

Projet : Différences finies à pas complexe et application au problème de la chaînette

Sujet proposé par Nicole Spillane (nicole.spillane@cmap.polytechnique.fr)

31 octobre 2017

L'objectif de ce projet est d'effectuer la simulation numérique du problème dit de la *chaînette*. Il s'agit de trouver la position d'une corde fixée en ses deux extrémités et soumise seulement à son propre poids. Pour cela nous formulerons le problème comme un problème d'optimisation (minimisation de l'énergie potentielle) et appliquerons une méthode de gradient. Nous proposons d'améliorer la précision du calcul du gradient dans l'algorithme d'optimisation en utilisant une méthode de différences finies à pas complexes. Cette méthode, qui n'est pas plus compliquée conceptuellement ou à implémenter que les méthodes de différences finies classiques, peut permettre de gagner en précision.

Consignes Le rapport comportera deux parties :

- un rapport papier (entre 4 et 10 pages) avec les réponses aux questions théoriques, les réponses aux questions expérimentales (pouvant prendre la forme de résultats numériques ou de graphiques), des commentaires et de explications sur les résultats expérimentaux, **ainsi qu'une liste complète et commentée des programmes Python**,
- les programmes Python, envoyés par mail uniquement à nicole.spillane@cmap.polytechnique.fr. Ces programmes doivent fonctionner ! Il doit aussi être facile de changer les paramètres principaux pour les tester.

Si vous ne parvenez pas à répondre à une question ou si le résultat que vous trouvez ne correspond pas à ce qui est attendu, faite-en la remarque dans votre rapport.

1 Gain de précision avec les différences finies à pas complexe

1.1 Phénomène d'annulation

Au sein d'un code de calcul (tel que Python) les nombres réels sont représentés avec une précision finie. Cette précision finie peut conduire à de grandes imprécisions numériques lorsque l'on calcule la différence de deux nombres très proches. Même si le formalisme n'est pas tout à fait le même, nous allons expliquer ce phénomène en terme de chiffres significatifs.

Supposons que l'on ait $y = 0.1234567891234567890$ et que le système de représentation permette 10 chiffres significatifs. La représentation de y est alors $\bar{y} = 0.1234567891$. La différence est très petite puisque $(y - \bar{y})/y < 10^{-9}$ et sera anodine dans la plupart des cas. Cependant, si l'on calcule $\bar{y} - 0.1234567890 = 0.0000000001$ on ne récupère qu'un chiffre significatif et la précision est donc très mauvaise par rapport à $y - 0.1234567890 = 0.0000000001234567890$ (environ 20% d'erreur). Ceci est connu sous le nom de *phénomène d'annulation* ou *cancelling* en anglais.

1.2 Différences finies à pas complexe

Nous avons vu en cours qu'à partir du développement limité d'une fonction f (régulière et à valeurs réelles) au voisinage de $x \in \mathbb{R}$, on déduit des approximations de la dérivée en ce point. On a par exemple :

$$f'(x) = \frac{f(x + \delta) - f(x)}{\delta} + O(\delta) \quad (\text{Différences finies décentrées aval}) \quad (1)$$

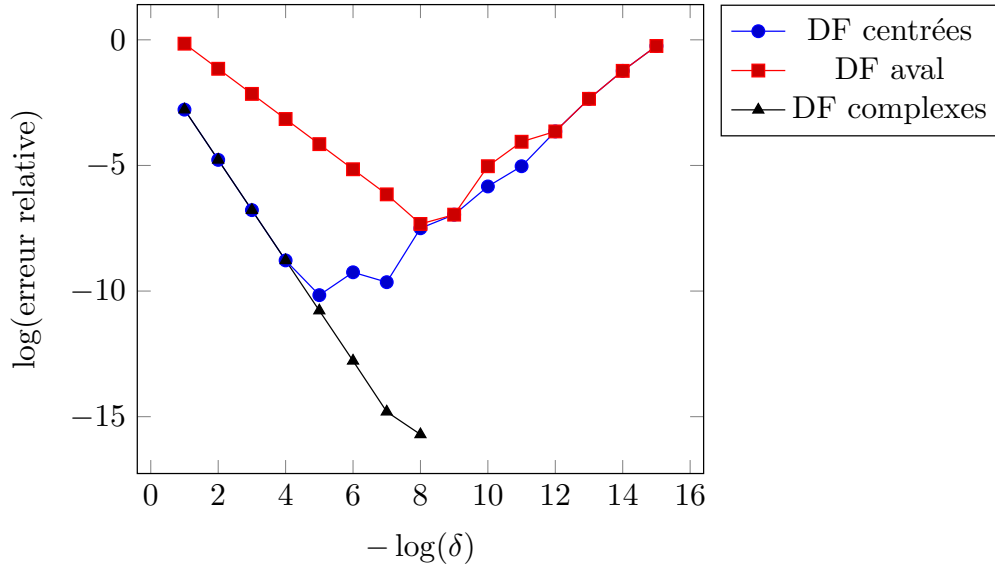


FIGURE 1 – Comparaison de l’erreur dans le calcul approché de $f'(1.5)$ par les trois méthodes.

ou encore

$$f'(x) = \frac{f(x + \delta) - f(x - \delta)}{2\delta} + O(\delta^2) \quad (\text{Différences finies centrées}). \quad (2)$$

Ces formules nous assurent qu’en arithmétique exacte, il suffit de faire tendre le pas de discrétisation δ vers 0 pour approcher $f'(x)$ aussi précisément que souhaité. Malheureusement, il peut y avoir une perte de précision dans le calcul de la différence $\Delta f = f(x + \delta) - f(x)$ ou $\Delta f = f(x + \delta) - f(x - \delta)$ par l’ordinateur à cause du phénomène d’annulation.

Pour cette raison les différences finies à pas complexe ont été introduites¹. Si f est une fonction analytique à valeurs réelles on peut calculer son développement de Taylor pour une perturbation purement complexe $i\delta$ autour du point $x \in \mathbf{R}$:

$$f(x + i\delta) = f(x) + i\delta f'(x) - \delta^2 \frac{f''(x)}{2} - i\delta^3 \frac{f'''(x)}{6} + \dots \quad (3)$$

Question 1 : En utilisant (3) justifier le fait que l’approximation

$$f'(x) \approx \frac{\text{Im}(f(x + i\delta))}{\delta} \quad (4)$$

est d’ordre 2 (où $\text{Im}(z)$ désigne la partie imaginaire de $z \in \mathbf{C}$). Au vu de ce qui a été expliqué dans le paragraphe précédent, pourquoi peut on s’attendre à une plus grande précision numérique avec la formule (4) qu’avec les approximations classiques (1) et (2) ?

1.3 Exemple

On considère la fonction $f(x) = \sin(x)$ et on souhaite approcher $f'(1.5) = \cos(1.5)$ par différences finies. Bien sûr ceci n’est qu’un exemple permettant de bien comprendre le comportement des différentes méthodes puisqu’on connaît déjà la valeur exacte de la dérivée.

Dans la Figure 1, on a tracé l’erreur relative entre la valeur exacte de $f'(1.5)$ et l’approximation calculée par la méthode des différences finies pour des valeurs de δ allant de 1 à 10^{-15} . Les trois courbes correspondent aux trois versions de la méthode des différences finies que nous avons évoquées : centrées (2), décentrées aval (1) et complexes (4).

1. Pour plus de détails, vous pouvez consulter l’article *Martins, J. R., Sturdza, P., et Alonso, J. J. (2003). The complex-step derivative approximation. ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS), 29(3), 245-262.*

Question 2 : Réaliser la même expérimentation numérique et représenter les résultats dans une figure similaire à la Figure 1.

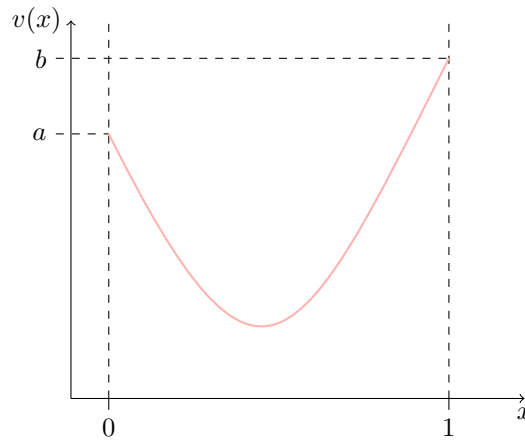
Question 3 : Commenter ces résultats.

2 Problème de la chaînette

Le problème dit de la chaînette est de trouver la forme prise par un fil pesant flexible infiniment mince homogène inextensible suspendu entre deux points, placé dans un champ de pesanteur uniforme². Dans ce projet, nous allons résoudre ce problème numériquement en utilisant une méthode de gradient où ∇J est approché par la méthode des différences finies à pas complexe.

2.1 Modélisation du problème

On considère un fil pesant fixé à ses deux bouts. On note x l'abscisse et $v(x)$ la hauteur du fil au point x .



Notations. On notera $v(0) = a$ et $v(1) = b$ les hauteurs des deux extrémités du fil et on considérera les abscisses entre 0 et 1. La longueur totale du fil est notée L et sa densité massique constante ρ .

Modélisation. Le principe de moindre action de la mécanique nous dit que la forme prise par le fil pesant minimise l'énergie potentielle. Il faut donc établir la formule de l'énergie potentielle du fil suivant sa forme décrite par la fonction $v(\cdot)$.

Question 4 : Montrer que la contrainte de longueur du fil peut s'écrire comme :

$$\int_0^1 \sqrt{1 + v'(x)^2} dx = L.$$

Question 5 : (facultative) En établissant l'énergie potentielle d'un élément infinitésimal du fil fonction de $v(\cdot)$, $v'(\cdot)$ et de ρ établir que l'énergie potentielle du fil pesant vaut :

$$E_{\text{pot}}(v) = \rho \int_0^1 v(x) \sqrt{1 + v'(x)^2} dx.$$

2. Galilée pensait que c'était un arc de parabole, mais Leibniz, Jean Bernoulli, et Huygens ont montré en 1691, indépendamment, qu'il n'en était rien.

Optimisation. Nous avons donc à résoudre le problème suivant sur l'espace des fonctions \mathcal{C}^1 :

$$\begin{cases} \min_{v \in \mathcal{C}^1} [E_{\text{pot}}(v)] \\ v(0) = a \\ v(1) = b \\ \int_0^1 \sqrt{1 + v'(x)^2} dx = L \end{cases} \quad (5)$$

Nous choisissons d'injecter la contrainte sur la longueur du fil dans la fonctionnelle à minimiser. Ce procédé (décrit dans le poly) est connu sous le nom de pénalisation. On cherchera désormais

$$\min_{v \in \mathcal{C}^1; v(0)=a; v(1)=b} \left[E_{\text{pot}}(v) + \frac{1}{\epsilon} \left(\int_0^1 \sqrt{1 + v'(x)^2} dx - L \right)^2 \right],$$

où ϵ est *un petit paramètre* à choisir qui permet de pondérer l'importance relative de l'énergie potentielle et de la contrainte de longueur dans la fonctionnelle à minimiser.

Pour résoudre ce problème de façon approchée, nous allons le discrétiser. L'intervalle $[0, 1]$ est discrétisé avec N points équidistants, le pas de discrétisation étant noté h (par conséquent $h = 1/(N-1)$). Nous notons $(v_j)_{j \in [0, N-1]}$ les approximations de $v(h * j)$, c'est-à-dire les approximations de la hauteur du fil correspondant aux abscisses $h * j$. Avec ces notations, nous considérons le problème discrétisé suivant :

Trouver $v = (v_j) \in \mathbb{R}^N$, tel que $v_0 = a$ et $v_{N-1} = b$, minimisant :

$$J(v) = h \sum_{j=0}^{N-2} \frac{v_j + v_{j+1}}{2} \left(1 + \left(\frac{v_{j+1} - v_j}{h} \right)^2 \right)^{1/2} + \frac{1}{\epsilon} \left(h \sum_{j=0}^{N-2} \left(1 + \left(\frac{v_{j+1} - v_j}{h} \right)^2 \right)^{1/2} - L \right)^2 \quad (6)$$

2.2 Résolution numérique

Posons³ $a = b = 0$ et $L = 2 * \sinh(1/2)$.

On va mettre en place une méthode de gradient pour résoudre le problème. Partant de la solution $v_0^0 = a$, $v_{N-1}^0 = b$ et $v_j^0 = -0.1$ pour $0 < j < N-1$ on réalisera les itérations suivantes :

$$v^{k+1} = v^k - \alpha \frac{\nabla(J(v^k))}{\|\nabla(J(v^k))\|_2}.$$

Question 6 : Donner la valeur (réelle) de $J(v^0)$ pour le choix de paramètres : $N = 50$, $\alpha = 10^{-3}$, $\delta = 10^{-10}$, $\epsilon = 10^{-3}$.

Question 7 : Implémenter la méthode du gradient, en utilisant la méthode de différences finies à pas complexe pour approcher chaque composante de $\nabla(J(v^k))$. Notons que puisque les conditions aux limites sont connues, on ne met pas à jour les valeurs de v_0^{k+1} et v_{N-1}^k qui restent égales à a et b respectivement. Tracer l'évolution de J en fonction du numéro de l'itération et la solution finale obtenue ainsi que plusieurs solutions intermédiaires.

Question 8 : Préciser le critère d'arrêt utilisé pour arrêter l'algorithme d'optimisation et commenter ce choix.

Question 9 : Étudier l'influence du paramètre de pénalisation ϵ . Pour cela vous pouvez tracer séparément l'évolution des deux termes dans la somme qui constitue J .

Question 10 : Effectuer le même processus d'optimisation en approchant le gradient avec une méthode de différences finies classiques. Faites varier δ . La méthode de différentiation complexe apporte-t-elle une amélioration sur ce cas ?

3. Dans ce cas la solution analytique du problème avant discrétisation est connue et vaut $v(x) = \cosh(x - 1/2) - \cosh(1/2)$.