Travaux pratiques n°10

Recherche des zéros d'une fonction

F. Cuvellier, J. Tanoh

M.P.S.I. 1, 2013–2014

Pour évaluer la durée d'exécution des fonctions implémentées, on pourra se servir du module `time`, et de la fonction `time.time()`, qui donne le nombre de secondes écoulées depuis le 1er janvier 1970, à 0h 00.

1 Méthode par dichotomie

1.1 Principe

La méthode par dichotomie repose sur le théorème des valeurs intermédiaires : toute fonction numérique continue dans un intervalle, qui prend dans cet intervalle une valeur positive, en a, et une négative, en b, s'annule, au moins une fois, entre a et b.
En pratique, étant donnée une fonction f continue dans I, on part d'éléments a, b de I tels que $a < b$ et $f(a)f(b) \leqslant 0$, on leur associe l'élément c de I défini par la relation $c = \frac{1}{2}(a + b)$, et on remplace b par c si $f(a)f(c) \leqslant 0$, a par c sinon. Un intervalle de longueur $b - a$ aux bornes duquel le produit des valeurs de f est négatif est donc remplacé par un de longueur $\frac{1}{2}(b - a)$ qui a la même propriété pour f. Chacun d'eux possède un zéro de f.

1.2 Algorithme

On considère une fonction numérique f et des nombres a, b tels que $f(a)f(b) \leqslant 0$. On se donne un nombre $\varepsilon > 0$

1. $u = a$, $v = b$.
2. Tant que $v - u > \varepsilon$,
   - $w = (u + v)/2$.
   - Si $f(u)f(w) \leqslant 0$: $v = w$.
   - Sinon : $u = w$.
3. Retourner u.

Exercice 1.

1. Implémenter l'algorithme précédent.
2. Comment l'améliorer ? (Toute suggestion est bienvenue.)
3. Insérer dans la définition de la fonction en Python des instructions pour afficher, selon la valeur booléenne d'un paramètre optionnel, le tableau des bornes successives u, v.

1.3 Exercices

Exercice 2. Calculer les zéros de la fonction $x \mapsto e^x - 1 - 2x$. En déduire les extrema de la fonction $x \mapsto e^x - x - x^2$.

Exercice 3.

1. Déterminer un zéro de la fonction $x \mapsto x^3 - 3x - 2$.
2. Cette fonction en a un deuxième. La méthode par dichotomie permet-elle de le déterminer ?

2 Méthode de Newton

2.1 Principe

Soit f une fonction numérique dérivable dans un intervalle I de $\mathbf{R}$. On suppose qu'elle s'annule en un point ξ. Soit x un point de I. La fonction affine tangente de f au point x est la fonction

$$t \longmapsto f(x) + f'(x)(t - x).$$

Si $f'(x)$ est non nul, elle s'annule au point x' défini par la relation

$$x' = x - \frac{f(x)}{f'(x)}.$$

Par ailleurs, la formule de Taylor à l'ordre 1 entraîne qu'il existe un nombre réel $r_1(x, \xi)$ tel que

$$f(\xi) = f(x) + f'(x)(\xi - x) + r_1(x, \xi).$$

Comme $f(\xi) = 0$, on obtient la relation

$$f'(x)(x' - \xi) = r_1(x, \xi).$$

D'après la formule de Taylor, il existe un nombre réel θ tel que $0 < \theta < 1$ et $r_1(x, \xi) = \frac{1}{2} f''(x + \theta(\xi - x))(\xi - x)^2$, donc

$$x' - \xi = \frac{f''(x + \theta(\xi - x))}{2f'(x)}(x - \xi)^2.$$

On en déduit que si f' ne s'annule pas au voisinage de ξ et si f'' est bornée au voisinage de ξ alors x' est une estimation plus précise de ξ que x.
En pratique, f et f' sont strictement monotones au voisinage de ξ, et l'on peut obtenir une estimation explicite de l'erreur. De façon précise, dans le cas où f et f' sont strictement croissantes au voisinage de ξ, le quotient de la formule précédente est positif, donc x' est plus grand que ξ. En prenant pour x une estimation *par excès* de ξ, on obtient donc un nombre x' tel que $\xi < x' < x$. (Pourquoi ?) Enfin, si dans l'intervalle $[\xi, x]$, f'' est majorée par un certain nombre M, l'erreur, due à la méthode, commise sur ξ est plus petite que

$$\frac{M}{2f'(x)}(x - \xi)^2.$$

En pratique, on ne connaît pas d'estimation de $f'(x)$ mais on peut la remplacer par une valeur plus petite, à partir d'une estimation *par défaut* de ξ. En bref, il existe un nombre réel strictement positif K tel que $x' - \xi \leqslant K(x - \xi)^2$. À partir d'une estimation par excès x de ξ, on définit une suite $(x_n)_{n \in \mathbf{N}}$ par récurrence, avec les relations $x_0 = x$ et

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

et, pour tout entier naturel n, $K(x_n - \xi) \leqslant (K(x - \xi))^{2^n}$.

2.2 Calcul pratique de la dérivée

Si le logiciel de calcul dont on dispose peut déterminer une formule pour la dérivée de f (logiciel de calcul formel), le calcul pratique de la dérivée ne présente pas de difficulté particulière. Dans le cas contraire, on requiert une méthode de calcul de la dérivée de f en un point donné a.
On peut d'abord se servir de la définition

$$f'(a) = \lim_{t \to 0} \frac{f(a+t) - f(a)}{t},$$

et considérer que pour une valeur convenable, assez petite, de t, $(f(a+t) - f(a))/t$ est une estimation satisfaisante. Cependant, la formule de Taylor d'ordre 2, dans le cas où f est trois fois dérivable, montre que l'on commet une erreur systématique d'ordre 1 :

$$f(a+t) = f(a) + f'(a)t + \tfrac{1}{2} f''(a)t^2 + r_2(a, a+t)$$

donc

$$f'(a) = \frac{f(a+t) - f(a)}{t} - \tfrac{1}{2} f''(a)t - \frac{r_2(a, a+t)}{t}.$$

On peut réduire l'erreur systématique si l'on connaît la dérivée seconde de f en a, mais, en pratique, ce n'est pas le cas. On préfère utiliser les estimations des valeurs de f pour $a+t$ et pour $a-t$, puisque

$$f(a-t) = f(a) - f'(a)t + \tfrac{1}{2} f''(a)t^2 + r_2(a, a-t),$$

de sorte que

$$f'(a) = \frac{f(a+t) - f(a-t)}{2t} - \frac{r_2(a, a+t) - r_2(a, a-t)}{2t}.$$

L'erreur systématique commise est maintenant d'ordre 2. Plus précisément, la formule des accroissements finis entraîne qu'il existe un nombre réel θ tel que $0 < \theta < 1$ et

$$\frac{f(a+t) - f(a-t)}{2t} = \frac{f'(a+\theta t) + f'(a-\theta t)}{2}.$$

Soit g la fonction numérique $\theta \mapsto f'(a+\theta t) + f'(a-\theta t) - 2f'(a)$ définie dans l'intervalle $[0, 1]$ de $\mathbf{R}$. Elle est deux fois dérivable et, pour tout nombre réel θ tel que $0 \leqslant \theta \leqslant 1$, $g'(\theta) = t(f''(a+\theta t) - f''(a-\theta t))$ et $g''(\theta) = t^2(f'''(a+\theta t) + f'''(a-\theta t))$. D'après la formule de Taylor au point 0, pour tout nombre réel θ tel que $0 < \theta < 1$, il existe un nombre réel ϕ tel que $0 < \psi < 1$ et

$$g(\theta) = g(0) + g'(0)\theta + \tfrac{1}{2} g''(\phi\theta)\theta^2.$$

En particulier, il existe des nombres réels θ, ψ tels que $0 < \theta, \psi < 1$ et

$$\frac{f(a+t) - f(a-t)}{2t} = f'(a) + \tfrac{1}{4} f'''(a+\psi\theta)(\psi\theta t)^2.$$

Exercice 4.

1. Écrire un algorithme de calcul de la dérivée d'une fonction fondé sur la formule précédente. Ses trois paramètres seront la fonction f, le point a où l'on estime la dérivée et l'accroissement t de la variable.

2. L'implémenter.

3. Estimer numériquement la dérivée de la fonction $x \mapsto e^x - 1 - 2x$ au point 1, en faisant varier la valeur de t considérée. Étudier (numériquement) comment l'estimation varie en fonction de t.

2.3 Algorithmes

On considère une fonction numérique dérivable f et un élément x de I, assez voisin d'un zéro ξ de f. On se donne un nombre $\varepsilon > 0$
Deux algorithmes sont possibles, selon que l'on dispose ou non d'une formule pour la dérivée de f. Dans le second, on se donne aussi un nombre $t > 0$.

1. $u = x$, $v = u - f(u)/f'(u)$.
2. Tant que $|v - u| > \varepsilon$: $u, v = v, v - f(v)/f'(v)$.
3. Retourner v.

1. $u = x$, $v = u - 2tf(u)/(f(u+t) - f(u-t))$.
2. Tant que $|v - u| > \varepsilon$: $u, v = v, v - 2tf(v)/(f(v+t) - f(v-t))$.
3. Retourner v.

Exercice 5.

1. Implémenter les algorithmes précédents.
2. Comment les améliorer ?
3. Insérer dans la définition de la fonction en Python des instructions pour afficher, selon la valeur booléenne d'un paramètre optionnel, le tableau des valeurs successives de x.
4. La méthode de Newton ne garantit pas la convergence vers ξ de la suite $(x_n)_{n\in\mathbf{N}}$ définie précédemment. Proposer un test d'arrêt.

2.4 Exercices

Exercice 6. Calculer les zéros de la fonction $x \mapsto e^x - 1 - 2x$.

Exercice 7.

1. Déterminer un zéro de la fonction $x \mapsto x^3 - 3x - 2$.
2. Cette fonction en a un deuxième. La méthode de Newton permet-elle de le déterminer ?
3. Suggérer un autre test d'arrêt. Discuter sa pertinence.

3 Méthode de la sécante

3.1 Principe

Soit f une fonction numérique dérivable dans un intervalle I de $\mathbf{R}$. On suppose qu'elle s'annule en un point ξ. Soient x, x' des points de I. Si $f(x)$ et $f(x')$ sont distincts, la droite du plan $\mathbf{R} \times \mathbf{R}$ passant par les points $(x, f(x))$ et $(x', f(x'))$ rencontre l'axe des abscisses en un point $(x'', 0)$. Le nombre x'' est le barycentre de x et de x' pour des masses λ, λ' de somme 1. Alors $\lambda f(x) + \lambda' f(x') = 0$, donc

$$\begin{pmatrix} 1 \\ x'' \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ x & x' \\ f(x) & f(x') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda \\ \lambda' \end{pmatrix}.$$

Par conséquent, ce système d'inconnues λ, λ' est compatible et le déterminant

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x'' & x & x' \\ 0 & f(x) & f(x') \end{vmatrix}$$

est nul. En le développant suivant la première colonne, on en déduit la relation

$$\begin{vmatrix} x & x' \\ f(x) & f(x') \end{vmatrix} = x'' \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ f(x) & f(x') \end{vmatrix},$$

c'est-à-dire

$$x'' = \frac{xf(x') - x'f(x)}{f(x') - f(x)}.$$

3.1.1 Méthode de la fausse position (ou de la regula falsi)

Comme pour la méthode par dichotomie, on part de deux estimations de ξ, x et x', l'une plus petite, l'une plus grande. Par rapport à ξ, le nombre x'' donné par la formule précédente se situe du même côté qu'un seul des deux points x, x', que l'on remplace par x''. On obtient donc à chaque fois deux points que sépare ξ. En répétant le procédé, on définit des suites $(x_n^\flat)_{n\in\mathbf{N}}$ et $(x_n^\sharp)_{n\in\mathbf{N}}$ d'éléments de I, convergentes vers un zéro de f, telles que pour tout entier naturel n, $x_n^\flat \leqslant \xi \leqslant x_n^\sharp$. La méthode est sure mais, dans le cas où f est strictement convexe ou strictement concave au voisinage de ξ, l'une des deux suites $(x_n^\flat)_{n\in\mathbf{N}}$ et $(x_n^\sharp)_{n\in\mathbf{N}}$ est stationnaire, et la convergence est moins rapide que dans la méthode de Newton.

3.1.2 Méthode de la sécante

À la méthode précédente, on peut préférer la méthode de la sécante, qui présente le même inconvénient que la méthode de Newton de ne pas assurer la convergence vers un zéro de f, mais qui sur elle a l'avantage de ne pas nécessiter une estimation de la dérivée. Elle consiste à remplacer le couple (x, x') par le couple (x', x''). On définit ainsi une suite $(x_n)_{n\in\mathbf{N}}$ de nombres réels par récurrence avec les relations $x_0 = x$, $x_1 = x'$ et, pour tout entier naturel n pour lequel cela a un sens,

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

3.2 Algorithmes

Exercice 8.

1. Implémenter les deux algorithmes précédents.
2. Comment les améliorer ?

3.3 Exercices

Exercice 9. Calculer les zéros de la fonction $x \mapsto e^x - 1 - 2x$.

Exercice 10.

1. Déterminer un zéro de la fonction $x \mapsto x^3 - 3x - 2$.
2. Cette fonction en a un deuxième. La méthode de la sécante permet-elle de le déterminer ?

4 NumPy et SciPy

4.1 NumPy

Le paquet NumPy gère les tableaux de dimension n, contient des fonctions pour l'algèbre linéaire et les transformations de Fourier, ainsi que des outils pour l'intégration. Ils sont généralement codés en C, en C++ et en Fortran.

4.2 SciPy

Le paquet SciPy incorpore NumPy. Il contient notamment des modules pour les statistiques et le traitement du signal et de l'image.

4.3 Usage de NumPy et de SciPy pour la recherche des zéros d'une fonction

La fonction `numpy.roots()` du module NumPy permet de déterminer les racines d'un polynôme. Le résultat est donné sous la forme d'un tableau (`array()`). À noter que la racine carrée de -1 privilégiée pour écrire les racines complexes est désignée par `j`.
C'est le sous-module `scipy.optimize` du module SciPy qui fournit les fonctions qui implémentent notamment la méthode de recherche des zéros par dichotomie et celle de Newton.
Pour la méthode par dichotomie, on se sert de `scipy.optimize.bisect()`.
La méthode de Newton relève de la fonction `scipy.optimize.newton()`. Si on ne donne pas la dérivée de la fonction, c'est la méthode de la sécante qui est appliquée. Si on donne la dérivée et la dérivée seconde, c'est la méthode de Halley (qui repose sur la formule de Taylor d'ordre 2) qui est mise en œuvre.
Les documentations soulignent que la méthode par dichotomie est fiable mais lente, tandis que les autres ne garantissent pas le résultat.

4.4 Exercices

Exercice 11. Calculer les zéros de la fonction $x \mapsto \exp(1/(1-x^2))$ définie dans $\mathbf{R} \setminus \{1, -1\}$.

Exercice 12.

1. Déterminer les zéros de la fonction $x \mapsto \arctan(3x)$ définie dans $\mathbf{R}$. Tester les méthodes avec plusieurs valeurs initiales.

2. Mêmes questions avec la fonction $x \mapsto \sqrt[3]{x}$ définie dans $\mathbf{R}$.

Exercice 13. Factoriser le polynôme

$$\begin{aligned} X^{14} - 15X^{13} + 77X^{12} - 55X^{11} - 1043X^{10} + 4758X^9 - 9065X^8 + 7825X^7 \\ -3773X^6 + 5850X^5 - 3339X^4 - 6534X^3 + 1755X^2 + 2376X + 432 \end{aligned}$$

en produit de polynômes irréductibles à coefficients rationnels. (On peut faire en sorte que les coefficients soient entiers.) On comparera les différentes méthodes.