1] (il n'y en a qu'une) ;

- En fait Newton a donné une formulation plus compliquée à son algorithme, c'est Raphson (« Analysis Æquationum universalis », 1690) qui a précisé cette forme. D'où le nom de Newton-Raphson parfois utilisé pour nommer la méthode.

1. lorsqu'il y a convergence, bien sûr, voir plus loin

Méthode de Newton : un cas d'échec

► Il suffit que $f'(x_p) = 0$ pour que la méthode soit prise en défaut. Par exemple pour

$$f(x) = x^3 - 2\,x - 5 \longrightarrow x_{p+1} = x_p - \frac{x_p^3 - 2\,x_p - 5}{3\,x_p^2 - 2}$$

si le choix initial est

$$x_0 = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$$

la méthode est prise en défaut dès le calcul de x_1

► Et même si on s'écarte un peu de cette valeur critique, la suite diverge.

► La méthode de Newton peut échouer (comme toute méthode de recherche de zéros de fonctions).

L'algorithme

Données : la fonction f, un point initial x_0, on cherche la solution x_∞ de l'équation $f(x_\infty) = 0$, la précision ϵ

Résultat : x_p tel que $|x_p - x_{N-1}| \leq \epsilon$

début

- Calculer $f'(x) = \dfrac{df}{dx}(x)$;
- $x_1 \longleftarrow x_0 + 2 \times \epsilon$;
- $echec \longleftarrow 0$;
- **tant que** $|x_1 - x_0| > \epsilon$ *et* $echec = 0$ **faire**
  - $x_0 \longleftarrow x_1$;
  - $f_0' \longleftarrow f'(x_0)$, $f_0 \longleftarrow f(x_0)$;
  - **si** $f_0' = 0$ **alors**
    - $echec \longleftarrow 1$
  - **sinon**
    - $x_1 \longleftarrow x_0 - f_0/f_0'$
- **si** $echec = 1$ **alors**
  - $x_1 \longleftarrow$ "échec de l'algorithme"

Le code Maxima

```
Newton(f,x,xn):=block([fp:diff(f,x)],
  float(ev(xn-f/fp,x=xn)))$
```

- C'est très simple, mais :
  - la fonction contient le calcul de la dérivée de f ; c'est inutile de le faire à chaque appele aussi serait-il préférable d'écrire

    ```
    Newton(f,fp,x,xn):=float(ev(xn-f/fp,x=xn))$
    ```

    où *fp* doit être calculée une fois pour toute au préalable.
  - le mode d'évaluation « ev » est propre à un langage symbolique, une version plus portable à un autre langage est

    ```
    Newton(f,fp,x,xn):=float(xn-f(xn)/fp(xn))$
    ```

    où f et *fp* ne sont pas des expressions mais des fonctions déclarées, comme

    ```
    f(x):=x^3-2*x-5$
    fp(x):=3*x - 2$
    ```

Le cas de deux variables

- Si plutôt que de chercher

$$x_\infty \text{ solution de } f(x) = 0 \text{ pour } \quad f \quad : \quad \mathbb{R} \quad \longrightarrow \quad \mathbb{R}$$

il fallait chercher

$$x_\infty, y_\infty \text{ sol. de } f(x,y) = 0 \text{ et } g(x,y) = 0 \text{ pour } \left\{ \begin{array}{lcll} f & : & \mathbb{R}^2 & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ f & : & \mathbb{R}^2 & \longrightarrow & \mathbb{R} \end{array} \right.$$

- Le principe de la méthode de Newton qui est :
  - approximer la fonction par sa droite tangente en une abscisse x_p ;
  - résoudre l'équation linéaire, ce qui founit l'abscisse suivante x_{p+1}

peut être transporté à ce cas.

Détail des calculs

- La fonction $f : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^2 & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ (x,y) & \longrightarrow & f(x,y) \end{array}$ peut être vue comme une hauteur quand x et y des coordonnées au sol ;

- autour d'une position x_p, y_p, Cette hauteur varie quand x varie et quand y varie. On peut écrire

$$f(x,y) = f\left(x + (x - x_p), y + (y - y_p)\right)$$

- Pour y fixé,

$$f(x,y) = f(x_p, y) + f'_x(x_p, y)\,(x - x_p) + \dots$$

où $f'_x = \frac{\partial f}{\partial x}$ est la dérivée partielle de f par rapport à x : c'est une fonction qui dépend de x et y.

- De la même façon, pour x fixé

$$f(x,y) = f(x, y_p) + f'_x(x, y_p)\,(y - x_p) + \dots$$

Détail des calculs

► Lorsque x et y varient tous deux, on peut décider que d'abord y est fixé et donc

$$f(x,y) = f(x_p,y) + f'_x(x_p,y)\,(x-x_p) + \dots$$

puis on décide de faire varier y, soit

$$\begin{aligned} f(x,y) = \quad & \big(f(x_p,y_p) + f'_y(x_p,y_p)\,(y-y_p)\big) \\ & + \big(f'_x(x_p,y_p) + f''_{xy}(x_p,y_p)(y-y_p)\big)\;(x-x_p) + \dots \end{aligned}$$

mais le terme en $(x-x_p)\,(y-y_p)$ n'est pas plus grand que les termes en $(x-x_p)^2$ et$(y-y_p)^2$ qui sont contenus dans le reste figuré pas « ... » ; aussi écrit-on

$$f(x,y) \approx f(x_p,y_p) + f'_x(x_p,y_p)\,(x-x_p) + f'_y(x_p,y_p)\,(y-y_p)$$

c'est le développement de Taylor à l'ordre 1 de la fonction f ; c'est aussi l'équation du plan tangent en (x_p,y_p) de la « hauteur » f.

La méthode de Newton à 2 variables

- Elle consiste à chercher x_{p+1} et y_{p+1} tels que les approximations à l'ordre 1 de f et de g soient nuls, soit

$$\begin{cases} f(x_p, y_p) + f'_x(x_p, y_p)\,(x_{p+1} - x_p) + f'_y(x_p, y_p)\,(y_{p+1} - y_p) = 0 \\ g(x_p, y_p) + g'_x(x_p, y_p)\,(x_{p+1} - x_p) + g'_y(x_p, y_p)\,(y_{p+1} - y_p) = 0 \end{cases}$$

C'est un système de deux équations à deux inconnues qui s'écrit matriciellement

$$\begin{pmatrix} f'_x(x_p, y_p) & f'_y(x_p, y_p) \\ g'_x(x_p, y_p) & g'_y(x_p, y_p) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{p+1} - x_p \\ y_{p+1} - y_p \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f(x_p, y_p) \\ g(x_p, y_p) \end{pmatrix}$$

et permet de trouver une solution unique x_{p+1} et y_{p+1} à condition que

$$det\left(\begin{pmatrix} f'_x(x_p, y_p) & f'_y(x_p, y_p) \\ g'_x(x_p, y_p) & g'_y(x_p, y_p) \end{pmatrix}\right) \neq 0$$

Notations pour un nombre quelconque de variables

- Ce qui vient d'être fait pour deux variables peut être fait pour un nombre quelconque des variables ; il y a juste une question de notations à introduire.

- Un vecteur de $\mathbb{R}^N$ est noté X, ses composantes sont $(x_1, \ldots, x_p)$ et il est considéré comme vecteur colonne

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_p \end{pmatrix}$$

- La valeur d'une fonction $\begin{array}{rcccl} F & : & \mathbb{R}^N & \longrightarrow & \mathbb{R}^N \\ & & X & \longrightarrow & F(X) \end{array}$ est un vecteur de $\mathbb{R}^N$, ses composantes sont

$$F\left(X = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_p \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} f_1(X) \\ \vdots \\ f_N(X) \end{pmatrix} \text{ où } \left\{ \begin{array}{l} \forall\, n = 1 \ldots N \\ \begin{array}{rcccl} f_n & : & \mathbb{R}^N & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ & & X & \longrightarrow & f_n(X) \end{array} \end{array} \right.$$

Le développement de Taylor de F

► Si une position X_p est donnée (ses composantes sont $x_{n|p}$ pour séparer les indices n du vecteur X et p des itérations qui seront faites par la méthode de Newton) le développement de Taylor de F autour de X_p s'écrit

$$F(X) = F\left(X_p + (X - X_p)\right) = F(X_p) + \nabla F(X_p)\,(X - X_p) + \dots$$

où

$$\nabla F(X) = \begin{pmatrix} f'_{11}(X) & \dots & f'_{1N}(X) \\ \vdots & & \vdots \\ f'_{N1}(X) & \dots & f'_{NN}(X) \end{pmatrix}$$

est la matrice formée par les dérivées f_{nq} de f_m par rapport à x_q.

► Cette matrice s'appelle la matrice jacobienne de la fonction F, la notation ∇F introduit le symbole ∇ (nabla) de Hamilton qui est presque universellement utilisé nowadays.

La méthode de Newton pour un nombre quelconque de variables

- Une position X_p étant connue, la position suivante est calculée par la recherche du zéro de l'approximation à l'ordre 1 de la fonction F autour de X_p, qui est

$$F(X_p) + \nabla F(X_p)\,(X - X_p)$$

- Soit donc

$$\nabla F(X_p)\,(X_{p+1} - X_p) + F(X_p) = 0 \longrightarrow X_{p+1}$$

Il y a une résolution de système linéaire à faire.

- Le cas d'une seule variable consistait à chercher x_{p+1} tel que

$$f'(x_p)\,(x_{p+1} - x_p) + f(x_p) = 0$$

c'est exactement la même formule, *mutatis mutandis*, à savoir

$$f' \longrightarrow \nabla F$$

La particularité de la dimension $N > 1$

► Le cas d'échec patent en dimension 1 était $f'(x_p) = 0$, en dimension $N > 1$ c'est

$$\det\left(\nabla F(X_p)\right) = 0$$

Ce cas contient le cas connexe à celui de la dimension 1 de la nullité d'un vecteur

$$(f_n(X_p), \ldots, f_n(X_p))$$

mais il s'y ajoute le cas où deux de ces vecteurs sont parallèles

$$(f_n(X_p), \ldots, f_n(X_p)) = \lambda\ (f_q(X_p), \ldots, f_q(X_p))$$

ainsi que ceux où l'un quelconque de ces vecteurs est lié aux autres.

► La méthode de Newton ne fonctionne que lorsque la matrice jacobienne est inversible.

Retour sur le point fixe

- La portée du théorème du point fixe s'étend au cas de la dimension N, il se formule alors comme : une fonction

$$G \quad : \quad D \subset \mathbb{R}^N \quad \longrightarrow \quad D$$

continue

$$\forall X \in D, \forall \epsilon > 0, \exists\, \nu > 0 \text{ tq } ||X' - X|| < \nu \Longrightarrow ||G(X) - G(X')|| < \epsilon$$

et contractante

$$\exists\, L < 1 \text{ tq } \forall (X, X') \in D^2 \ : \ ||G(X) - G(X')|| < L||X - X'||$$

admet un point fixe

$$X_\infty \in D \text{ tel que } G(X_\infty) = X_\infty$$

unique.

- La question est essentiellement de comprendre ce qu'est la norme « || || »

Les normes de $\mathbb{R}^N$

► L'énoncé qui définit ce qui est entendu par « continuité » et celui de la condition de Lipschitz utilisent l'application norme

$$\begin{array}{rcccl} ||\ || & : & \mathbb{R}^N & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ & & X & \longrightarrow & ||X|| \end{array}$$

► Une telle application peut s'appeler une norme si elle est positive $||X|| \leq 0$, définie $||X|| = 0 \Longrightarrow X = 0$, homogène $\forall\, \lambda \in \mathbb{R}\ :\ ||\lambda\, X|| = |\lambda|\ ||X||$ et satisfait à l'inégalité triangulaire $\forall\, X, Y \in \mathbb{R}^N\ : ||X + Y|| \leq ||X|| + ||Y||$.

► Ces conditions font d'une norme une abstraction raisonnable qui propage les règles de la valeur absolue dans $\mathbb{R}$ (essentiellement celle de mesurer les écarts entre deux réels) dans $\mathbb{R}^N$.

► Mais il n'y a pas une application unique qui satisfait à ces conditions, aussi plutôt qu'une norme y-a-t-il des normes.

Les normes usuelles

- Les normes usuelles dans $\mathbb{R}^N$ sont
  - la norme euclidienne (ou norme 2) : $||X||_2 = \sqrt{\sum_{n=1}^{N} x_n^2}$
  - la norme 1 : $||X||_1 = \sum_{n=1}^{N} |x_n|$
  - d'une façon générale la norme p : $||X||_p = \left(\sum_{n=1}^{N} x_n^p\right)^{1/p}$
  - la norme ∞ : $||X||_\infty = \max_{n=1,\ldots N} |x_n|$
    qui est effectivement ce qu'on obtient en faisant tendre p vers l'∞ dans la norme p.
  - mais il y en a bien d'autres, comme $||X|| = \sqrt{\sum_{n=1}^{N} n\, x_n^2}$

Équivalence des normes de $\mathbb{R}^N$

- Mathématiquement toutes les normes dans $\mathbb{R}^N$ sont équivalentes, i.e. pour deux d'entre elles $||\ ||$ et $||\ ||'$

$\exists C, C' \in \mathbb{R}$ tq $\forall X \in \mathbb{R}^N : ||X|| \leq C\ ||X||'$ et $||X||' \leq C'\ ||X||$

- Ce résultat permet de montrer que si une application satisfait les conditions du point fixe pour une norme alors elle les satisfait pour une autre.

- Et donc il suffit de les vérifier pour une norme particulière afin d'exploiter le théorème pour trouver le point fixe.

La méthode du point fixe

- C'est simplement

$$X_{p+1} = G(X_p)$$

la suite devant converger vers X_∞ tel que

$$G(X_\infty) = X_\infty$$

- Ou (par exemple)

$$X_{p+1} = F(X_p) + X_p$$

pour trouver X_∞ tel que

$$X_\infty = F(X_\infty) + X_\infty \Longrightarrow F(X_\infty) = 0$$

- La méthode du point fixe est séduisante par sa simplicité, mais elle présente l'inconvénient que dans les cas pratiques les conditions du théorème sont rarement vérifiées.

Description des processus itératifs

► Les méthodes de Newton comme celle du point fixe[2] utilisent un processus itératif de la forme

$$X_{p+1} = \mathcal{A}(X_p)$$

où $\begin{array}{rcl} \mathcal{A} \ : \ \mathbb{R}^N & \longrightarrow & \mathbb{R}^N \\ X & \longrightarrow & \mathcal{A}(X) \end{array}$ est une fonction définie par la méthode choisie.

► Ces méthodes demandent un point initial X_0 ; il n'y a guère à dire là dessus en dehors du vœux pieux correspondant à l'espoir que le choix conduise à ce que les itérations convergent.

► Par contre il faut préciser ce qui est entendu par « converger. »

2. ou d'autres méthodes encore qui n'not pas été décrites

La convergence

- Une suite $\{X_p\}$ de $\mathbb{R}^N$ converge vers une limite X_∞ si

$$\forall \epsilon > 0,\ \exists\ P \text{ tq } p > P \longrightarrow ||X_p - X_\infty|| < \epsilon$$

La convergence dépend donc *a priori* de la norme choisie. Mais comme comme toutes les normes sont équivalentes dans $\mathbb{R}^N$, si elle a lieu pour une norme, elle a lieu pour toutes les autres.

- Mais cette définition de la convergence n'est pas satisfaisante dans la pratique parce qu'elle suppose que la limite X_∞ soit connue, ce qui n'est pas le cas pour les problèmes de resolution d'équation puisque c'est précisémment cette limite qui est cherchée.

- Une façon de procéder est d'introduire la propriété de Cauchy. Une suite est une suite de Cauchy si

$$\forall \epsilon > 0,\ \exists\ P \text{ tq } p > P, p' > P \longrightarrow ||X_p - X_{p'}|| < \epsilon$$

Le critère d'arrêt

- Pour qu'une suite soit de Cauchy il suffit en fait que

$$\forall \epsilon > 0,\ \exists\ P \text{ tq } p > P \longrightarrow ||X_{p+1} - X_p|| < \epsilon$$

c'est à dire que la norme de la $\neq$ de deux termes successifs puisse être rendue aussi petite qu'on veut.

- De plus on dispose d'un thèorème qui affirme que toute suite de Cauchy dans $\mathbb{R}^N$ est une suite convergente.

- L'application de ceci est que pratiquement on décide que l'itération

$$X_{p+1} = \mathcal{A}(X_p)$$

a convergé en $p = p_c$ quand

$$||X_{p_+1} - X|| < \text{un seuil fixé à l'avance}$$

c'est le critère d'arrêt de l'itération.

Le critère d'arrêt et la physique

- Dans les problèmes pratiques, les composantes de X peuvent avoir des dimensions physique, par exemple, pour $N = 2$,

$$x_1 \text{ est un mètre ; } x_2 \text{ est un Ampère}$$

- Dans le cas de l'exemple, la norme ne peut pas être la norme 2,

$$||X|| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$$

sinon des Ampère carrés (A^2) seraient ajoutés à des mètres carrés (m^2) !

- Une norme moins choquante serait

$$||X|| = \sqrt{a_1\, x_1^2 + a_2\, x_2^2}$$

où a_1 et a_2 sont deux nombres positifs d'unité $1/A^2$ et $1/m^2$. Mais que choisir pour valeur de ces nombres ?

Une solution pragmatique

► Dans un problème physique (technique) on a une idée de la précision des différentes grandeurs ; par exemple, pur reprendre l'exemple précédent on sait que le courant se mesure à $\epsilon_A = 10^{-2}\ A$ près et la distance à $\epsilon_m = 10^{-3} m$ près.

► Le critère d'arrêt sera alors de la forme : les itérations continues jusqu'à ce que

$$|x_{1|p+1} - x_{1|p}| < \epsilon_A / fac \text{ et } |x_{2|p+1} - x_{2|p}| < \epsilon_m / fac$$

où *fac* est un facteur de sécurité (par exemple 1000).

► Cela revient à fabriquer une norme *ad hoc*, et c'est en général satisfaisant.