

Introduction au calcul scientifique

(T.P. du module LMB3 — licence de mathématiques)

chap. 1 : erreur et convergence

Maximilian F. Hasler (mhasler@univ-ag.fr)

Département Scientifique Interfacultaire de l'Université Antilles-Guyane,
Campus de Schoelcher, B.P. 7209, 97275 Schoelcher cedex

9 octobre 2002

Table des matières

1	Calcul approché des valeurs d'une fonction numérique	2
1.1	Erreur absolue et relative	2
1.2	Vitesse de convergence — notions de base	3
1.3	Précision ajoutée par une iteration	3
1.4	Accélération de convergence : Δ^2 d'Aitken	4
1.5	Extrapolation de Richardson	6

1 Calcul approché des valeurs d'une fonction numérique

On étudie ici les méthodes pour calculer efficacement la valeur d'une fonction numérique. Plus précisément, on considère le cas de fonctions définies par une certaine limite, telle que par exemple une dérivée $f'(x) := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h}[f(x+h) - f(x)]$ ou une série entière $f(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^n a_k x^k$.

Rappelons d'abord quelques définitions usuelles.

1.1 Erreur absolue et relative

Définition 1.1.1 On considère une approximation x d'une valeur réelle r . On appelle $e = x - r$ **erreur absolue** et $\varepsilon = \frac{x-r}{r}$ **l'erreur relative** (pour $r \neq 0$).

Le **nombre de chiffres précis (en base 10)** est

$$N(x, r) = -\log_{10} |\varepsilon| = -\log_{10} \left| \frac{x-r}{r} \right|.$$

Exemple 1.1.2 $x = \frac{22}{7} \approx 3.1429$ comme approximation de $r = \pi \approx 3.1416$:

$$e = 0,0013, \quad \varepsilon \approx 0.0004,$$

$$\begin{aligned} N(x, r) &= N\left(\frac{22}{7}, \pi\right) = -\log_{10}(4 \cdot 10^{-4}) \\ &= 4 - \log_{10} 4 \approx 3.3 \quad (= \log_{10} \frac{1}{4 \cdot 10^{-4}} = \log_{10}(2,5 \cdot 10^3)) \end{aligned}$$

Donc c'est exact à un peu plus de 3 chiffres près.

Remarque 1.1.3 On choisit l'erreur relative (et non absolue) car on souhaite l'invariance $N(\lambda x, \lambda r) = N(x, r)$ pour tout λ : en particulier pour $\lambda = 10^k$ (décalage de la virgule), le nombre de chiffres précis ne doit pas changer.

Exemple 1.1.4 Si on considère $x = 1.1429$ comme approximation de $r = 1.1416$, on trouve toujours $e = 0,0013$, mais $\varepsilon \approx 0.0012$, et donc

$$\begin{aligned} N(x, r) &= N(1.1429, 1.1416) = -\log_{10}(1.2 \cdot 10^{-3}) \\ &= 3 - \log_{10} 1.2 \approx 2.8. \end{aligned}$$

Même si on a le même nombre de chiffres identiques que dans l'exemple précédent, l'erreur relative est 3 fois plus grande et donc la précision bien moindre ; puisque $3 \approx 10^{1/2}$, on a « un demi-chiffre précis » de moins : la fonction N étant une mesure continue de la précision, il ne faut pas s'étonner si sa valeur n'est pas toujours égale au nombre (entier) de chiffres identiques.

1.2 Vitesse de convergence — notions de base

On considère une suite (x_n) convergente vers $r = \lim x_n \in \mathbb{R}$, et on notera $e_n = x_n - r$ et $\varepsilon_n = e_n/r$ les erreurs absolues et relatives.

Définition 1.2.1 Avec les notations précédentes, on définit :

- Si $K_1 := \lim \frac{e_{n+1}}{e_n} = \lim \frac{x_{n+1}-r}{x_n-r}$ existe et $0 < |K_1| < 1$,
alors on dit que (x_n) converge **linéairement** vers r ;
- Si $K_1 = 0$ et $K_2 := \lim \frac{e_{n+1}}{(e_n)^2} \in]-1, 1[\setminus \{0\}$,
alors (x_n) converge **quadratiquement** vers r ;
- Si $K_1 = K_2 = 0$ et $K_3 := \lim \frac{e_{n+1}}{(e_n)^3} \in]-1, 1[\setminus \{0\}$,
alors (x_n) converge **cubiquement** vers r ;

la généralisation à une convergence d'ordre n est évidente.

Exemple 1.2.2 Les suites $x_n = r + \beta^n$ et $x_n = r + \beta^{2^n-1}$ convergent linéairement resp. quadratiquement vers r (pour $|\beta| < 1$). (Exercice : vérifier.)

Remarque 1.2.3 Pour construire un exemple d'une suite convergente d'ordre k , on pose $x_n = r + e_n$ avec $\frac{e_{n+1}}{(e_n)^k} = \beta \in]-1, 1[\setminus \{0\}$, soit $e_n = \beta(e_{n-1})^k = \beta(\beta(e_{n-2})^k)^k = \beta^{1+k}(e_{n-2})^{k \cdot k} = \beta^{1+k}(\beta(e_{n-3})^k)^{k^2} = \beta^{1+k+k^2}(e_{n-3})^{k^3}$ etc. jusqu'à arriver à $e_n = \beta^{\sum_{j=0}^{n-1} k^j} (e_0)^{k^n}$ et pour $e_0 = 1$, $e_n = \beta^{\frac{k^n-1}{k-1}}$.

1.3 Précision ajoutée par une iteration

Dans la pratique, on calcule itérativement la suite (x_n) (souvent par récurrence : $x_{n+1} = \varphi(x_n)$) pour approcher une valeur exacte r . On s'intéresse ici à combien on gagne en nombre de chiffres précis par itération, ce qui s'exprimera en fonction de la vitesse de convergence.

Proposition 1.3.1 Soit $x = (x_n)$ une suite convergente vers r ;

- si (x_n) converge linéairement, on a

$$N(x_{n+1}, r) \simeq N(x_n, r) - \log_{10} |K_1(x)|$$

- si (x_n) converge linéairement, on a

$$N(x_{n+1}, r) \simeq 2 N(x_n, r) - \log_{10} |r K_2(x)|$$

- si (x_n) converge cubiquement, on a

$$N(x_{n+1}, r) \simeq 3 N(x_n, r) - \log_{10} |r^2 K_3(x)|$$

Démonstration: Un calcul direct donne

$$N(x_{n+1}, r) - k N(x_n, r) = -\log_{10} \left| \frac{r^{k-1} e_{n+1}}{(e_n)^k} \right| \longrightarrow -\log_{10} |r^{k-1} K_k|. \quad \square$$

Donc, dans le cas de conv. linéaire, on gagne $-\log_{10} |K_1|$ chiffres à chaque pas, c-à-d. plus K_1 est proche de zéro, plus la convergence est rapide.

Dans le cas de conv. quadratique resp. cubique, le nombre de chiffres précis double resp. triple à chaque pas (approximativement).

1.4 Accélération de convergence : Δ^2 d'Aitken

On présente ici une formule permettant d'obtenir, à partir d'une suite (x_n) convergeante linéairement, une nouvelle suite (A_n) qui converge plus rapidement vers la même limite. Ainsi on peut obtenir une bonne approximation de la limite en calculant moins de termes.

Définition 1.4.1 On définit le Δ^2 d'Aitken comme la suite $(A_n)_{n \in \mathbb{N}+2}$ définie par :

$$A_n := \frac{x_n x_{n-2} - (x_{n-1})^2}{x_n - 2x_{n-1} + x_{n-2}}$$

Proposition 1.4.2 On a

$$A_n = x_n - \frac{(\delta_n)^2}{\delta_n - \delta_{n-1}} \quad \text{avec} \quad \delta_n := x_n - x_{n-1}$$

Démonstration: Exercice 1 $\square$

[Ind. : expliciter le membre de droite en mettant tout sur un dénominateur.]

Proposition 1.4.3 Si (x_n) cv. linéairement, on a

$$\lim \frac{A_n - r}{x_n - r} = 0$$

Démonstration: Exercice 2 $\square$

[Indication : utiliser la formule de l'ex. précédent, exprimer tout (commençant par δ_n) en terme des e_n ; multiplier numérateur et dénominateur par $1/e_n^2$ pour faire apparaître les rapports du type e_n/e_{n-1} , dont on connaît la limite par déf. de la cv. linéaire.]

Proposition 1.4.4 (règle empirique) :

Le Δ^2 d'Aitken élimine le terme dominant d'erreur de (x_n) ;

l'erreur de (A_n) est équivalente au 2^e plus grand terme d'erreur dans x_n .

Exercice 3 : (Illustration de la règle précédente) : Montrer que pour

$$x_n = r + \beta^n + \gamma^n,$$

avec $|\gamma| < |\beta| < 1$, on a : $(A_n - r) = O(\gamma^n)$.

[Ind. : calculer e_n ; exprimer $A_n - r$ en terme des e_n (formule de l'exo.2; mettre tout sur un dénominateur); mettre en facteur γ^{n-2} resp. β^{n-2} là où c'est possible; ainsi montrer que $\frac{A_n - r}{\gamma^n}$ tend vers une constante que l'on déterminera.]

(Exercice à revoir en T.P. : appli. numérique avec $\beta = 0.9$, $\gamma = 0.1$.)

Exercice : (Aitken appliqué à suite à conv. quadratique.) Calculer A_n pour $x_n = \beta^{2^n - 1}$. Comparer la vitesse de convergence de A à celle de x .

Solution: On a $x_n = \beta x_{n-1}^2$, d'où $A_{n+2} = \beta^2 x_n^3 (\beta x_n - 1) / (1 - 2\beta x_n + \beta^3 x_n^3)$.

On pourrait penser que x_n^3 tend beaucoup plus vite vers zéro que x_n , mais le doublement des chiffres précis fait que $N(x_{n+2}) \approx 4N(x_n)$ (chiffres précis), alors que $N(A_{n+2}) \approx 3N(x_n)$ seulement.

Remarque 1.4.5 *Même sans connaître le résultat précédent, la rapidité de convergence de x_n ($N(x_n) \approx 2^n$ si $N(x_0) \approx 1$) fait que l'application de Aitken devient inutile de toute façon : on travaille rarement une précision supérieure à 30 chiffres (quadruple précision du standard IEEE), et on a déjà $N(x_5) > 30$, $N(x_7) > 100$.*

Proposition 1.4.6 *Soit ℓ la limite de la suite x , $e[x] = x - \ell$ la suite des erreurs, et $A[x]$ la suite de Aitken associée à x . On a alors $e[A[x]] = A[e[x]]$. Pour comparer la convergence de $A[x]$ à celle de x , on peut donc se restreindre à l'étude de la suite des erreurs, autrement dit aux suites de limite $\ell = 0$.*

Pour démontrer la relation précédente et d'autres du même type, on peut introduire un calcul formel en posant $x' = (x_{n-1})_{n \in \mathbb{N}}$ (avec $x_{-1} := 0$, ou prendre $\mathbb{Z}$ au lieu de $\mathbb{N}...$), $\delta[x] := x - x'$ ($= 0$ ssi $x = x'$, suite constante). Ainsi, $A[x] = x - \delta[x]^2 / \delta[\delta[x]] = (x x'' - (x')^2) / (x - 2x' + x'')$.

La convergence linéaire, quadratique ou cubique s'exprime alors par la convergence de la suite $\alpha = e[x] / (e[x'])^\gamma$, avec $\gamma = 1, 2$ ou 3 , mais on pourrait aussi considérer un exposant γ non entier.

Dans ce cas, on a $A[x] = \tilde{\alpha} \cdot (x'')^{2\gamma-1}$, avec

$$\tilde{\alpha} = (- (\alpha')^2 + \alpha (\alpha')^\gamma (x'')^{(\gamma-1)^2}) / (1 - \alpha' (x'')^{\gamma-1} + \alpha (\alpha')^\gamma (x'')^{\gamma^2-1}).$$

suite équivalente à $-\alpha^2$ si $\gamma > 1$.

Si $N[x] = -\log_{10} e[x]$ est le nombre de chiffres précis, on a $N[x] \sim \gamma^2 N[x'']$ ce qui est supérieur à $N[A[x]] \sim (2\gamma - 1) N[x'']$. Dès qu'un a donc une convergence d'ordre $\gamma > 1$, le Δ^2 d'Aitken n'apporte plus d'amélioration.

1.5 Extrapolation de Richardson

On considère maintenant des quantités définies par une limite du type $T_0 := \lim_{h \rightarrow 0} T_h$.

Dans ce cas, deux problèmes peuvent apparaître lorsqu'on veut calculer T_h avec h de plus en plus petit : premièrement, le calcul peut devenir très lourd, comme par exemple pour des sommes de Riemann pour approcher une intégrale

$$T_h = \sum_{i=1}^{(b-a)/h} f(a + i h) \longrightarrow T_0 = \int_a^b f(x) dx .$$

Deuxièmement, la précision limitée de la machine fait que pour h assez petit, on aura par exemple $x + h = x$ ou au moins $f(x + h) = f(x)$, ce qui donne un faux résultat pour le taux d'accroissement $\frac{1}{h}(f(x + h) - f(x)) \rightarrow f'(x)$.

Les deux aspects empêchent de diminuer arbitrairement h pour avoir une estimation de plus en plus précise de T_0 . Dans la suite on développe une méthode pour construire une meilleure approximation de T_0 à partir de valeurs de T_h avec des h relativement grands.

Définition 1.5.1 T_h est un estimateur d'ordre h^n de T_0 ssi $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{T_h - T_0}{h^n}$ existe et est $\neq 0$.

Exemple 1.5.2 Supposons f 2 fois continûment dérivable et $f'' \neq 0$. Alors

$$T_h = \frac{f(x + h) - f(x)}{h}$$

est un estimateur d'ordre h^1 de $T_0 = f'(x)$. En effet,

$$T_h - T_0 = \dots = \frac{h}{2} f''(x) + o(h)$$

(en utilisant le D.L. de Taylor de $f(x + h)$ à l'ordre 2), d'où le résultat :

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{T_h - T_0}{h^n} = \frac{1}{2} f''(x) \neq 0.$$

La méthode que l'on présentera permettra de trouver un estimateur d'ordre h^2 de $T_0 = f'(x)$.

Remarque 1.5.3 Cet exemple est un peu primitif, il a été choisi pour sa simplicité plus que pour son utilité. Un exemple plus intéressant qu'on étudiera en T.P. sur ordinateur est celui du calcul approché d'une intégrale :

$$T_0 = \int_a^b f(x) dx \approx T_h = \sum_{i=1}^N f(a + i \cdot h) \cdot h \quad \text{avec} \quad N \frac{b-a}{h} .$$

Ici, l'approximation T_h devient lourde à calculer quand h devient petit (somme de $N \sim 1/h$ termes), d'où l'intérêt d'avoir une estimation plus précise sans trop diminuer h .

Définition 1.5.4 On appelle extrapolé de Richardson de T_h l'estimateur

$$S_h = T_{h/2} + \frac{T_{h/2} - T_h}{2^N - 1}.$$

Théorème 1.5.5 Si T_h est estimateur d'ordre h^n , alors S_h est estimateur d'ordre h^m , $m > n$.

Le correctif $R_h = \frac{T_{h/2} - T_h}{2^N - 1}$ est approximativement égal à l'erreur $T_0 - T_{h/2}$.

Démonstration: Exercice 5 (détaillé ci-dessous). □

Exercice 4 Que trouve-t-on comme extrapolé de $T_h = \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$?

Montrer qu'il est d'ordre h^2 .

[Solution : $n = 1$, $\rightsquigarrow S_h = 2T_{h/2} - T_h = \frac{1}{h} (4f(x + \frac{h}{2}) - f(x+h) - 3f(x))$.

Ordre 2 : calcul comme avant, avec dvt. de Taylor à l'ordre 3.]

Exercice 5 (Retrouver l'extrapolé de Richardson.)

Supposons qu'on ait le dvt. de Taylor $T_h - T_0 = Ah^n + Bh^m + o(h^m)$, avec $m > n$.

- a) Calculer $T_{h/2} - T_0 = ?$. Soustraire un multiple de cette 2e équation de la première afin d'éliminer le terme en h^n .

[Solution : $T_{h/2} - T_0 = Ah^n/2^n + Bh^m/2^n + o(h^m)$,

$(1) - 2^n \cdot (2) \iff T_h - 2^n T_{h/2} + (2^n - 1)T_0 = B(1 - 2^{n-m})h^m + o(h^m)$

- b) En déduire un estimateur S_h d'ordre $\geq h^m$ de T_0 , et réécrire S_h sous la forme de $S_h = T_{h/2} + R_h$.

[Solution : $\frac{T_h - 2^n T_{h/2}}{2^n - 1} + T_0 = B \frac{1 - 2^{n-m}}{2^n - 1} h^m + o(h^m)$; le membre de gauche est $-S_h + T_0$. Finalement, $S_h - T_{h/2} = \dots = \frac{-T_h + T_{h/2}}{2^n - 1} =: R_h$.]