Résolution numérique d'équations non linéaires

De nombreux problèmes issus notamment de la physique conduisent à la résolution d'équations non linéaires,

$$f(x) = 0,\ f \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$$

1 Méthode des approximations successives

À partir d'une équation $f(x) = 0$ ($f : \mathbb{R}^n \longrightarrow R^n$ de classe $\mathcal{C}^1$), on peut se ramener à un problème de point fixe :

$$x = \Phi(x) \tag{1}$$

avec $\Phi : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ de classe $\mathcal{C}^1$. On peut poser par exemple :

$$\Phi(x) = x - Bf(x)$$

avec $B \in M_n(\mathbb{R})$ inversible.

Pour résoudre (1), on se donne une condition initiale $x_0 \in \mathbb{R}^n$ (la plus proche possible d'une solution de (1)) et on considère la méthode itérative :

$$x_{k+1} = \Phi(x_k) \tag{2}$$

Nous allons étudier la convergence de ce type de méthodes itératives.

Définition 1 Soit a un point fixe de Φ ($\Phi(a) = a$).

i) a est stable au sens de Lyapunov si

$$\forall \varepsilon > 0, \exists \eta\ /\ \|x_0 - a\| < \eta \implies \|x_k - a\| < \varepsilon \qquad \forall k \geq 0$$

ii) a est instable s'il n'est pas stable au sens de Lyapunov.

iii) a est asymptotiquement stable s'il est stable au sens de Lyapunov et

$$\exists r\ /\ \|x_0 - a\| < r \implies x_k \xrightarrow{k \to +\infty} a$$

Lorsque a est asymptotiquement stable, la méthode (2) permet de calculer numériquement a à partir d'une condition initiale x_0 "suffisamment proche" de a.

Theoreme 1 *Soit Ω un ouvert de $\mathbb{R}^n$ et $\Phi : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}^n$ de classe $\mathcal{C}^1$. Soit $a \in \Omega$ un point fixe de Φ, i.e. $\Phi(a) = a$. Alors :*

a) Si $\rho\Big(D\Phi(a)\Big) < 1$ alors a est asymptotiquement stable.

b) Si $\rho\Big(D\Phi(a)\Big) > 1$ alors a est instable.

Rappel 1 $D\Phi(a) \in M_n(\mathbb{R})$ est définie par :

$$D\Phi(a) = \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial x_j}(a)\right)_{1 \leq i,j \leq n} \quad \left.\right\} \begin{array}{c} \text{différentielle de } \Phi \text{ au point } a, \\ \text{matrice Jacobienne de } \Phi \text{ au point } a \end{array}$$

Preuve 1 (du a)) Notons $x_k = a + e_k$.

$$\left\{ \begin{array}{c} x_{k+1} = \Phi(x_k) \\ a = \Phi(a) \end{array} \right. \quad \Longrightarrow \quad e_{k+1} = \Phi(a + e_k) - \Phi(a)$$

On utilise un développement de Taylor à l'ordre 1 :

$$\Phi(a + e_k) = \Phi(a) + D\Phi(a)e_k + \|e_k\| \, \varepsilon(e_k)$$

avec $\|\varepsilon(e_k)\| \to 0$ quand $e_k \to 0$.

Donc $e_{k+1} = D\Phi(a)e_k + o(\|e_k\|)$.
Si $\rho\big(D\Phi(a)\big) < 1$, il exsite une norme matricielle induite pour laquelle $\|D\Phi(a)\| < 1$.
Donc $\exists \eta > 0$ et $\alpha < 1$ tels que si $\|e_k\| < \eta$:

$$\|e_{k+1}\| \leq \alpha \, \|e_k\|$$

Donc si $\|e_0\| < \eta$, $\|e_k\| \leq \alpha^k \, \|e_0\| \xrightarrow{k \to +\infty} 0$

Remarque 1 - Ce résultat donne la convergence <u>locale</u> de la méthode : convergence de (x_k) vers un point fixe a de Φ si $\rho\big(D\Phi(a)\big) < 1$ et $\|x_0 - a\|$ assez petit.

- La solution de (1) n'est pas forcément unique.

- a) $\Longrightarrow$ $\|x_{k+1} - a\| \leq \alpha \, \|x_k - a\|$ avec $\alpha < 1$, et plus $\rho\big(D\Phi(a)\big)$ est petit, plus α est petit. On dit que la convergence est (au moins) <u>linéaire</u>.

- Sous l'effet des termes non linéaires, dans certains cas la méthode numérique (2) peut être localement convergente avec $\rho\big(D\Phi(a)\big) = 1$. <u>Exemple :</u> $x_{k+1} = x_k - x_k^3$, point fixe 0 asymptotiquement stable.

Critères d'arrêt :

a) On se donne une tolérance absolue *tol* (on pourrait aussi travailler en relatif)

$$\|x_k - x_{k-1}\| < tol$$

Cela indique également que $\|\Phi(x_{k-1} - x_{k-1})\| < tol$, c'est-à-dire que x_{k-1} est "presque" solution de $\Phi(x) = x$.

b) Lorsque Φ est une contraction sur un sous-ensemble fermé E de de $\mathbb{R}^n$, on sait que Φ admet un unique point fixe a dans E. Si $\alpha \in]0,1[$ désigne le facteur de contraction de Φ on montre que si $x_{k-1} \in E$ alors $\|x_k - a\| \leq \frac{\alpha}{1-\alpha}\|x_k - x_{k-1}\|$.

Fixer le critère d'arrêt $\|x_k - x_{k-1}\| < tol \times \left(\frac{1}{\alpha} - 1\right)$ et $x_{k-1} \in E$ garantit que $\|x_k - a\| < tol$.

c) Un critère intéressant peut être obtenu lorsque :

$$\frac{\|x_k - x_{k-1}\|}{\|x_{k-1} - x_{k-2}\|} \xrightarrow{k \to +\infty} \lambda \in]0,1[$$

Cette propriété est vérifiée avec $\lambda = \rho\big(D\Phi(a)\big)$ et pour presque toute condition initiale $x_0 \approx 0$ si λ <u>ou</u> $-\lambda$ est une valeur propre réelle simple de $D\Phi(a)$, avec toutes les autres valeurs propres de module $< \lambda$.

(alors $x_k = a + V.(\pm\lambda)^k + o(\lambda^k)$, V vecteur propre associé à $\pm\lambda$)

Alors pour k assez grand et $p \geq k$

$$\|x_k - x_p\| \leq \|x_k - x_{k+1}\| + \|x_{k+1} - x_{k+2}\| + \cdots + \|x_{p-1} - x_p\|$$

$$\Longrightarrow \|x_k - a\| \leq \sum_{j \geq k} \|x_j - x_{j+1}\| \qquad \text{(on fait tendre } p \text{ vers } +\infty\text{)}$$

On fait maintenant l'approximation :

$$\begin{aligned}
\sum_{j \geq k} \|x_j - x_{j+1}\| &\simeq \|x_k - x_{k+1}\| \times \sum_{j \geq 0} \lambda^j \simeq \frac{\lambda}{1-\lambda}\|x_k - x_{k-1}\| \\
&\simeq \frac{\|x_k - x_{k-1}\|}{\|x_{k-1} - x_{k-2}\|} \times \frac{1}{1 - \frac{\|x_k - x_{k-1}\|}{\|x_{k-1} - x_{k-2}\|}} \|x_k - x_{k-1}\| \\
&= \frac{\|x_k - x_{k-1}\|^2}{\|x_{k-1} - x_{k-2}\| - \|x_k - x_{k-1}\|}
\end{aligned}$$

On en déduit le critère d'arrêt :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{\|x_k - x_{k-1}\|^2}{\|x_{k-1} - x_{k-2}\| - \|x_k - x_{k-1}\|} < tol \\[2ex] \|x_k - x_{k-1}\| < \|x_{k-1} - x_{k-2}\| \end{array} \right. \tag{c}$$

Le théorème de convergence de la méthode des approximations successives suppose que $\rho\big(D\Phi(a)\big) < 1$. Un choix tel que $\Phi(x) = x - Bf(x)$ ($B \in M_n(\mathbb{R})$ inversible) ne garantit pas que cette hypothèse soit respectée, et que le rayon spectral soit petit (condition pour que la convergence soit rapide).

Nous allons définir un choix astucieux de fonction Φ à partir de f, pour lequel $D\Phi(a) = 0$. Il s'agit de la méthode de Newton.

2 Méthode de Newton

Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ de classe $\mathcal{C}^2$. On veut calculer numériquement une solution de l'équation :

$$f(x) = 0 \tag{3}$$

Le principe de la méthode de Newton est le suivant. Si $x_0 \in \mathbb{R}^n$ est une approximation de la solution x recherchée, on linéarise f autour de x_0 :

$$f(x) \simeq f(x_0) + Df(x_0)(x - x_0)$$

On calcule alors la solution x_1 de :

$$f(x_0) + Df(x_0)(x_1 - x_0) = 0$$

Si $Df(x_0)$ est inversible, on obtient :

$$x_1 = x_0 - Df(x_0)^{-1} f(x_0)$$

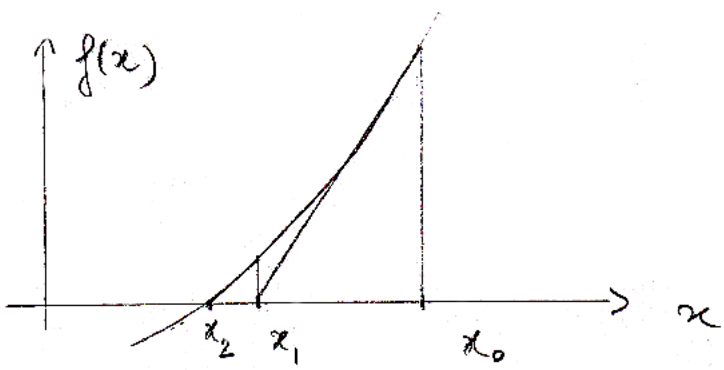
Puis on prend x_1 comme nouvelle approximation de la solution et on recommence l'opération. Cela définit la méthode itérative :

$$x_{k+1} = x_k - Df(x_k)^{-1} f(x_k) \underset{\text{déf}}{=} \Phi(x_k) \tag{4}$$

Remarque 2 Numériquement on ne calcule pas $Df(x_k)^{-1}$ mais on résout à chaque étape le système linéaire donnant x_{k+1} :

$$Df(x_k)(x_{k+1} - x_k) = -f(x_k)$$

Interprétation géométrique en dimension 1 :



Nous sommes dans le cadre de la méthode des approximations successives : on cherche une solution de $\Phi(x) = x$ avec $\Phi(x) = x - Df(x)^{-1}f(x)$. La méthode itérative (4) s'écrit $x_{k+1} = \Phi(x_k)$.

Theoreme 2 *Soit $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ de classe $\mathcal{C}^2$ au voisinage de $a \in \mathbb{R}^n$, avec $f(a) = 0$. On suppose que $Df(a)$ est inversible. Alors la fonction Φ de l'itération (4) est $\mathcal{C}^1$ au voisinage de a, et a est asymptotiquement stable. De plus, il existe $\eta > 0$ et $\alpha > 0$ tels que si $\|x_0 - a\| < \eta$ alors :*

$$\|x_{k+1} - a\| \leq \alpha \|x_k - a\|^2 \qquad \forall k \geq 0$$

Remarque 3 On dit qu ela convergence de la méthode de Newton est en moyenne quadratique. On obtient par récurrence :

$$\|x_k - a\| \leq \frac{1}{\alpha}(\alpha \|x_0 - a\|^{2^k}$$

Par exemple, si $\alpha = 1$ et $\|x_0 - a\| = 10^{-1}$, $\|x_4 - a\| \leq 10^{-16}$.

Preuve 2 La fonction $x \longmapsto \operatorname{Det} Df(x)$ est continue sur $\mathbb{R}^n$, et $\operatorname{Det} Df(a) \neq 0$, donc $\exists r > 0 \ / \ \|x - a\| < r \implies \operatorname{Det} Df(x) \neq 0$, c'est-à-dire que $Df(x)$ est inversible. La fonction Φ définie par $\Phi(x) = x - Df(x)^{-1}f(x)$ est donc $\mathcal{C}^1$ au voisinage de $x = a$. On peut donc appliquer le théorème 1.

Calculons $D\Phi(a)$.

$$f(a+h) = Df(a)h + \mathcal{O}(\|h\|^2) \qquad \text{amène :}$$

$$\begin{aligned}
\Phi(a+h) &= a + h - Df(a+h)^{-1}\Big(Df(a)h + \mathcal{O}(\|h\|^2)\Big) \\
&= a + h - \Big(Df(a)\mathcal{O}(\|h\|\Big)\Big(Df(a)h + \mathcal{O}(\|h\|^2)\Big) \\
&= a + h - \Big(I + \mathcal{O}(\|h\|)^{-1}\Big)Df(a)^{-1}\Big(Df(a)h + \mathcal{O}(\|h\|^2)\Big) \\
&= a + h - \Big(I + \mathcal{O}(\|h\|\Big)\Big(h + \mathcal{O}(\|h\|^2)\Big) \\
\Phi(a+h) &= \Phi(a) + \mathcal{O}(\|h\|^2)
\end{aligned}$$

Donc :

$$D\Phi(a) = 0 \implies a \text{ est un point fixe de } \Phi \text{ asymptotiquement stable}$$

Avec $x_k = a + e_k$ on obtient $e_{k+1} = \Phi(a + e_k) - \Phi(a) = \mathcal{O}(\|e_k\|^2)$

Remarque 4 - Lorsque la forme analytique de $Df(x)$ est inconnue, on approche $\dfrac{\partial f_i}{\partial x_j}$ par $\dfrac{f_i(x_1, \ldots, x_{j-1}, x_{j+\delta}, x_{j+1}, \ldots, x_n) - f_i(x_1, \ldots, x_n)}{\delta}$ avec $\delta \approx 0$.

- Comme précédemment, le théorème 2 donne la convergence locale de la méthode de Newton, i.e. pour une condition suffisamment proche d'un point fixe a.

- Avantage de Newton : convergence très rapide (quadratique).

- Inconvénient de Newton : coût très élevé à chaque étape, car il faut calculer à chaque fois $A_k = Df(x_k)$ et résoudre un système linéaire $A_k(x_{k+1} - x_k) = -f(x_k)$ (coût en $\mathcal{O}(n^3)$, cf méthode de Gauss).

$\Longrightarrow$ plusieurs modifications de la méthode ont été proposées. Nous verrons par exemple en TD la méthode de Broyden très employée.

Voici une autre modification (plus simple mais efficace) de Newton :

$$\begin{cases} x_{k+1} = \Phi(x_k) & \qquad \Phi(x_k) = x_k - A^{-1}f(x_k) \\ x_0 \in \mathbb{R}^n & \qquad A = Df(x_0) \end{cases}$$

On calcule une seule fois la factorisation LU de la matrice A, et on l'utilise à chaque étape pour résoudre $A(x_{k+1} - x_k) = -f(x_k)$ (coût $\mathcal{O}(n^2)$ pour $k \geq 2$).

L'inconvénient est bien sûr qu'on perd la convergence quadratique pour une convergence uniquement linéaire. En effet, si $f(a) = 0$, $D\Phi(a) = I - A^{-1}Df(a) \approx 0$ si $x_0 \approx a$, mais $\rho\Big(D\Phi(a)\Big) \neq 0$ en général.

Ce schéma se généralise en remplaçant A par $Df(x_k)$ toutes les "quelques itérations".